





## Lietuvos Nacionalinė Fizikos Konferencija

2017 m. spalio 4–6 d., Vilnius Nacionalinis fizinių ir technologijos mokslų centras

# PROGRAMA IR PRANEŠIMŲ TEZĖS

Konferenciją remia:



Lietuvos mokslo taryba





Vilniaus universitetas Fizinių ir technologijos mokslų centras Kauno technologijos universitetas Lietuvos fizikų draugija

### 42-oji LIETUVOS NACIONALINĖ FIZIKOS KONFERENCIJA 2017 m. spalio 4-6 d., Vilnius

### PROGRAMA IR PRANEŠIMŲ TEZĖS

#### Konferencijos data:

2017 m. spalio 4-6 d.

#### Konferencijos vieta:

Nacionalinis fizinių ir technologijos mokslų centras Saulėtekio al. 3 LT-10257 Vilnius, Lietuva

#### Konferencijos pirmininkas:

J. Vaitkus

#### Programos komitetas:

G. Juzeliūnas ir G. Tautvaišienė (pirmininkai) D. Abramavičius V. Balevičius P. Balkevičius J. Banys A. Dargys A. Dubietis G. Gaigalas V. Jonauskas A. Jukna S. Juršėnas G. Juška G. Laukaitis R. Lazauskaitė A. Piskarskas G. Račiukaitis V. Remeikis **R.** Rotomskis J. Ruseckas V. Sirutkaitis G. Tamulaitis S. Tamulevičius I. Vaitkus L. Valkūnas G. Valušis

V. Vansevičius

A. Žukauskas

#### Organizacinis komitetas:

- G. Juzeliūnas (pirmininkas)
- V. Butkus (pirmininko pavaduotojas)
- A. Kononovičius
- M. Mackoit
- Š. Masys
- M. Maskoliūnas
- V. Novičenko
- E. Pakštienė
- J. Ruseckas
- E. Stonkutė
- J. Tamulienė
- G. Tautvaišienė

#### ISBN 978-609-459-880-7

#### DOI 10.15388/proceedings/LNFK.42

© Vilniaus universitetas, 2017

- © Fizinių ir technologijos mokslų centras, 2017
- © Kauno technologijos universitetas, 2017
- © Lietuvos fizikų draugija, 2017

### Turinys

Konferencijos programa
Stendinių pranešimų sąrašas7
Konferencijos dalyvių tezės
Kviestiniai pranešimai16
Žodinės sesijos
1A33
1B
2A43
2B47
3A52
3B56
4A59
4B62
5A67
5B71
6A76
6B79
7A82
7B87
8A91
8B96
Stendinės sesijos
S1
S2
\$3
S4
Autorių rodyklė

## Konferencijos programa

Spalio 4 d.

LNFK-42

8:30	Atvykimas ir	registracija 뿥
8:45	Konferencijos atidar	ymas 🖉 (A101 aud.)
	Lietuvos mokslo premijos laureatų pranešimai (A101 aud., pirm. G. Juzeliūnas)	
9:00	<b>D. Abramavičius</b>   Vilniaus universitetas	
	G Juška K Arlauskas K Genevičius Vilniaus universitetas	
9:30	Krūvininkų pernaša ir rekombinacija netvarkios sandaros medžiagose	
10:00	Kavos per	traukėlė 🦫
	Užsienio lietuvių mokslo premijos laureatų p	ranešimai (A101 aud., pirm. G. Valušis)
10:30	<b>R. Gaška</b>   UVTON, Inc. (JAV) Will deep UV LEDs be a next big thing in III-nitride technology	)?
11:00	<b>K. Staliūnas</b> , W. Ahmed, M. Botey, R. Herrero, Z. Hayran, H. Management of light patterns based on local Hilbert transform	I. Kurt   Universitat Politècnica de Catalunya (Ispanija)
11:30 -	- 13:00 Stend	linė sesija S1
	Žodinė sesija 1A (A101 aud., pirm. E. Anisimovas)	Žodinė sesija 1B (D401 aud., pirm. G. Laukaitis)
13:00	<b>1A-1   J. Armaitis</b> , R. Duine Superfluidity and spin superfluidity in spinor Bose gases	<b>1B-1   Š. Meškinis</b> , A. Vasiliauskas, S. Tamulevičius, R. Gudaitis Neigiamos gigantiškos pjezovaržos efektas deimanto tipo
		anglies dangose
		<b>1B-2</b>   <b>A. Kežionis</b> , E. Kazakevičius, D. Petrulionis, S. Kazlauskas A Žalga
13:20	1A-2   J. Ruseckas, G. Juzeliūnas, I. A. Yu Netiesinė kvantinė optika sukininei lėtai šviesai	Fazinių virsmų kietųjų oksidų joniniuose laidininkuose
	1	tyrimai superplačiajuostės pilnutinės varžos spektroskopijos metodu
		<b>1B-3</b>   <b>P. Baronas</b> , P. Ščajev, V. Čerkasovas, G. Kreiza, P.
13:40	<b>1A-3</b>   <b>M. Kaciunas</b> , N. Unal, E. Anisimovas, A. Eckardt Charge fractionalization in small fractional-Hall samples	Adomenas, K. Kazlauskas, JC. Ribierre, C. Adachi, S. Juršėnas
		Exciton diffusion in bifluorene single crystals
		<b>1B-4</b>   I. Anusca, S. Balčiūnas, P. Gemeiner, Š. Svirskas, M. Sanlialp, G. Lackner, C. Fettkenhauer, J. Belovickis, V.
14:00	<b>1A-4</b>   <b>O. Rancova</b> , D. Abramavicius Dvigubų sužadinimų spektrinių linijų formos dvimatėje	Samulionis, M. Ivanov, B. Dkhil, <b>J. Banys</b> , V. V.
	elektroninėje spektroskopijoje	Dielectric response of the methylammonium lead halide solar
		cell absorbers
14:20	Kavos per	traukėlė 🖕
	Žodinė sesija 2A (A101 aud., pirm. V. Balevičius)	Žodinė sesija 2B (D401 aud., pirm. K. Kazlauskas)
	<b>2A-1</b>   <b>A. Ruseckas</b> , D. A. Vithanage, A. Matheson, G. J. Hadley, S. J. Baarson, J. D. W. Samuel, V. Brangulis, V.	<b>2B-1</b> D. Gailevičius, L. Jonušauskas, S. Sakirzanovas, R.
14:40	Gulbinas [kviestinis praneš.]	Malinauskas
11.10	Charge carrier localisation, mobility and separation rates in	Fabrication of tri-dimensional glass-ceramic micro- and
	polymer solar cells	nanostructures using direct laser writing and pyrolysis
	2A-2   A. Gelžinis, D. Abramavičius, J. P. Ogilvie, L.	<b>2B-2</b>   <b>M. Ireideris</b> , M. Norkus, M. Kamarauskas, A. Mironas, S. Balakauskas, V. Bukauskas, I. Matulaitiene, G.
15:00	Valkūnas	Niaura, A. Šetkus
	spektroskopinės antrosios jotosistemos reakcijų centro savybės	2D molibdeno disulfido lakštų auginimo CVD metodu iš
	<b>2A-3</b>   <b>V. Balevičius iaun.</b> , K. F. Fox, B. Mennucci, C. D. P.	<b>2B-3</b>   <b>A. Zdaniauskienė</b> . T. Charkova, I. Matulaitienė, G.
15.20	Duffy	Niaura
15.20	Karotenoidų vaidmuo dinamiškai reguliuojant šviesorankos	Au@SiO <sub>2</sub> nanodalelių sintezė ir pritaikymas paviršiaus
	κυπριεκδά δαλααιτιτη	<b>2B-4</b>   <b>M. Mackoit</b> , A. Alkauskas, L. Weston, D.
15.40	2A-4   A. Vyšniauskas, M. Kuimova	Wickramaratne, M. W. Doherty, C. G. Van de Walle
15.40	Temperatūros poveikis klampai jautriems fluoroforams	Boro vakansijų ir boro vakansijų kompleksų heksagoniniame
16.00	17.20 <b>Stard</b>	boro nuriae optines savybes

Spalie	o 5 d.	LNFK-42
	Užsienio lietuvių mokslo premijos laureatų p	ranešimai (A101 aud., pirm. S. Juršėnas)
9:00	<b>R. Juškaitis</b>   University of Oxford (Jungtine Karalyste)	rated?
	<b>A. Pivrikas</b> , K. Genevičius, G. Juška   Murdoch University (	Australija)
9:30	Hot photocarriers in crystalline and disordered semiconductors	; ;
10:00	Kavos per	traukėlė 🖕
	Žodinė sesija 3A (A101 aud., pirm. A. Dubietis)	Žodinė sesija 3B (D401 aud., pirm. I. Kašalynas)
	3A-1   R. Gadonas, M. Malinauskas, M. Vengris	3B-1 F Auksorius [kyjestinis praneš]
10:30	Erdvėje ir laike koncentruotos šviesos sąveikos su medžiaga: I.	Full-field optical coherence tomography and its applications
	fotocheminių reakcijų tyrimai ir valdymas	
10 50	3A-2   R. Gadonas, M. Malinauskas, M. Vengris	3B-2   K. Adomavičius, M. Ivanov, Ž. Svirskas, V. Vaičaitis
10:50	Erdveje ir laike koncentruotos šviesos sąveikos su medžiaga:	Plačiajuostės terahercų dažnio spinduliuotės generavimas ore
	<b>34-3</b> R Gadonas <b>M Malinauskas</b> M Vengris	
	Erdvėje ir laike koncentruotos šviesos saveikos su medžiaga:	3B-3   K. Ikamas, A. Lisauskas, D. Voß, H. G. Roskos
11:10	III. trimačių nanodarinių taikymai fotonikoje, optikoje ir	Didelio jautrio plačiajuostis terahercinis silicio KMOP
	biomedicinoje	technologijos jutiklis
11:30 -	- 13:00 Sten	dinė sesija S3
	Žodinė sesija 4A (A101 aud., pirm. R. Gadonas)	Žodinė sesija 4B (D401 aud., pirm. G. Juška)
	4A-1   A. Pugžlys, C. Gollner, V. Shumakova, S. Ališauskas,	<b>4B-1   A. Alkauskas</b> , D. Wickramaratne, L-X. Shen, C. E.
	A. Baltuška, A. Voronin, A. Mitrofanov, D. Sidorov-	Dreyer, M. Engel, M. Marsman, G. Kresse, S.
13:00	Biryukov, A. Zheltikov, D. Kartashov kviestinis pranes.	Marcinkevičius, C. G. Van de Walle
	Long-wavelength juaments in the atmospheric transparency	Fe kaip nespindulinės rekombinacijos GaN šaltinis
	white w	4B-2   I. Mickevičius, D. Dobrovolskas, M. Kolenda, M.
	4A-2   A. Varanavičius [kviestinis praneš.]	Dmukauskas, T. Grinys, A. Kadys, T. Malinauskas, K.
13:20	Kelių optinių ciklų teravatų smailinės galios impulsų	Nomeika, R. Aleksiejūnas, G. Tamulaitis
	generacija parametrinio stiprinimo sistemomis	Krūvininkus lokalizuojančio potencialo InGaN kvantinių
		duobių dariniuose modifikavimas
	4A-3   M. Ivanov, P. Stanislovaitis, A. Matijošius, T. Gertus,	<b>4B-3</b>   <b>K.</b> Gelžinyte, R. Aleksiejunas, K. Nomeika, S. Nargalas, S. Miasaiadayas, A. Alkauskas, K. M. Kalahnar, J.
13.40	V. Smilgevičius	Kuritzky S Nakamura I S Speck
13.40	Generation of polarization singularities by parametric	Study of excess carrier dynamics in homoepitaxial m-plane
	amplification of optical vortices	InGaN quantum well
	4A-4   S. Frankinas, T. Bartulevičius, A. Michailovas	4B-4   J. Jurkevičius, D. Dobrovolskas, Ž. Podlipskas, K.
14:00	Pasyvios modų sinchronizacijos iterbio femtosekundiniai	Nomeika, M. Kolenda, A. Kadys, T. Malinauskas, J.
	skaiduliniai lazeriai spinduliuotės dažnio keitimui	Mickevičius, R. Aleksiejūnas, G. Tamulaitis
14.20	punuuuojuni nellesinius procesus	1 Iniv stuoksnių auginimas impuisiniu MOC VD metodu
14:20	Xavos per	Žadinė sasija 5P (D401 and nirm I Panys)
	54 1 C. Dažinkaitia [[wiastinia propage]]	5B-1   L Ardaravičius O Kinrijanovič M Ramonas F
14:40	APPOLO projektas - kajo lazerinės technologijos randa kelia i	Šermukšnis, I. Liberis, A. Matulionis
	bramone	Elektronų dreifo greitis legiruotame ZnO
	1	5B-2   P. Ščajev, R. Aleksiejūnas, S. Miasojedovas, S.
	5A-2   A. Puišys, D. Paipulas, V. Sirutkaitis	Nargelas, M. Inoue, C. Qin, T. Matsushima, C. Adachi, S.
15:00	Optinių bangolaidžių integravimas į lydytą kvarcą	Juršėnas
	jemtosekunaintais sviesos impulsais	Regimes of carrier diffusion and recombination in vapor
_	5A-3   M Karnavičius S Butkus D Painulas V	αερονιεά τεαα-πατίαε ρετοννκτίες
	Sirutkaitis	5B-3   E. Pozingytė, R. Butkutė, B. Čechavičius, G. Niaura,
15:20	Kreiva trajektorija sklindančių femtosekundinių šviesos	M. Skapas, A. Selskis, V. Karpus, A. Krotkus
	pluoštų formavimas naudojant iš stiklo išpjautas fazines	Dismuto nanokristattiat atkattiniose GaAsDi/AtAs kvantinese duobėse
	kaukes	autorist .
	<b>5A-4</b>   <b>I. Tolenis</b> , L. Grinevičiūtė, A. Melninkaitis, R. Burgelie I. Možulė I. Smelekuro M. Šžinka A. Salakie	<b>5B-4</b>   <b>M. Simenas</b> , M. Gusowska, M. Maczka, G. Völkel, A. Pöppl J. Banya
15:40	Naujos kartos optiniai komponentai: nuo skaidrinančiu iki	Flectron paramagnetic resonance spectroscopy of hybrid
	aukšto atspindžio dangų	metal-formate perovskites
16:00 -	- 17:30 Sten	dinė sesija S4
17:30	Lietuvos fizikų draugijos visuo	tinis susirinkimas 🕲 (A101 aud.)
17:45	Svečių pranešimai A. Poviliūnas   VU ab	solventai ir mokytojo karjera: koncepcija, galimybės ir tinklas
18:15	(A101 aud., pirm. J. Vaitkus) V. Mačiulis   Visų kart	ų fizikų rezonansinė sueitis FiDi 50-osios dienos proga
19:00	Konferencijos vakaro	nė 🗞 (Saulėtekio al. 9-I)

### Konferencijos vakaronė 🗞 (Saulėtekio al. 9-I)

Spalio 6 d.

	Kviestinis pranešimas (A101 at	ıd., pirm. A. Alkauskas)
0.00	J. Žmuidzinas   California Institute of Technology (JAV)	
9.00	Superconducting detectors for astrophysics	
	Užsienio lietuvių mokslo premijos laureato pra	nešimas (A101 aud., pirm. A. Alkauskas)
9:30	D. Ceburnis, J. Ovadnevaite, C. D. O'Dowd   National Unive	ersity of Ireland Galway (Airija)
10.00	Aerozolių, debesų ir klimato sąveika	
10:00	Kavos per	traukėlė 🖗
	Zodinė sesija 6A (A101 aud., pirm. R. Rotomskis)	Zodinė sesija 6B (D401 aud., pirm. K. Zubovas)
10:30	<b>6A-1</b>   L. Kontenis, A. Golaraei, M. Samim, S. Krouglov, K. Mirsanaye, R. Cisek, B. Wilson, R. Navab, MS. Tsao, E. Žurauskas, J. Venius, R. Rotomskis, <b>V. Barzda</b> [kviestinis praneš.] Ultrastructural bio-imaging with polarimetric nonlinear optical microscopy	<b>6B-1   K. Pyragas [kviestinis praneš.]</b> Didžioji šimtmetį brandinta fizikų svajonė išsipildė: buvo aptiktos gravitacinės bangos ir GW150914 signalas
10:50	<b>6A-2</b>   <b>M. Tutkus</b> , G. Karzaitė, Š. Ivanovaitė, T. Marčiulionis, D. Rutkauskas, M. Zaremba <i>Pavienių molekulių fluorescencinė ir FRET mikroskopija DNR ir baltymų sąveikos tyrimams</i>	<b>6B-2</b>   <b>Š. Mikolaitis</b> , G. Tautvaišienė, A. Drazdauskas, R. Ženovienė, E. Pakštienė, R. Janulis, V. Bagdonas, L. Klebonas Spektroskopinė ir fotometrinė šiaurinio dangaus apžvalga EKA PLATO kosminei misijai
11:10	<b>6A-3   D. Dapkutė</b> , S. Steponkienė, R. Rotomskis Mezenchiminių ir vėžinių kamieninių ląstelių atsakas į nanodalelių poveikį	<b>6B-3</b>   <b>A. Valantinas</b> , K. M. Kinch, A. Bridžius New evidence for recent geologic activity on the surface of the Moon
11:30	Kavos per	traukėlė 🖕
	Žodinė sesija 7A (A101 aud., pirm. D. Matulis)	Žodinė sesija 7B (D401 aud., pirm. A. Matulis)
11:50	<b>7A-1   J. Chmeliov</b> , A. Gelžinis, E. Songaila, R. Augulis, L. Valkūnas, A. V. Ruban Temperature-dependent fluorescence from the aggregates of photosynthetic light-harvesting complexes and the origin of non-photochemical quenching	<b>7B-1</b>   A. Rinkevičius, CMS kolaboracija [kviestinis         praneš.]         Tiesioginės viršūninio kvarko ir Higgs bozono sąveikos         paieška su LHC
12:10	7A-2   M. Maciulevičius, M. Tamošiūnas, M. S. Venslauskas, S. Šatkauskas Sonoporacijos dozimetrijos tyrimai	<ul> <li><b>7B-2</b>   <b>V. Jonauskas</b>, Š. Masys, J. Koncevičiūtė, A. Kynienė,</li> <li>S. Pakalka</li> <li><i>Dvigubo ir trigubo Ožė procesų C<sup>+</sup> jone tyrimas</i></li> </ul>
12:30	<b>7A-3   L. Diska</b> , L. Valkūnas, M. Mačernis DNR sekos kirpimo mechanizmo aktyvaus centro modeliavimas restrikcijos endonukleazėje	<b>7B-3   M. Ambrozas</b> , A. Juodagalvis Matavimu grįsti Drell-Yan proceso triukšmo įvykių skaičiaus įvertinimo metodai
12:50	7A-4   A. Vaitkuvienė, I. Čiplys, V. Gėgžna, D. Varanius, G. Terbetas, V. Steponėnas, J. Ušinskienė, L. Neverauskienė Žmogaus tarpslankstelinių diskų savitosios fluorescencijos spektrų sąsaja su Modic patologija	7 <b>B-4   V. Novičenko</b> , E. Anisimovas, G. Juzeliūnas Aukšto dažnio analizė periodiškai sužadintoms kvantinėms sistemoms su papildoma lėta laikine priklausomybe
13:10	Pertra	uka 🖩
	Zodinė sesija 8A (A101 aud., pirm. A. Alaburda)	Zodinė sesija 8B (D401 aud., pirm. S. Tamošiūnas)
14:00	<b>8A-1</b>   <b>G. Steiner</b> , R. Galli, O. Uckermann, E. Koch, G. Schackert, M. Kirsch Intraoperative detection of brain tumors with infrared spectroscopy and coherent antistokes Raman scattering	<b>8B-1   A. Bernotas</b> Du įžymūs XX a. fizikai, susiję su Lietuva
14:20	<b>8A-2   S. Bagdonas</b> , A. Maršalka Askorbato įtaka tetrapirolinių fotosensibilizatorių fotovirsmams: sugerties ir EPR spektroskopiniai tyrimai	<b>8B-2   D. Šatkovskienė</b> Lyčių lygybė Europos Sąjungos mokslo politikos kontekste
14:40	<b>8A-3</b>   <b>G. Jarockytė</b> , D. Dapkutė, V. Karabanovas, J. V. Daugmaudis, F. Ivanauskas, R. Rotomskis 3D sferoidinių ląstelių kultūrų pritaikymas priešvėžinių vaistų tyrimuose	<b>8B-3   E. Kuokštis</b> Tarptautinės fizikos olimpiados – iššūkiai dabartiniame Lietuvos kontekste
15:00	<b>8A-4   A. Kalnaitytė</b> , S. Bagdonas, R. Rotomskis Šviesos sukelti CdTe kvantinių taškų spektrinių savybių pokyčiai modelinėse ir biologinėse terpėse	<b>8B-4   P. Jonušas</b> , S. Tamošiūnas Edukacija ilgo termino laisvojo sprendimo bendrosios fizikos užduočių konkursuose

Spalio 4	d. 11:30 – 13:00 Stendinė sesija S1
S1-01	<b>A. Acus</b> , A. Dargys Atvirkštiniai multivektoriai šešiu dimensiju geometrinėse algebrose
<b>S1-0</b> 2	A. Deveikis Skleidimo harmoninio osciliatoriaus bazėje su skirtingais variaciniais parametrais kiekvienai vidinei Jakobi koordinatei konvergavimo greičio tyrimas skaičiuojant kuloninės trijų netapatingų dalelių sistemos nereliatyvistinę pagrindinės būsenos energiją
<b>S1-03</b>	<b>I. Gaižiūnas</b> , J. Šulskus, V. Gulbinas 1,3,4-Oksadiazolio chromoforų struktūros ir elektroninio spektro modeliavimas
<b>S1-04</b>	<b>K. Jasinevičius</b> , L. Valkūnas, M. Mačernis Pradinių bakteriorodopsino fotociklo būsenų retinalio molekulės modeliavimas
<b>S1-05</b>	<b>V. Juknevičius</b> , J. Armaitis, J. Ruseckas Aukščių variacijos dideliais atstumais ir šiurkštumo kinetika augančiuose paviršiuose
<b>S1-06</b>	<b>R. Karpuškienė</b> , R. Kisielius, P. Bogdanovičius Radiacinių šuolių parametrai volframo jonuose su atviru 4d sluoksniu
<b>S1-07</b>	<b>R. Kazakevičius</b> , J. Ruseckas Išorinės jėgos potencialų poveikis heterogeninės difuzijos procesams
<b>S1-08</b>	<b>A. Kynienė</b> , S. Pakalka, V. Jonauskas, Š. Masys Fe <sup>8+</sup> ionizacija elektronais
<b>S1-09</b>	<b>D. Liupševičius</b> , P. Rynkun, L. Radžiūtė, G. Gaigalas, J. Bieroń Theoretical studies of Si <sup>+</sup> and Ti <sup>+</sup> ions energy spectra dependence on fine-structure constant
<b>S1-10</b>	<b>R. Maldžius</b> , T. Lozovski, J. Sidaravičius, K. Backfolk Jonu judrio ir tankio skajčiavimas popieriuje pagal potencialo išelektrėjimo kinetikas
<b>S1-11</b>	Š. Masys, V. Jonauskas Deformuotu SrRuO2 plonuiu plėvelių modeligvimas taikant tankio funkcionalo teorija
<b>S1-12</b>	<b>S. Pakalka</b> , S. Kučas, Š. Masys, A. Kynienė, V. Jonauskas Se <sup>3+</sup> viengubos ionizacijos elektronais tvrimas
<b>S1-13</b>	<b>M. Račiūnas</b> , E. Anisimovas, C. Sträter, A. Eckardt, I. B. Spielman, G. Juzeliūnas Semi-synthetic zigzag optical lattice for ultracold atoms
<b>S1-1</b> 4	<b>L. Radžiūtė</b> , G. Gaigalas, J. Bieroń, P. Jönsson Multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock calculations of atomic electric dipole moments for <sup>129</sup> Xe
<b>S1-15</b>	<b>L. Razinkovas</b> , A. Alkauskas Virpesinės izoliuotų taškinių defektų savybės
<b>S1-16</b>	<b>E. Rybakovas</b> , A. Gelžinis, L. Valkūnas Atvirų kvantinių sistemų skaičiavimai: pernašos tenzorių metodo pritaikomumas
<b>S1-17</b>	<b>M. Šimėnas</b> , S. Balčiūnas, J. Banys, E. E. Tornau Metilamonio švino jodidas – struktūrinių fazinių virsmų sekos pavyzdys
<b>S1-18</b>	<b>G. Žlabys</b> , E. Anisimovas Kvazivienmatės kintamo magnetinio srauto optinės gardelės
S1-19	<b>H. R. Hamedi</b> , J. Ruseckas, G. Juzeliūnas Slow optical solitons for atoms characterized by combined Lambda and tripod level structure
<b>S1-20</b>	<b>H. R. Hamedi</b> , J. Ruseckas, G. Juzeliūnas Electromagnetically induced transparency using combined Lambda and tripod level structure
<b>S1-21</b>	A. Kononovičius Universalios Seimo rinkimų statistinės savybės ir jų modeliavimas
<b>S1-22</b>	<b>A. Kononovičius</b> , V. Gontis Pliūpsnių statistika ir netikra ilga atmintis Forex duomenyse
<b>S1-23</b>	<b>V. Kudriašov</b> , J. Ruseckas, G. Juzeliūnas, MJ. Lee, CY. Lee, KF. Chang, HW. Cho, I. A. Yu Spinor slow light formation in cold atomic gas
<b>S1-24</b>	<b>V. Kudriašov</b> , J. Ruseckas, G. Juzeliūnas, MJ. Lee, CY. Lee, KF. Chang, HW. Cho, I. A. Yu Oscillation phenomenon of two-color slow light in quantum medium
<b>S1-25</b>	<b>V. Kudriašov</b> , J. Ruseckas, G. Juzeliūnas, MJ. Lee, CY. Lee, KF. Chang, HW. Cho, I. A. Yu Nonlinear frequency conversion and interferometry with slow light
<b>S1-26</b>	<b>V. Bagdonas</b> , A. Drazdauskas, G. Tautvaišienė, R. Smiljanic, Y. Chorniy Chemical composition of giant stars in the open cluster IC 4756
<b>S1-27</b>	M. Čeponis, R. Stonkutė, V. Vansevičius Netaisyklingosios nykštukinės galaktikos Leo A žvaigždėdaros istorija
<b>S1-28</b>	<b>A. Drazdauskas</b> , G. Tautvaišienė, E. Stonkutė, R. Ženovienė, Š. Mikolaitis, V. Bagdonas, Y. Chorniy, Ž. Misikonytė <i>CNO elementų pasiskirstymas Paukščių Tako galaktikoje</i>
<b>S1-29</b>	<b>R. Kisielius</b> , F. H. Cashman, V. P. Kulkarni, G. J. Ferland, P. Bogdanovičius Revised spectroscopic data for absorption lines relevant to observations of interstellar and intergalactic matter

<b>S1-30</b>	A. Leščinskaitė, R. Stonkutė, V. Vansevičius Netaisyklingosios nykštykinės galaktikos Leo A senoji žvaigždžių populiacija
\$1-31	R. Minkevičiūtė, G. Tautvaišienė, I. Ilyin
51 51	Padrikasis žvaigždžių spiečius NGC 6939: cheminės sudėties tyrimas
<b>\$1-32</b>	<b>K. Naujans</b> , D. Semionov, R. Stonkue, V. Vansevicius Netaisyklingosios nykštukinės galaktikos Leo A žvaigždžių 2-D pasiskirstymas
<b>\$1-33</b>	E. Stonkutė, R. P. Church, S. Feltzing
	Binary stars in the Milky Way Galaxy V. Dūdėnas, T. Gaidosik
<b>S1-34</b>	Renormalization of the neutrino sector of Grimus-Neufeld model
<b>\$1-35</b>	<b>T. Gajdosik</b> , A. Juodagalvis, D. Jurčiukonis The loop improved Yukawa couplings of the Grimus-Neufeld model
\$1-36	J. Garankin, E. Lagzdina, D. Lingis, A. Plukis, A. Gudelis, A. Garbaras
51 50	Radioaktyvių atliekų mažų energijų beta spektrometrija naudojant puslaidininkinius detektorius M. Gaspariūnas, V. Kovalevskij, A. Plukis, K. Južkevičius, R. Buzelis, R. Drazdys, V. Remeikis,
<b>\$1-37</b>	Priemaišų identifikavimas HfO <sub>2</sub> dangoje naudojant jungtinį PIXE-RBS metodą
<b>\$1-38</b>	<b>D. Jurčiukonis</b> , L. Lavoura
61.00	J. Koncevičiūtė, S. Kučas, Š. Masys, A. Kynienė, V. Jonauskas
51-39	Se <sup>2+</sup> jono dviguba jonizacija elektronu
<b>S1-40</b>	<b>A. Plukis</b> , V. Barkauskas, D. Germanas, R. Plukiene, L. Juodis, V. Remeikis Branduolinio reaktoriaus konstrukciju aktyvacijos skaitinio modeliavimo optimizavimas
\$1-41	<b>P. Rynkun</b> , G. Gaigalas, P. Jönsson, K. Wang
31-41	Theoretical study of energy spectra and radiative transitions of P-like ions
<b>\$1-42</b>	Sunkiųjų barionų M1 šuolių pločių skaičiavimas
<b>S1-43</b>	<b>A. Stepšys</b> , S. Mickevičius, D. Germanas, R. K. Kalinauskas
04.44	A. Kupliauskienė, V. Borovik, I. Shafranyosh, O. Borovik
<b>S1-44</b>	Autoionization cross section of Ba atoms excited by electron impact
<b>S1-45</b>	<b>A. Kupliauskiene</b> , V. Borovik, I. Shafranyosh, O. Borovik The electron-impact excitation functions of the 5p <sup>5</sup> n <sub>1</sub> l <sub>1n2</sub> l <sub>2n3</sub> l <sub>3</sub> LSJ states in Ba atom
<b>\$1-46</b>	A. Kupliauskienė, V. Borovik, I. Shafranyosh, O. Borovik
_	Spectroscopic classification of the 4p° shell excited states in Sr atoms A. Kupliauskienė, V. Roman, O. Borovik
<b>S1-47</b>	Angular distribution of scattered electrons in excitation of autoionizing states in Rb atoms
<b>S1-48</b>	<b>V. Pyragas</b> , K. Pyragas Uždelsto grįžtamojo ryšio valdymo metodo teorijos plėtojimas
<b>S1-49</b>	T. Pyragienė, K. Pyragas
_	Chaotinių sistemų dinamikos prognoze taikant algoritmus be delsos elementų S. Kvedaravičiūtė, A. Cedillo, K. Aidas
<b>S1-50</b>	DFT predictions of acidity constants for compounds exhibiting tautomerism
<b>\$1-51</b>	<b>A. Bukauskytė</b> , R. Striela, R. Karpicz, L. Labanauskas, A. Gruodis, D. Peckus, R. Augulis, V. Gulbinas Perilenų fluorescencijos kvantinių našumų priklausomvbė nuo iu cheminės struktūros
<b>\$1-52</b>	A. Ibenskas, M. Šimėnas, E. E. Tornau
51 52	Daugelio būsenų modelis trikampių molekulių susitvarkymams skaičiuoti V Kavaliūnas E Krugly G Laukaitis
<b>\$1-53</b>	Priemaišų įtaka TiO <sub>2</sub> plonų sluoksnių fotokatalitinėms savybėms
<b>S1-54</b>	<b>D. Lengvinaitė</b> , V. Klimavičius, K. Aidas
	<b>D. Peckus</b> , T. Matulaitis, J. Simokaitienė, T. Tamulevičius, V. Mimaitė, D. Volyniuk, M. Franckevičius, V. Gulbinas,
<b>S1-55</b>	S. Tamulevičius, J. V. Gražulevičius
0	<b>R. Platakytė</b> , J. Čeponkus, C. Crepin-Gilbert, V. Šablinskas
\$1-56	Fluoruotų acetilacetono darinių struktūros ir sąveikos su vandens molekulėmis tyrimas
<b>\$1-57</b>	<b>M. Spandyreva</b> , I. Ignatjev, Z. Kuodis, G. Niaura Potencialo itaka monosluoksnio su fenilo galine grupe paviršiaus sustiprintiems Ramano sklaidos spektrams
\$1-58	S. Strazdaitė, R. Budvytytė, E. Navakauskas, I. Ignatjev, G. Valinčius, G. Niaura
51-50	Amiloido-β fibrilių formavimasis ant biologinių paviršių A Urba D. Voliulia I. Šorlauckas I. Tamulianė F. Neurialia
<b>S1-59</b>	Ozono interferencijos tyrimas gyvsidabrio halogenidų atmosferos ore matavimuose

Spalio 4	d. 16:00 – 17:30 Stendinė sesija S2
-	A. Žalga, <b>P. Normantas</b> , M. Smolianskis, A. Naruševičiūtė, L. Jočionis, E. Zacharovas, J. Kausteklis, V. Aleksa
S2-01	Struktūrinių pokyčių lantano molibdato vandeniniuose mišiniuose tyrimas naudojant Ramano spektroskopijos metodą
00.00	G. Banevičius, A. Iljinas
<b>S2-02</b>	Priešįtampio įtaka bismuto cirkonato plonų sluoksnių savybėms
00.00	A. Baradokė, I. Masilionis, J. Juodkazytė, R. Pauliukaitė, R. Valiokas
<b>S2-03</b>	Nanostruktūrizuotos platinos elektrodai - vandenilio peroksido detekcijai
	D. Banevičius, P. Imbrasas, T. Bučiūnas, P. Baronas, T. Matulaitis, N. A. Kukhta, J. V. Gražulevičius, K. Kazlauskas,
<b>S2-04</b>	S. Juršėnas
	Tuning of TADF properties of triphenyltriazine-carbazole derivatives
\$2-05	B. Beklešovas, V. Stankus
32-0J	Multiferoiko švino ferito sintezė reaktyviojo magnetroninio nusodinimo metodu ir tyrimas
\$2.06	J. Belovickis, J. Macutkevic, <b>V. Samulionis</b> , Š. Svirskas, J. Banys, O. Shenderova
32-00	Ultrasonic wave propagation in PDMS with ZnO nanoparticles
\$2-07	V. Grivickas, V. Bikbajevas, O. Korolik, A. Mazanik
32-07	Modification of interlayer stresses in TlInS <sub>2</sub> crystals by erbium doping
\$2-08	S. Vyčaitė, G. Šlepetytė, <b>K. Bočkutė</b> , G. Laukaitis
02 00	Skandžiu legiruotų plonasluoksnių cirkonio oksido dangų formavimas ir tyrimas
0.0	T. Bučiūnas, T. Serevičius, S. Juršėnas
S2-09	Nuo kambario temperaturos fosforescencijos iki šiluma aktyvuojamos uždelstosios fluorescencijos pirimidinų -
	karbazolų dariniuose
<b>S2-10</b>	<b>M. Cernauskas</b> , L. Marcinauskas, P. Onufrijevs, V. Sablinskas
	Amorfinių nanokompozitinių anglies aangų formavimas naudojant svino pasluoksnį
S2-11	<b>C. Zimmerer</b> , G. Niaura, I. Matulaitiene, V. Sablinskas, G. Steiner
	E Deieskeitė D Cudeitie S Temulavičius
<b>S2-12</b>	Grafeno sluoksnių sintezė ir sauvhių turimas
	A Čerškus A Sužiedėlis A Lučun M Anbinderis Č Paškevič
<b>S2-13</b>	Mikrobangu detektoriams skirto epitaksinio puslaidininkinio darinio su dvimačiu elektronu duju sluoksniu
	fotoliuminescencijos ypatumai
00.44	L. Dagys, V. Balevičius
52-14	Kryžminės poliarizacijos kinetika glicino milteliuose
SO 15	<b>S. Daugėla</b> , A. Kežionis, T. Šalkus, B. Lis, M. Dudek
32-15	Ca0.05Ba0.95Ce0.9Y0.1O3 ir BaCe0.9Y0.1O3 keramikų impedanso spektroskopijos tyrimai
<b>\$2-16</b>	P. Dolmantas, R. Ramanauskas, V. Marudinas, R. Kaliasas, A. Iljinas
02 10	Indžio-alavo oksido plonų dangų nusodinimas plazma aktyvuoto reaktyvaus terminio garinimo metodu
<b>\$2-17</b>	V. Dovydaitis, M. Cernauskas, L. Marcinauskas, P. Onufrijevs, A. Medvids
	Formavimo temperaturos įtaka amorfinių anglies dangų strukturai
<b>S2-18</b>	<b>J. Getautis</b> , D. Valtukaltyte, E. Kamarauskas, A. Magomedov, V. Getautis, V. Jankauskas
	<b>D</b> Crigalaitia I Banya A Salanas C E Ciamaga I Mitagariy S Kamba
S2-19	<b>R</b> . Of Igalallis, J. Dallys, A. Sakallas, C. E. Ciollaga, L. Mitoseriu, S. Kalliba Broadhand dielectric spectroscopy of cobalt ferrite and lead zirconium titanate composites
	A Ilinas D Virbukas P Bachanovas V Stankus
<b>\$2-20</b>	Bismuto-švino oksido sluoksniu nusodinimas plazma aktyvuoto garinimo metodu
	M. Ivanov, S. Balčiūnas, J. Banvs, S. Wada
S2-21	In search for artificial MPBs: dielectric spectroscopy of BaTiO <sub>3</sub> -KNbO <sub>3</sub> composites
00.00	D. Jablonskas, M. Ivanov, J. Banys, G. A. Giffin, S. Passerini
52-22	Static dielectric permittivity of Pyr14TFSI and Pyr12O1TFSI ionic liquids
<b>60.02</b>	A. J. Janavičius, R. Rinkūnas, R. Purlys
32-23	Superkristalizacija tirpale apspinduliuotame rentgeno spinduliais
\$2-24	V. Jašinskas, V. Bertašius, A. Eckstein, I. Namal, T. Hertel, V. Gulbinas
02 24	Carrier photogeneration, drift and recombination in a semiconducting carbon nanotube network
<b>\$2-25</b>	J. Jovaišaitė, T. Serevičius, T. Bučiūnas, J. Dodonova, J. Bucevičius, S. Tumkevičius, S. Juršėnas
	Molekulinis pirimidino metalų jonų jutimas, asistuojamas šiluma aktyvuojama uždelstąja fluorescencija
00.05	A. Jurkevičiūtė, L. Simatonis, A. Vasiliauskas, T. Tamulevičius, J. Fiutowski, HG. Rubahn
\$2-26	Ablation of amorphous diamond-like carbon nanocomposite films with embedded silver nanoparticles by femtosecond
	iaser interjerence field
<b>S2-27</b>	<b>N. Kaindayev</b> , M. Sriudas, Z. Kutkuniene, K. Bockute, G. Laukaitis
	i ionasiaoksnių čerio oksiao aangų jormavimas ir tyrimas kamano spekirometrija

<b>S</b> 2-28	<b>M. Kamarauskas</b> , M. Treideris, A. Mironas, V. Agafonov, A. Šetkus Periodinių struktūrų formavimas silicio fotovoltiniams elementams metalu inicijuotu ėsdinimu
<b>\$2-29</b>	<b>S. Kazlauskas</b> , E. Kazakevičius, A. Kežionis Skandžio ir cerio oksidais stabilizuoto cirkonio oksido keramikų elektrinės savybės
<b>S2-30</b>	<b>R. Keruckienė</b> , K. Ivaniuk, D. Volyniuk, J. V. Gražulevičius Indole and benzo[b]carbazole derivatives as blue emitters for non-doped light emitting diodes
<b>S</b> 2-31	<b>O. Kiprijanovič</b> , S. Ašmontas Kumuliacinis magnetinio srauto prasiskverbimas i II rūšies superlaidininko plonaji sluoksni
<b>S</b> 2-32	<b>G. Kreiza</b> , P. Baronas, E. Radiunas, P. Adomenas, C. Adachi, K. Kazlauskas, S. Juršenas Low threshold amplified spontaneous emission in organic crystals based on fluorene derivatives
<b>\$2-33</b>	<b>M. Lukauskas</b> , B. Abakevičienė Fluorinto etileno propileno polimero mechaninių savybių tyrimas
<b>S2-34</b>	<b>J. Macutkevic</b> , J. Banys, A. Molak The phase diagram of $(Bi_xNa_{1-x})(Mn_yNb_{1-y})O_3$ ceramics
<b>\$2-35</b>	J. Malakauskaitė, G. Kreiza, K. Kazlauskas, S. Juršėnas Nubraukimo ašmenimis metodo pritaikymas formuojant fosforescencinį organinį šviestuką
S2-36	K. Maleckaitė, D. Gudeika, J. V. Gražulevičius, A. Miasojedovas, S. Raišys, K. Kazlauskas, S. Juršėnas Naftalimido junginių fotofizikinių savybių tyrimas tirpaluose ir plonuose sluoksniuose
<b>\$2-37</b>	<b>V. Marčiulionytė</b> , A. Vaitkevičius, E. Trusova, M. Korjik, G. Tamulaitis Luminescence in two-component silicate glass doped with Ce. Dv. Eu. and Tb ions for high-power white light sources
S2-38	<b>J. S. Mathew</b> , L. Marcinauskas, M. Milieška, B. Thanigachalam, A. Kupec, R. Kėželis, R. Česnavičius The tribological properties of Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> and Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -graphite coatings deposited by plasma spraying
<b>\$2-39</b>	<b>A. Matulis</b> , D. Seliuta, G. Šlekas, Ž. Kancleris Radiotechninis modelis bangos sklaidos įpjautų žiedelių gardele
S2-40	<b>S. Pralgauskaitė</b> , M. Tretjak, J. Macutkevic, J. Matukas, J. Banys, P. Kuzhir, E. Ivanov, R. Kotsilkova Low frequency noise characterisation of multi-walled carbon nanonubes composites
<b>S2-41</b>	<b>E. Radiunas</b> , K. Kazlauskas, S. Raišys, J. V. Gražulevičius, S. Juršėnas Fenantroimidazolo junginių fluorescencijos spektroskopija ir taikymai organiniuose šviestukuose
<b>S2-42</b>	<b>S. Raišys</b> , K. Kazlauskas, Y. Simon, S. Juršėnas Tripletinių eksitonų anihiliacijos sąlygotos šviesos konversijos našumo didinimas panaudojant fluorescuojančias singuletinių eksitonų gaudykles
<b>S2-43</b>	<b>V. Sabonis</b> , A. Naujokaitis, J. Nekrasovas, K. Arlauskas Femtosekundinių UV impulsų įtaka ZnO sluoksnio drėkinimo savybėms
<b>S2-44</b>	A. Sakavičius, A. Lukša, G. Astromskas, V. Bukauskas, V. Nargelienė, A. Šetkus Metalas-grafenas struktūrų kontaktų analizė
S2-45	<b>T. Šalkus</b> , A. Kežionis, J. Banys, V. Y. Izai, A. I. Pogodin, O. P. Kokhan, V. I. Sidey, M. Y. Sabov, I. P. Studenyak Structural and electrical properties of argyrodite-type Cu <sub>7</sub> PS <sub>6</sub> crystal
<b>S2-46</b>	<b>M. Senulis</b> , S. Grebinskij, S. Mickevičius, A. Maneikis SrRuO3 paviršinio sluoksnio struktūros nustatymas kampui jautrios fotoelektronų spektroskopijos metodu
<b>S2-4</b> 7	<b>T. Serevičius</b> , R. Komskis, P. Adomėnas, O. Adomėnienė, A. Monkman, S. Juršėnas Triplet – triplet annihilation in 9,10 – diphenylanthracene derivatives: the role of intersystem crossing and exciton diffusion
<b>S2-48</b>	<b>Š. Svirskas</b> , J. Banys, S. Kojima Relaxor to ferroelectric phase transition in 0.83PbMg <sub>1/3</sub> Nb <sub>2/3</sub> O <sub>3</sub> -0.17PbTiO <sub>3</sub> single crystal
S2-49	<b>A. Tamulevičienė</b> , R. Gudaitis, E. Rajackaitė, Š. Meškinis, S. Tamulevičius Grafeno monosluoksniai lankstiems elektrochrominiams prietaisams
<b>S2-50</b>	<b>A. Vaitkevičius</b> , V. Marčiulionytė, E. Trusova, Y. Tratsiak, M. Korjik, G. Tamulaitis Investigation of novel glasses and garnets doped with rare earth ions
S2-51	<b>J. Vaitkus</b> , A. Mekys, V. Vertelis 10 <sup>16</sup> -10 <sup>17</sup> cm <sup>-2</sup> neutronų įtėkiu paveikto Si fotolaidumas ir magnetovaržinis judris
<b>\$</b> 2-52	<b>D. Valiulis</b> , A. Gudelis, V. Stakėnas Radionuklidų ir stabilių elementų nusėdimo iš atmosferos eigos vertinimas naudojant Pinus sylvestris kaip bioindikatorių
<b>\$</b> 2-53	<b>V. Venckutė</b> , A. Dindune, D. Valdniece, A. Krumina, M. Lelis, V. Jasulaitienė, A. Maneikis, S. Daugėla, T. Šalkus, A. Kežionis, A. F. Orliukas <i>Na</i> <sub>2</sub> <i>Zn</i> <sub>0.5</sub> <i>Mn</i> <sub>0.5</sub> <i>P</i> <sub>2</sub> <i>O</i> <sub>7</sub> <i>keramikos gamyba, struktūra, paviršiaus ir impedanso spektroskopijos tyrimai</i>
<b>S</b> 2-54	<b>B. Vengalis</b> , A. Maneikis, G. Grigaliūnaitė-Vonsevičienė <i>Tunelinių Co-MgO-Fe</i> <sub>3</sub> O <sub>4</sub> <i>jungčių gaminimas ir jų magnetovaržinės savybės</i>
S2-55	<b>I. Zamaraitė</b> , A. Džiaugys, Y. Vysochanskii, J. Banys Influence of selenium and lead impurities on dielectric and ferroelectric properties of Sn <sub>2</sub> P <sub>2</sub> S <sub>6</sub> crystals

<b>\$2-56</b>	<b>S. Balčiūnas</b> , M. Ivanov, S. Wada, J. Banys Dielectric properties of BaTiO3 based composites
<b>\$2-57</b>	<b>S. Balčiūnas</b> , A. Peterson, M. Ivanov, J. Adamson, J. Banys Dielectric properties of one dimensional ice in HHTP-4H <sub>2</sub> O crystallites
<b>\$2-58</b>	<b>I. Kranauskaitė</b> , J. Macutkevic, D. Bychanok, D. Meisak, J. Banys Broadband electrical properties of carbon nanotubes epoxy composites
<b>S</b> 2-59	<b>I. Kranauskaitė</b> , J. Macutkevic, A. Borisova, A. Martone, M. Zarrelli, A. Selskis, A. Aniskevich, J. Banys <i>Electrical properties of composites filled with carbon nanotubes and graphene nanoplatelets</i>
<b>S2-60</b>	<b>E. Palaimienė</b> , J. Macutkevic, M. Kinka, J. Banys, M. Josse, M. Maglione Investigation of dielectric relaxation processes in Ba6-2xNd2xFe1+xNb9-xO30 ceramics
<b>S2-61</b>	<b>E. Palaimienė</b> , J. Macutkevic, A. Molak, J. Banys Conductivity investigations of Bi(Mn <sub>1/3</sub> Nb <sub>2/3</sub> )O <sub>3</sub> ceramics

Spano 5	u. 11.50 – 15.00 Stendine sesija 55
<b>\$3-01</b>	<b>F. Kuliešius</b> , A. Lengvinas, A. Pavlova State space reconstruction issues and times series prediction
<b>S3-0</b> 2	<b>V. Minialga</b> , R. Samavičius Pirolitinio grafito bandinio geometrinių parametrų itaka diamagnetinės levitacijos aukščiui
<b>\$3-03</b>	<b>A. Stankevičiūtė</b> , F. Kalyk, G. Budrytė, B. Abakevičienė Synthesis and properties of samaria-doped ceria nanopowders prepared by glycine nitrate combustion method
<b>S3-04</b>	J. Aglinskaitė, A. Zabiliūtė-Karaliūnė, P. Vitta Dažninės skyros fosforu termometrija aukšto sužadinimo tankio salvgomis
<b>\$3-05</b>	<b>G. Braždžiūnas</b> , S. Orlov Laikinio čirpo ir grupinio greičio itaka elektrono greitinimui radialinės poliarizacijos Beselio-X impulsiniame pluošte
<b>S3-06</b>	<b>V. Čižas</b> , P. Vitta Kietakūniu gatviu šviestuvu optikos tvrimas ir optimizavimas
<b>S3-07</b>	<b>D. Kudarauskas</b> , G. Tamošauskas, M. Vengris, A. Dubietis Šviesos gijų indukuota fotoliųminescencija nelegiruotame bei Nd ir Yb ionais legiruotuose YAG kristaluose
62.09	N. Garejev, G. Tamošauskas, A. Dubietis
33-08	greičių dispersijos srityse
<b>\$3-09</b>	P. Gotovski, S. Orlov Kosminių nuolaužų orbitos koregavimas pasitelkus optinę adatą
<b>\$3-10</b>	<b>G. Grigalevičiūtė</b> , D. Baltriukienė, L. Jonušauskas, M. Malinauskas Lanksčių mikroporėtų 3D karkasų formavimas stereolitografijos būdu
<b>\$3-11</b>	L. Grinevičiūtė, R. Buzelis, R. Drazdys, A. Melninkaitis, A. Selskis, T. Tolenis Nano-skulptūrinių anizotropinių dangų pagrindu suformuoti optiniai elementai, skirti didelės galios lazerinės spinduliuotės poliarizacijos valdymui
<b>\$3-12</b>	L. Jonušauskas, D. Gailevičius, S. Rekštytė, <b>M. Malinauskas</b>
\$3-13	<b>T. Kontrimas</b> , S. Orlov
55 15	Parabolinės simetrijos skerspjūvio optinių pluoštų linijinio židinio inžinerija P Mackonis A Petrulėnas A Rodin E Zopelis
<b>S3-14</b>	Dviejų pakopų čirpuotų skaidulinio užkrato lazerio impulsų Yb:YAG stiprintuvas skirtas OPCPA kaupinimui
<b>\$3-15</b>	<b>A. Marcinkevičiūtė</b> , N. Garejev, R. Suminas, G. Tamošauskas, A. Dubietis Keleto optinių ciklų trukmės impulsų generacija ir spūda 3 - 4 μm spektrinėje srityje
<b>S3-16</b>	<b>B. Momgaudis</b> , A. Melninkaitis. Nespinduliniu nuostoliu tyrimas holografiškai vaizdinant dinamini šilumos leši
<b>\$3-17</b>	<b>R. Rimeika</b> , D. Čiplys Akustooptinė saveika $YX - LiTaO_3$ kristaluose
<b>S</b> 3-18	<b>R. Šuminas</b> , G. Tamošauskas, G. Valiulis, V. Jukna, A. Couairon, A. Dubietis
	Multi-octave supercontinuum and harmonic generation induced by femtosecond filamentation in polycrystalline ZnSe G. Tamošauskas, G. Beresnevičius, J. Lukošiūnas, A. Marcinkevičiūtė, A. Dubietis
<b>\$3-19</b>	Vienalaikis femtosekundinių impulsų charakterizavimas dažnių skyros laiko sklendės (FROG) metodu ploname BBO kristale 1.3-4 μm spektro srityje
<b>\$3-20</b>	<b>V. Tamulienė</b> , R. Butkus, V. Smilgevičius, A. Stabinis Erdvėje ir laike koherentinės šviesos parametrinė generacija
	T. Tičkūnas, M. Perrenoud, S. Butkus, S. Rekštytė, M. Malinauskas, D. Paipulas, R. Gadonas, Y. Bellouard, V.
<b>\$3-21</b>	Sirutkaitis Combination of additive and subtractive laser microprocessing in glass/polymer microsystems for chemical sensing applications

<b>\$3-22</b>	J. Vengelis, M. Kuliešaitė, V. Jarutis, V. Sirutkaitis
	V Vosvlius S Orlov
<b>\$3-23</b>	Optinio židinio liniju kontrolė naudojant vektorinius Matie pluoštus
	<b>A. Zabiliūtė-Karaliūnė</b> , H. Dapkus, P. Vitta, A. Petrulis, A. Žukauskas
<b>S3-24</b>	Pirmenybinėmis spalvinėmis savybėmis pasižyminčio konversijos fosfore šviestuko prototipavimas ir
	charakterizavimas
\$3-25	A. Gajauskaitė, S. Orlov
55 25	Vektoriniai Beselio pluoštai, pasižymintys sferinės simetrijos poliarizacijos savybėmis
<b>\$3-26</b>	A. Gajauskaitė, S. Orlov
	Vektorinių sufokusuotų židinio modų analize
\$2.27	<b>M. Ivanov</b> , P. Stanislovaltis, A. Matijosius, I. Gertus, V. Smilgevicius Topological charge conservation of optical vortices with half integer topological charge in the process of second
35-27	harmonic generation
0	<b>J. Skruibis</b> , O. Balachninaitė, S. Butkus, V. Sirutkaitis
\$3-28	Daugeliu ir pavieniais femtosekundiniais lazerio impulsais indukuotos plazmos spektroskopijos taikymas skaidrių
	terpių mikroapdirbimo proceso monitoringui
\$3-29	A. Juršėnas, S. Orlov
00 27	Vektoriniai pluoštai absorbuojančioje terpėje lazerinio mikroapbirbimo taikymams
<b>S3-30</b>	A. Juršenas, S. Orlov
	I Macutkevic A Plyushch I Banys A Paddubckava P Kuzhir O Shanderova
<b>\$3-31</b>	Redistributions effects in composites with nanoinclusions
0.0	<b>D. Jablonskas</b> , M. Ivanov, R. Grigalaitis, I. Banvs
<b>S3-32</b>	Application of non-linear susceptibility measurement method to ferroelectric materials
\$3_33	D. Petrulionis, A. Kežionis
33-33	Pažangus keturių elektrodų pilnutinės varžos spektrometras kietakūnių joninių laidininkų tyrimui
<b>\$3-34</b>	D. Bričkus, S. Orlov
	Chiralinio atsako nanodalelių klasteriuose modeliavimas T matricų metodu
<b>\$3-35</b>	J. Dudutis, P. Gecys, R. Stonys, G. Kaciukaitis Silikatinio stiklo piovimas asimetrinių Beselio-Gauso pluoštų
	<b>S. Rekštytė</b> , I. Mačiulaitis, R. Mačiulaitis, M. Malinauskas
<b>S3-36</b>	Didelio našumo trimačių mikrostruktūrizuotų karkasų lazerinis formavimas kremzlės regeneracijos tyrimams in vitro
	ir in vivo
<b>\$3-37</b>	E. Skliutas, S. Kašėtaitė, L. Jonušauskas, J. Ostrauskaitė, M. Malinauskas
	Link 3D gamtines kilmes dervų fotostrukturinimo dinamines projekcines litografijos budu
<b>S3-38</b>	<b>5. v arapnickas</b> , D. Baziulyle-Paulaviciene, S. Sakirzanovas, M. Malinauskas NaVhE: Er <sup>3+</sup> nanokristalų panaudojimas lokalių temperatūros pokyčių vaizdinimui trimatės lazerinės litografijos metu
_	<b>G. Bučyte</b> , S. Rajšys, K. Kazlauskas, P. Adoménas, S. Juršénas
<b>S3-39</b>	Nekoherentinė šviesos konversija modifikuotuose antraceno junginiuose
\$3-40	R. Gegevičius, M. Franckevičius, V. Pakštas, R. Augulis, V. Gulbinas
33-40	Greitas, jautrus, plokščias perovskitinis fotodetektorius suformuotas ant periodinės Pt elektrodų matrices
60.44	<b>G. Kuksėnaitė</b> , K. Kazlauskas, G. Kreiza, A. Miasojedovas, E. Radiunas, P. Baronas, A. Bieliauskas, V. Getautis, A.
55-41	Sackus, S. Jursenas Nitrilo junginių struktūros itaka nanoagregatų formavimųi ir jų optinėms savybėms
_	<b>A. Novičkovas</b> , A. Viršilė, A. Brazaitytė, V. Vaštakaitė, I. Jankauskienė, I. Miliauskienė
<b>S3-42</b>	Itin didelį fotosintetinį fotonų srautą generuojantis kietakūnis šviesos šaltinis nitratų redukcijos valdymui augaluose
\$2.42	J. Belovickis, <b>V. Samulionis</b> , J. Banys, M. Silibin
35-45	<i>Effect of LiNbO</i> <sup>3</sup> nanofillers on dielectric and ferroeletric properties of P(VDF-TRFE) copolymer based composites
00.44	A. Belianinov, A. Džiaugys, Q. He, P. Maksymovych, E. A. Eliseev, A. Borisevich, A. Morozovska, J. Banys, Y.
<b>53-4</b> 4	Vysochanskii, S. Kalinin Culn Pass, room temperatura layered farroelectric
	M Juodėnas T. Tamulevičius S. Korsakas I. Henzie S. Tamulevičius
<b>\$3-45</b>	Formation and investigation of regular Ag nanocube arrays
	N. Karalius, V. Lapeika, V. Bukauskas, J. Tamulienė, W. H. Roos, L. Plėšnienė, V. Kovalevskij, A. Fahmi, M.
<b>\$3-46</b>	Franckevičius, L. Rastenienė, A. Kulbickas, R. Vaišnoras
	Insights into nitrogen doped diamond micro-nano dot
<b>S3-47</b>	<b>D. Meisak</b> , D. Bychanok, J. Macutkevic
	R Gudaitis A Vasiliauskas Š Meškinis
<b>S3-48</b>	Tiesioginė grafeno sintezė ant dielektrinių ir puslaidininkinių pagrindų

<b>S3-49</b>	<b>A. Plyushch</b> , J. Macutkevic, V. Samulionis, J. Banys, D. Bychanok, P. Kuzhir, V. Fierro, A. Celzard <i>Dielectric properties of composites with triglicinsulphate and graphene</i>
<b>\$3-50</b>	<b>J. Tamulienė</b> , J. Šarlauskas, A. Šileikis, R. Vaišnoras, N. Karalius Nanodeimantų su papildoma –N=N-Ph-COOH grupe įmagnetėjimo tyrimai ab initio metodais
<b>\$</b> 3-51	<b>F. Vaitiekūnas</b> Pikosekundinių procesų impulsinės elektronikos elementuose skaičiavimo metodai
<b>\$3-52</b>	<b>V. Samulionis</b> , J. Macutkevic, J. Banys, J. Belovickis, O. Shenderova Ultrasonic studies of onion-like carbons/polydimethysiloxane composites
<b>S</b> 3-53	J. Belovickis, <b>V. Samulionis</b> , J. Banys, M. Silibin, A. Solnyshkin, A. Sysa Effect of thermal cycling on ferroelectric phase transition of PVDF-TrFE based composites as investigated by ultrasonic spectroscopy
<b>\$3-54</b>	<b>A. Dargys</b> Medžiaginiai ryšiai klasikinėje ir reliatyvistinėje optikoje GA požiūriu
<b>\$</b> 3-55	<b>J. Nekrasovas</b> , V. Gaidelis, V. Jankauskas, E. Kamarauskas, M. Viliūnas Puslaidininkių jonizacijos potencialo matavimas Geigerio-Miulerio skaitikliu
<b>S</b> 3-56	<b>L. Gaigalaitė</b> , A. Gudelis TDCR įrenginio stabilumo tyrimas
<b>\$3-57</b>	<b>D. Jokubauskis</b> , L. Minkevičius, D. Seliuta, I. Kašalynas, G. Valušis Paslėptų mažos sugerties objektų aptikimas naudojant terahercinę spinduliuotę
<b>\$3-58</b>	Č. Pavasaris Puslaidininkinio tetrodo taikymas sparčiosiose skaitmeninėse schemose
<b>\$3-59</b>	<b>J. Vyšniauskas</b> , A. Lisauskas, J. Matukas Terahercų detekcijos AlGaN/GaN tranzistoriuose hidrodinaminis modeliavimas
<b>S3-60</b>	L. Dundulis, <b>J. Vyšniauskas</b> , E. Gaubas Silicio griūtinių diodų, naudojamų dalelių detektoriuose, kompiuterinis modeliavimas

Spalio 5	d. 16:00 – 17:30 Stendinė sesija S4
<b>S4-01</b>	<b>V. Abdulajev</b> , A. Gudelis Gama spinduolių sudėties reaktoriaus grafite tyrimas
<b>S4-0</b> 2	<b>D. Adamchuk</b> , Š. Svirskas, J. Banys, V. Buscaglia Dielectric properties of barium titanate doped with Ce <sup>3+</sup>
<b>S4-03</b>	A. Sužiedėlis, S. Ašmontas, J. Gradauskas, A. Šilėnas, A. Lučun, A. Čerškus, Č. Paškevič, <b>M. Anbinderis</b> , A. Steikūnienė, G. Steikūnas Heterosandūrinių mikrobangų diodų detekcinių savybių modifikavimas šviesa
<b>S4-04</b>	<b>S. Bagdonas</b> , K. Aidas, A. Maršalka Hematoporfirino fotovirsmų spektroskopiniai tyrimai ir molekulinis modeliavimas
<b>S4-05</b>	<b>A. Bagušinskaitė-Šležienė</b> , T. Aleinikovas, A. Jukna Saulės elementų voltamperinių charakteristikų tyrimas
<b>S4-06</b>	<b>L. Baliulytė</b> , J. Tamulienė Vandens įtakos L-treonino fragmentacijai tyrimas taikant ab initio metodus
<b>S4-07</b>	<b>R. Bandzevičiūtė</b> , V. Urbonienė, F. Jankevičius, V. Šablinskas Inkstų vėžinių audinių kokybinė infraraudonosios sugerties spektrinė analizė
S4-08	<b>I. Beleckaitė</b> , R. Adomavičius Terahercinius impulsus spinduliuojančio dipolio orientacijos puslaidininkyje nustatymas laikinės terahercų spektroskopijos metodais
<b>S4-09</b>	<b>E. Bilotas</b> , P. Ragulis, Ž. Kancleris Energiją taupančių langų paketų ekranavimo efektyvumo valdymas Wi-Fi dažnių ruože
S4-10	I. Čiplys, V. Gėgžna, D. Varanius, G. Terbetas, L. Neverauskienė, A. Vaitkuvienė, J. Vaitkus Žmogaus tarpslankstelinių diskų savitosios fluorescencijos spektrų analizė
<b>S4-11</b>	<b>L. Davulienė</b> , J. Šakalys, V. Dudoitis Juodosios anglies koncentracijos ore kaita Preilos foninėje stotyje 2008–2015 m.
<b>S4-1</b> 2	<b>L. Deveikis</b> , T. Čeponis, E. Gaubas, D. Meškauskaitė, J. Pavlov, V. Rumbauskas Iškaitinimų nulemtos radiacinių defektų transformacijos elektronais, protonais ir pionais apšvitintuose Si dariniuose
<b>S4-13</b>	<b>M. Dmukauskas</b> , A. Kadys, T. Malinauskas, T. Grinys, K. Badokas, S. Stanionytė, M. Frentrup, R. Dargis, A. Clark Non-polar and semipolar GaN growth on Si with Er <sub>2</sub> O <sub>3</sub> interlayer
<b>S4-14</b>	<b>V. Aleksa</b> , K. Glemža Inovacijos fizikos mokytojų rengime Vilniaus universitete
<b>S4-15</b>	<b>J. Glemža</b> , J. Matukas, S. Pralgauskaitė, V. Palenskis GaSb pagrindu pagamintų lazerinių diodų triukšmų ir elektrinių charakteristikų tyrimas atliekant sendinimo eksperimentą

<b>S4-16</b>	I. Gorina, L. Gaigalaitė, R. Gvozdaitė, <b>A. Gudelis</b> Radionuklidų sklaidos iš paviršinio atliekyno tyrimas
<b>S4-17</b>	<b>A. Gudelis</b> , I. Gorina, G. Kandrotas Pažemio atmosferos užterštumo radionuklidais Lietuvoje tvrimas
<b>S4-18</b>	M. Tutkus, G. Karzaitė, <b>Š. Ivanovaitė</b> , T. Marčiulionis, D. Rutkauskas, M. Zaremba Pavienių molekulių fluorescencijos mikroskopija DNR saveikos su Bfil restriktazėmis tyrimuose
S4-19	<b>D. Jasaitis</b> , E. Šatrauskas, G. N. Lukyanov, I. N. Serov, A. Jukna Elektromagnetinės spinduliuotės valdymas pasyviuojų rezonatoriumi-keitiklių
<b>S4-20</b>	V. Karenauskaitė, G. Dikčius, R. Lazauskaitė HOPE projekto rezultatai: fizikos studijų tobulinimas Europoje
<b>S</b> 4-21	D. Kirvelis
<b>S4-22</b>	A. Kiveris, V. Lapeika Fononcis paskatinto krūvininkų tuneliguimo turimas 7nS plėvelėse
<b>S</b> 4-23	<b>M. Konstantinova</b> , B. Lukšienė, N. Tarasiuk, E. Maceika
<b>S4-24</b>	L. Krikščikas, V. Dudoitis, G. Mordas, S. Byčenkienė, V. Ulevičius
<b>S</b> 4-25	E. Lagzdina, D. Lingis, A. Puzas, R. Plukienė, R. Gvozdaitė, A. Plukis
<b>S4-26</b>	RBMK reaktoriaus grafito priemaisų nehomogeniskumo tyrimas ICP-MS metodu R. Lazauskaitė, A. Bridžius, J. Sūdžius
	Lietuvos astronomijos olimpiada – talentų beieškant D Lingis F Lagzdina M Gaspariūnas R Plukienė T Mirinavičius A Plukis
<b>S</b> 4-27	Plutonio-berilio neutronų šaltinio apšvitos parametrų vertinimas neutronų aktyvacinės analizės ir skaitinio modeliavimo MCNP kodu metodais
<b>S4-28</b>	<b>T. Malinauskas</b> , T. Grinys, K. Badokas, R. Dargis, A. Clark Pusiaupolinio (10-13) GaN užauginto ant Si padėklų su Er2O3 tarpsluoksnių azimutinės orientacijos tyrimas
S4-29	<b>K. Mažeika</b> , V. Melvydas, R. Garjonytė Mielių pulcherimino Meshauerio tyrimai
\$4.20	<b>R. Mazėtytė</b> , U. Bubnienė, A. Ramanavičius, R. Karpicz
34-30	pH daroma įtaka gliukozės oksidazės spektroskopinėms savybėms
<b>\$4-31</b>	Radiacinių defektų įtakos GaN spinduliuočių jutiklių charakteristikų kaitai tyrimai
<b>\$4-32</b>	<b>K. Nomeika</b> , M. Budreckaitė, S. Nargelas, A. Kadys, R. Aleksiejūnas Impulsiniu MOCVD būdu užaugintų InGaN darinių tyrimas laikinės spektroskopijos metodais
<b>S</b> 4-33	<b>A. Pabedinskas</b> , Ž. Ežerinskis, J. Šapolaitė, L. Butkus, V. Juzikienė, R. Druteikienė, V. Remeikis Radioanglies sklaidos biosferoje tyrimas branduolinės elektrinės aplinkoje
<b>S4-34</b>	<b>J. Pauraitė</b> , G. Mordas, V. Ulevičius Aerozolio masių spektro atsako i medžių abiotini stresą Lietuvoje tyrimas
<b>S</b> 4-35	J. Pavlov, T. Čeponis, E. Gaubas, D. Paipulas, I. Reklaitis MOCVD GaN struktūru BELIV charakteristikos
<b>S4-36</b>	<b>R. Plukienė</b> , L. Juodis, A. Plukis, O. Šalkauskas Modelinis branduolinio kuro ciklo regioninių scenarijų vertinimas (BRILLIANT projektas)
<b>S4-37</b>	<b>Ž. Podlipskas</b> , R. Aleksiejūnas, J. Mickevičius, M. Riauka Krūvininkų difuziškumo, gyvavimo trukmės ir lokalizacijos saryšis AlGaN junginiuose
<b>S4-38</b>	<b>E. Pozingytė</b> , B. Čechavičius, V. Karpus Flipsoidinio slėnio elektronų spektras sferiniame kvantiniame taške
<b>S</b> 4-39	<b>N. Prokopciuk</b> , N. Tarasiuk, T. Petelsky On some elimatic consequences of the BP oil spill
\$4-40	<b>K. Pūkas</b> , T. Čeponis, E. Gaubas
01 10	Neutronais apšvitintų GaN sensorių elektrinio atsako charakteristikos I. Reklaitis, F. Nippert, R. Kudžma, T. Malinauskas, S. Karpov, J. Pietzonka, H. J. Lugauer, M. Strassburg, P. Vitta,
<b>S4-41</b>	R. Tomašiūnas, A. Hoffmann InGaN šviestuku rekombinacijos koeficientu nustatvmas iš mažo sužadinimo fotoliuminescencijos matavimu
<b>S4-4</b> 2	A. Rimkus, E. Pozingytė, R. Nedzinskas, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, G. Valušis, L. Li, E. H. Linfield
01 12	Optical investigation of epitaxial InGaAs quantum rods M. Tutkus, G. Sasnauskas, D. Rutkauskas
<b>S4-43</b>	NgoMIV endonukleazės sąveikos su DNR dinamikos tyrimas panaudojant pavienių molekulių FRET
<b>S4-4</b> 4	<b>V. Samulionis</b> , J. Macutkevic, J. Belovickis, J. Banys, A. Sánches-Ferrer, O. Shenderova Ultrasonic studies of polymer composites with MoS <sub>2</sub> type and OLC nanoinclusions

<b>S4-45</b>	<b>P. Ščajev</b> , A. Miasojedovas, S. Miasojedovas, S. Juršėnas Krūvinikų rekombinacija ir difuzija MAPbBr₃ perovskitiniame kristale plačiame sužadinimų intervale
<b>S4-46</b>	<b>M. Skapas</b> , R. Butkutė GaAsBi/AlAs kvantinių duobių tyrimai peršviečiamuoju elektroniniu mikroskopu
<b>S4-47</b>	<b>M. Sriubas</b> , N. Kainbayev, G. Laukaitis Mikrostruktūros įtaka plonų SDC sluoksnių elektrinėms ir optinėms savybėms
<b>S4-48</b>	S. Stanionytė, V. Pačebutas, B. Čechavičius, V. Bukauskas, A. Geižutis, A. Krotkus GaInAsBi sluoksnių, užaugintų ant InP padėklų, tyrimai ir taikymai
S4-49	J. Gradauskas, <b>J. Stupakova</b> , A. Sužiedėlis, E. Jočytė, A. Jukna Ilgašvyčio fosforo Zn3Ga2Ge2O10:0.5%Cr <sup>3+</sup> emisijos spartos priklausomybė nuo temperatūros
<b>S4-50</b>	<b>F. Vaitiekūnas</b> Universitetai ir jų vertinimo kriterijai
<b>S4-51</b>	<b>M. Velička</b> , M. Pučetaitė, J. Čeponkus, S. Adomavičiūtė, V. Urbonienė, F. Jankevičius, V. Šablinskas Vėžinių inksto sričių nustatymas paviršiaus sustiprintos Ramano sklaidos metodu
S4-52	M. Tutkus, D. Rutkauskas, J. Chmeliov, P. Ungerer, P. Akhar, <b>O. Venckus</b> , P. Lambrev, A. Ruban, F. Saccon, G. Trinkūnas, L. Valkūnas Augalų transmembraninių šviesą sugeriančių baltyminių kompleksų tyrimai dirbtinėje ir į natūralią panašioje aplinkoje pasitelkiant pavienių molekulių fluorescencijos mikroskopiją
<b>\$4-53</b>	<b>A. Vilkas</b> , D. Baziulytė-Paulavičienė, S. Šakirzanovas, V. Karabanovas, R. Rotomskis NaGdF4: Yb <sup>3+</sup> , Er <sup>3+</sup> nanodalelių sužadintų būsenų trukmės priklausomybės nuo branduolio dydžio ir apvalkalo storio tyrimai
<b>S</b> 4-54	S. Ašmontas, J. Gradauskas, A. Sužiedėlis, <b>O. Žalys</b> , A. Šilėnas, E. Širmulis, V. Švedas, V. Vaičikauskas, V. Vaičiūnas, V. Kostylyov <i>Photovoltage across Si p-n junction exposed to laser radiation</i>
<b>S</b> 4-55	R. Aleksiejūnas, <b>G. Žukauskas</b> , V. Jonkus, K. Svirskas, A. Cesiul Augmenijos įtakos radijo bangų sklidimui modeliavimas naudojant optinio spektro palydovinius duomenis

## Kviestiniai pranešimai Plenariniai pranešimai Žodinių sesijų pranešimai: 2A-1, 3B-1, 4A-1, 4A-2, 5A-1, 6A-1, 6B-1, 7B-1

#### Molekulinių sistemų netiesinės spektroskopijos modeliavimas

#### Simulation of nonlinear spectroscopy of molecular systems

Darius Abramavičius

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Cheminės Fizikos Institutas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius darius.abramavicius@ff.vu.lt

darius.aoramavicius@11.vu.i

Per paskutinius dešimt metų pasaulyje paplito koherentinė dvimatė elektroninių būsenų spektroskopija (2DES) [1]. Tai yra keturių bangų maišymo eksperimentas, kuriame signalą generuoja keturi labai trumpi koherentiniai lazerio impulsai. Kadangi juos skiria trys vėlinimo trukmės, varijuojant šias, galima registruoti trimatę intensyvumo priklausomybę nuo vėlinimo trukmių. Dviejų dimensijų atžvilgiu atlikus Furjė transformaciją, gaunami dvimačiai koherentiniai spektrai.

Pirmiausia ši metodika buvo sukurta radijo bangų diapazone ir pavadinta COSY branduolinio magnetinio rezonanso spektroskopija 1970-aisiais. Pritaikius analogiškas idėjas lazerinėms technologijoms, tik 2003-2007 m. pavyko realizuoti ir patikimai išmatuoti 2DES spektrus matomų bangų diapazone.

Matomų bangų diapazone tyrinėjamos unikalios puslaidininkinių arba molekulinių medžiagų savybės: daugiaelektroninės koreliacijos, kvantiniai bangų paketai, virpesiniai mušimai, sužadintų būsenų termalizacija, energijos pernaša, kas lemia pvz. organinių saulės elementų kvantinį efektyvumą.

Tokių eksperimentinių spektrų "skaitymui" didele dalimi padeda teorinis kvantinių relaksacinių reiškinių modeliavimas ir atitinkamų spektrų modeliavimas [2]. Spektrų skaičiavimui naudojama atsako funkcijų teorija. Jos pagrindas yra kvantinės fizikos trikdžių teorija, kur trikdis yra sąveikos su elektromagnetiniu lauku Hamiltoniano parametras. Pirmosios eilės atsako funkcija įskaito dvi sąveikas su lauku ir aprašo šviesos sugerties vyksmą, ir tuo pačiu šviesos sugerties spektrą. Antrosios eilės atsako funkcija, įskaitydama tris sąveikas su lazerio lauku, paprastai izotropinėse terpėse yra lygi nuliui. Tada žemiausios eilės netiesinė atsako funkcija yra trečiosios eilės. Ji aprašo visą eilę lazerinių spektroskopinių eksperimentų: žadinimo-zondavimo, fotonų aido, o taip pat ir 2DES.

Modeliuojant molekulinių sistemų netiesinius lazerinius laikinės skyros eksperimentus būtina įskaityti ir relaksacinius reiškinius. Tam naudojama kvantinė relaksacijos teorija [2]. Įskaitant atsako funkcijose relaksacinius reiškinius, 2D spektruose galima paaiškinti kvantinių būsenų superpozicijų mušimus, jų gesimo trumes, energijos pernašos kanalus ir pan.

Kaip papildomos galimybės, 2DES spektroskopijoje dažnai naudojama įvairios egzotinės lazerių impulsų manipuliavimo galimybės. Vienas iš tokių pavyzdžių pademonstruota 1 pav. [3], kur osciliatoriaus 2DES spektrai sumodeliuoti naudojant specialiai suformatuotus lazerio impulsus. Pasirodo, tai leidžia valdyti spektro smailių aukščius.



1 pav. Kvantinio anharmoninio osciliatoriaus 2DES spektras, gautas naudojant skirtingų lazerio impulsų formas [3]. Kairėje – lazerio impulso spektrogramos, dešimėje – osciliatoriaus 2DES spektrai.

Reikšminiai žodžiai: eksitonai, kinetika, netiesiniai spektrai.

- [1] D. Abramavicius, S. Mukamel, J. Chem. Phys. 120, 8373, (2004).
- [2] L. Valkunas, D. Abramavicius, T. Mancal, Molecular Excitation Dynamics and Relaxation, Wiley-VCH (2013).
- [3] D. Abramavicius, B. Palmieri, D. V. Voronine, F. Sanda, S. Mukamel, Chem. Rev. 109, 2350 (2009).

#### Krūvininkų pernaša ir rekombinacija netvarkios sandaros medžiagose

#### Charge carriers transport and recombination in disordered materials

<u>Gytis Juška</u>, Kęstutis Arlauskas, Kristijonas Genevičius Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius gytis.juska@ff.vu.lt

Šiame pranešime pateikiami krūvininkų pernašos ir rekombinacijos netvarkiose medžiagose tyrimo metodai [1].

Krūvininkų ekstrakcijos tiesiškai didėjančia įtampa metodas (CELIV – *Charge Extraction by Linerly Increasing Voltage*) įgalina matuoti krūvininkų pernašos charakteristikas santykinai laidžiose medžiagose, kuriose klasikinis lėkio trukmės metodas netinkamas [2]. Naudojant CELIV metodą buvo tirti perspektyvūs hidrogenizuoto mikrokristalinio ir nanokristalinio silicio bei  $\pi$ -konjuguotų polimerų ir jų tūrinių heterosandūrų sluoksniai. Šis metodas įgalina išmatuoti bandinio tūrinį laidumą, dielektrinę skvarbą, pusiausvyrųjų krūvininkų judrį bei tankį, nustatyti judrio priklausomybės nuo elektrinio lauko stiprio priežastį.

Foto-CELIV metodas naudojamas atskirai matuojant fotogeneruotų krūvininkų judrio ir jų tankio relaksacijas po fotosužadinimo [3]. Tai ypatingai svarbu tiriant krūvininkų elgesį netvarkiuose dariniuose, kuriems būdinga stochastinė krūvininkų pernaša, kai krūvininkų judris mažėja ilgėjant laiko trukmei po fotogeneracijos. Injektuotų į metalas/izoliatorius/puslaidininkis (MIS *angl.*) sandarą krūvininkų ekstrakcijos (i-CELIV) metodo privalumai - nėra rekombinacijos įtakos, aiškus krūvininkų pasiskirstymas, patogu atskirai nustatyti elektronų ir skylių judrius [4].

Kiti metodai, naudojami tirti rekombinacijos savybes netvarkiuose dariniuose yra integrinės erdvinio krūvio ribotos srovės kinetikos, plazmos injekcijos bei dvigubos injekcijos srovių kinetikos, srovės kinetikos lauko efekto organinių medžiagų tranzistoriuje [5]. Mažo judrio medžiagoms būdinga bimolekulinė Lanževeno rekombinacija, kuri yra salygota krūvininkų pernašos. Iš srovės kinetikos formos galima nustatyti ar rekombinacija atitinka Lanževeno atvejį, ar yra redukuota. Tai itin svarbu tiriant krūvininkų rekombinacija organiniuose Saulės elementuose (OSE). Taip pat galima nustatyti pernašos ir rekombinacijos parametrus: greitesniųjų ir lėtesniųjų krūvininkų judrius, bimolekulinės rekombinacijos koeficiento priklausomybę nuo elektrinio lauko stiprio ir k.t.

Naudoiant CELIV metodikas buvo ištirtos krūvininkų kvantinio fotogeneracijos efektyvumo, prilipimo judrių, rekombinacijos bei savybės, nulemiančios Saulės elementų efektyvumą, hidrogenizuoto amorfinio silicio ir mikrokristalinio silicio sluoksniuose.

Tiriant organinių polimerinių sluoksnių skirtų Saulės celėms savybes parodyta, kad fotosužadintų skylių judris relaksuoja nuo  $10^{-1} \div 10^{-2}$  cm<sup>2</sup>/Vs subnanosekundinių laikų intervale iki  $10^{-5} \div 10^{-6}$  cm<sup>2</sup>/Vs milisekundinėse trukmėse, ir ši relaksacija neįtakota tuo pat metu vykstančios krūvininkų tankio relaksacijos.

Vienarūšių organinių medžiagų sluoksniuose bimolekulinė rekombinacija yra Lanževeno, o jų mišiniuose (tūrinėse heterosandūrose) krūvininku bimolekulinė rekombinacija žymiai sumažinta dėl elektronų ir skylių erdvinio išskyrimo, nulemiančio jų tolesnę pernašą link priešingų elektrodų skirtingais šiais keliais. Remiantis metodais nustatvta bimolekulinės rekombinacijos koeficiento priklausomybė nuo trukmės po sužadinimo, bei apie 1000 kartų redukuotos Lanževeno rekombinacijos priežastis: po atkaitinimo tūrinėse heterosandūrose OSE susiformuoja 2D struktūros, kurių buvimas sumažina rekombinacijos spartą ir padidina OCE efektyvumą.

Tiriant organinių lauko efekto darinių srovės kinetikų bei injekcinio CELIV charakteristikas, nustatytas krūvininkų judris išilgai ir skersai organinės medžiagos sluoksnio, t.y. buvo sukurta metodika tirti sluoksnio morfologijos įtaką krūvininkų judriui.

Reikšminiai žodžiai: netvarkus dariniai, krūvininkų pernaša, rekombinacija

#### Literatūra

[1] A. Pivrikas, N. S. Sariciftci, G. Juška, R. Osterbacka, Prog. Photovolt: Res. Appl. **15**, 677-696, 2007.

[2] G. Juška, K. Arlauskas, M. Viliūnas, J. Kočka, Phys. Rev. Lett. 84, 4946, 2000

[3] R. Osterbacka, A. Pivrikas, G. Juška, K. Genevičius, K. Arlaukas,H. Stubb, Curr. Appl. Phys. 4, 534, 2004

[4] G. Juška, N. Nekrašas, K. Genevičius, J. Non-Cryst. Sol. 358, 748, 2012

[5] G. Juška, N. Nekrašas, K. Genevičius, T. Grigaitis, J. Appl. Phys. 116, 023702, 2014

#### Ar Trumpabangiai UV Sviestukai Bus Sekanti Didele Sekme III-Nitridu Technologijoje?

#### Will Deep UV LEDs be a Next Big Thing in III-Nitride Technology?

Remis Gaska

UVTON, Inc., 432 Press Lindler Road, Columbia, SC, USA

remi.gaska@uvton.com

AlGaN emerged as a material system uniquely suited for fabrication of Deep Ultraviolet Light Emitting Diodes (DUVLEDs) with peak emission wavelengths from 210 nm to 340 nm and covering part of UV-A, UV-B and large part of UV-C. Note that these materials are also considered for DUV Laser Diodes.

Advances in AlGaN epitaxial layer growth technology, device designs, device fabrication and light extraction allowed to achieve external quantum efficiency and wall-plug efficiency in excess of 10% and 7% respectively [1]. These advances were followed by the development of manufacturing technology and, thus, currently DUVLEDs with peak emission in the range of 270nm -285 nm with output optical power of 2mW – 10mW are commercially available [2].

Most DUVLEDs are produced using standard Sapphire substrates. These substrates are transparent in UV but have a large lattice mismatch with AlN/AlGaN epitaxial layers. There is also a significantt effort to develop DUVLED technology using true bulk AlN substrates produced in the U.S. by Crytal IS, Inc. and Hexatech, Inc. It is expected that a much better lattice match with AlN/AlGaN epitaxial layers shoud significantly incease efficieny of DUVLEDs. However, so far bulk AlN substrates are produced in very limited quantities and have problems with transparency in DUV spectral range.

DUVLEDs are becoming an enabling platform for a broad range of applications in Military, National Security, Industrial and Commercial markets.

Few distinct types of applications that use DUVLEDs emitting in different DUV spectral ranges can be divided as follows:

- 280nm-340nm range. Used as fluorescence excitation sources for a wide variety of materials, including DNA containing materials. Two major programs focused on detection of weaponized bio-agents and harmful pathogens were funded by the Defense Advanced Project Agency (DARPA) in the period from 2004 to 2012 [3];
- 300nm-320nm. One of key applications is considered in medicine for skin treatment, for example, psioriasis;
- 265nm-280nm. Disinfection. Destruction of DNA in this spectral range enabels to eradicate bacteria, viruses and fungi in water, air and on the surface;
- 290nm-310nm. Food preservation. Extensive work was performed by a number of research groups in academia and various industries,

including U.S. Department of Agriculture. It was confirmed that illumination in this range increase shelf-time of fresh produce few times;

- 250nm-260nm. Optical sensors for ozone detection;
- 215nm-225nm. Optical sensors for detection of such gases like NO, NO2, SO2, etc. in medicine and combustion systems.

These examples show potential of DUVLEDs in novel systems with potentially high volume applications. There numerous niche applications that successfully are using these devices with optimized specific peak emission wavelenghts.

Still, broad market penetration of DUVLEDs is waiting to happen. It will require further technology improvements, reduction of cost and multiple high volume DUVLED manufacaturers.



Fig. 1. Eradication of *E-coli* in running water at 100 ml/minute using 275 nm DUVLEDs [4]. 6 Log reduction was achieved at DUVLED optical power less than 30 mW

#### References

[1] M. Shatalov, W. Sun, A. Lunev, X. Hu, A. Dobrinsky, Y. Bilenko, J. Yang, M. Shur, R. Gaska, C. Moe, G. Garrett and M. Wraback, AlGaN Deep Ultraviolet Light-Emitting Diodes with External Quantum Efficiency above 10%, Applied Physics Express 5 (2012) 082101

[2] www.s-et.com

- [3] DARPA SUVOS (2004-2008) and SMUVT (2008-2012)
- [4] I. Gaska et al, Cleantech 2013

#### Šviesos darinių valdymas lokalinių Hilberto transformacijų pagrindu

#### Management of light patterns based on local Hilbert transform

Kestutis Staliunas<sup>1,2</sup>, Waqas Ahmed<sup>2</sup>, Muriel Botey<sup>2</sup>, Ramon Herrero<sup>2</sup>, Zeki Hayran<sup>3</sup>, Hamza Kurt<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institució Catalana de Recerca i Estudis Avancats (ICREA), Passeig Lluís Companys 23, 08010 Barcelona, Spain

<sup>2</sup>Departament de Física, Universitat Politècnica de Catalunya (UPC), Edifici Gaia, Rambla Sant Nebridi 22, 08222 Terrassa, Spain

<sup>3</sup>Nanophotonics Research Laboratory, Department of Electrical and Electronics Engineering, TOBB University of Economics and

Technology, Ankara 06560, Turkey

kestutis.staliunas@icrea.cat

Abstract: We propose a new approach based on a local Hilbert transform to design non-Hermitian potentials generating arbitrary vector fields of directionality,  $\vec{p}(\vec{r})$ , with desired shapes and topologies. We derive a local Hilbert transform to systematically build such potentials, by modifying background potentials (being either regular or random, extended or localized). In particular, we explore particular directionality fields, for instance in the form of a focus to create sinks for probe fields (which could help to increase absorption at the sink), or to generate vortices in the probe fields. Physically, the proposed directionality fields provide a flexible new mechanism for dynamically shaping and precise control over probe fields leading to novel effects in wave dynamics.

Classical Hilbert transform (in optics also called Kramers-Kronig relation) is closely related with the directionality of time. Directionality of time, in other words the causality, generates a pair of integral relations between the real and imaginary part of the spectra.

Our proposal is based on the same idea – we break the invariance of space in a similar way. We introduce the transform, similar to Hilbert transform which ensures the unidirectionality of space.

The basic idea is illustrated in fig.1.

In simplest case of one-directional system we can construct pieces (domains) of space with alternatingly broken left-right unidirectionality. This creates sources and sinks of the probe field.

In two dimensional case it is more complicated. We can construct potentials with arbitrary configurations of directionality field. For instance we can build sinks, chiral fields and others. Then the Hilbert transform is defined at every space point with required directionality. This mathematically introduces the local Hilbert transform.

The idea can find many applications in optics. For instance the potentials can be constructed so, ensuring accumulations of laser fields into desired ranges of space [1]. The potentials can be as well build to create an invisibility on demand – absence of scattering to some particular direction [2].

In the presentation the basic idea will be discussed, together with possible application. In particular simulations of a VCSEL laser with specially designed potential will be demonstrated, which ensure an efficient accumulation of the generated field.



Fig.1. Directionality fields. (a) One-dimensional directionality field consisting of spatial domains of different parity, containing sinks, and sources between the domains. The first row represents a random complex potential with given real, n(x) and imaginary part, m(x)(blue, and red, respectively) with corresponding Fourier spectra of each domain shown in the second row. (b) Vector field to generate a complex directionality field in two spatial dimensions in form of a focus, which may eventually create a sink for the probe field. The insets schematically represent the Fourier transforms of an arbitrary random directionality potential at several points. (c.d) Vector fields in form of a node and an antinode, resulting in vortex with sink and a circular flow channel for the probe field. In all cases, the vector fields,  $\vec{p}(\vec{r})$ , are denoted by the dark blue arrows

Reikšminiai žodžiai: Laser pattern formation, Hilbert transform.

- W.W. Ahmed, R. Herrero, M. Botey, and K. Staliunas, Directionality Fields generated by a Local Hilbert Transform, submitted Phys. Rev. Lett., with referees, 2017.
- [2] Z. Hayran, R. Herrero, M. Botey, H. Kurt, and K.Staliunas, Invisibility on demand based on a generalized Hilbert transform, submitted to Nat.Commun., with referees, 2017.

#### Optinė mikroskopija: gandai apie jos mirtį gerokai perdėti?

#### **Optical microscopy: the reports of its death are greatly exaggerated?**

Rimvydas Juškaitis<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Aurox Ltd, Culham Science Centre, Abingdon OX14 3DB, UK <sup>2</sup>Department of Engineering Science, Oxford University, Parks Road, Oxford OX1 3JB, UK rimas.juskaitis@aurox.co.uk

Despite the fact that many principal developments in this field took place at the late 19th century classical optical microscopy is currently experiencing an extraordinary renaissance. New discoveries have turned this seemingly dull and stagnant area of textbook physics into a vibrant field of research and produced a kaleidoscope of techniques that are being actively used in cutting edge research ranging from biology to engineering and material science. Even the Abbe resolution limit, once regarded as an immovable obstacle, is now being gradually eroded.

In my talk I will try to convey my understanding as to how this remarkable transformation has happened and the role played by the early pioneers of modern microscopy – some of them with surprising links to Lithuania! We will look into the key developments of scanning and confocal microscopy and their liberating influence on the entire field of optical microscopy. We will also examine how the advances in other areas of optical technology, in particular the non-linear and adaptive optics have been successfully transplanted to the field of microscopy.

I will then proceed to describe in more detail the two recent advances in optical microscopy I was closely involved with. Structured illumination microscopy [1] is a concept rooted in the ideas of Fourier optics that could be traced to the original work by Ernst Abbe. This technique delivers the benefits of 3-dimensional microscopy as well as improved lateral and axial resolution - properties more typically associated with the laser scanning microscopy - in a package not much bigger than a classical compound microscope. The obvious practical advantages of this kind of fluorescence microscopy led me and my colleagues to establish Aurox Ltd, a spin-off company dedicated to the manufacturing of practical optical instruments based on this technology. The adaptive optics microscopy [2], on the other hand, is a spiritual descendant of adaptive optics technology widely used in modern large-aperture astronomy. Its use in microscopy, however, is far from straightforward and involves an unexpected way the scaling relationships that used to be the bread and butter of the classical optics.

Finally I will outline a number of physical and engineering challenges facing the field of optical microscopy at the beginning of the 21<sup>st</sup> century. Ranging from fairly mundane (the ever diminishing choice of the optical glasses available on the market) to rather more fundamental, the sheer scope of these challenges reassures that there will be work to be done for generations of physicists to come.

*Keywords: microscopy, fluorescence, confocal microscopy, adaptive optics.* 

#### References

- R. Juskaitis, T.Wilson, M.A.A.Neil and M.Kozubek, Nature 383, 804 (1996).
- [2] M.J. Booth, M.A.A.Neil, R.Juskaitis and T.Wilson, Proceedings of the National Academy of Sciences 99, 5788 (2002).

#### Karstieji kruvininkai kristaliniuose ir netvarkiuose puslaidininkiuose

#### Hot photocarriers in crystalline and disordered semiconductors

Almantas Pivrikas<sup>1</sup>, Kristijonas Genevicius<sup>2</sup>, Gytis Juska<sup>2</sup>

<sup>1</sup>School of Engineering and Information Technology, Murdoch University, Perth 6150, Australia. <sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius a.pivrikas@murdoch.edu.au

High sensitivity, or high-gain photodetectors are desirable to electrically detect small amounts of light, e.g. for night-vision imaging, sensitive sensors, optical telescopes, consumer electronics, spectroscopy and biomedical applications such as pulse oximeters, immunoassays, photoluminescence detection and numerous other applications. Gain is defined as the number of electrical charges extracted per absorbed photon, with the dark or leakage current subtracted.

In contrast to existing imaging technology, the human eye can see very well in the dark. However, cameras require a bright flash and/or a very long exposure time to produce high quality images. There exist ultrahigh sensitivity photodetectors made of photomultiplier tubes (PMT) and avalanche photodiodes (APD) which offer a gain exceeding 1e8, making it possible to detect an optical signal as small as a single photon.

Unfortunately, PMTs are bulky and require large voltages (typically > 1000 V). Avalanche photodiodes are better in this respect (requiring 100-200 V), but this is still impractical for a portable device such as a mobile phone. There are other technological and fundamental issues.

An alternative pathway to high gain is secondary photocurrent multiplication with secondary injection. Secondary photomultiplication with high gains exceeding 1e5 has been in disordered structures and organic molecules. Certain organic molecules, such as dyes or pigments, offer wide range spectral selectivity with a very narrow spectrum in light absorption. This allows tuning of the photosensor spectral range for the desired wavelength without optical filters.

In this work we present the device and material parameters required to achieve high photocurrent and gain in steady state. We find that when imbalanced mobilities and suppressed non-Langevin-type charge carrier recombination are present the devices will produce the highest gain. A low light intensity, strong electric field, and a large space charge limited current are also beneficial for reaching high gains. These results would be useful for practical photodetector fabrication when aiming to maximize the gain.

The photocarrier lifetime, a critical parameter defining the performance of phovoltaic devices and photodetectors, is commonly employed to describe the performance of devices fabricated from crystalline or non-crystalline materials. Numerous studies present the photocarrier lifetimes measured from transient decay signals in a multitude of non-crystalline systems, such as dye-sensitized solar cells, organic donor-acceptor blends, perovskites, nanoparticles, quantum dots and nanowires. Here we clarify why the photocarrier lifetimes, although being a useful material parameter in crystals, are not suitable for characterization of noncrystalline materials. The reason is the difference of charge carrier transport in disordered materials. The improper use of photocarrier lifetime leading to misinterpretation of the nature of recombination in noncrystalline materials is highlighted [1].

Another critical parameter of any photovoltaic device or photodetector is the photocarrier "drift distance" (i.e., the distance a photocarrier drifts before recombination) which is defined by the mobility-lifetime product in solar cells. We demonstrate that this traditional figure of merit is inadequate for describing the charge transport physics of light harvesting systems made from non-crystalline semiconductors. It is experimentally shown that the onset of the photocarrier recombination is determined by the electrode charge and we propose the mobilityrecombination coefficient product as an alternative figure of merit. These finding necessitate a rethink of the critical parameters of charge transport [2].

A dispersive transport, typically observed during the charge extraction in disordered organic systems, implies a distribution of charge carrier mobilities that negatively impact on device performance. Dispersive transport is understood to be caused by the time-dependent mobility of hot charge carriers. The reduction of excess photocarrier energy during relaxation typically happens on a subpicosecond time scale. Here, we present the experimental results of hot photocarrier dependence on photon energy, electric field and film thickness. The data demonstrates that the dispersive photocurrent in organic solar cells originates not from the loss of excess energy during hot photocarrier thermalization, but rather from the loss of charge carrier density during transport within localized Density-of-States and trap states. Our results emphasize that further efforts should be directed to minimizing the density of trap states, rather than controlling energetic relaxation of hot carriers within the density of states.

*Keywords: charge transport, recombination, photocarrier lifetime, photodetectors.* 

- [1] A. Pivrikas, Bronson Philippa, Ronald D. White and Gytis Juska, Nature Photonics. **10**, 282 (2016).
- [2] M. Stolterfoht, A. Armin, B. Philippa, R.D. White, P.L. Burn, P. Meredith, G. Juska & A. Pivrikas, Scientific Reports 5, 9949 (2015).

#### Superlaidieji detektoriai astronomijai

#### **Superconducting Detectors for Astrophysics**

Jonas Žmuidzinas

California Institute of Technology, Division of Physics, Mathematics, and Astronomy 301-17 Pasadena CA 91125 USA jonas@caltech.edu

Over the past four decades, superconducting detectors have moved from the early concept stage to deployment in major cosmological experiments and in instruments on leading telescopes throughout the world. Versions of these detectors have been developed across the electromagnetic spectrum, from microwaves to x-rays, with performance that often approaches fundamental limits. Superconducting detectors are used to trace water on small bodies in our solar system, to study the early stages of planet formation in protoplanetary disks, to map the history of star formation in galaxies over cosmic time, to study dark matter in distant clusters of galaxies, and to search for the signature of gravitational waves produced in the earliest moments of the universe. Superconducting detectors will soon be used to directly image exoplanets around nearby stars and will enable a new generation of ground-based instruments and space observatories.

The history of superconducting detectors dates back to the late 1930s [1,2] with the introduction of the superconducting bolometer, in which a superconducting strip biased on its resistive transition was used to sense small changes in temperature resulting from absorption of radiation. This device was not immediately practical and was superseded by the helium-cooled germanium bolometer developed in the early 1960s [3,4], which opened up infrared astronomy in the 1960s and 1970s and reached its zenith with the Herschel and Planck space missions [5,6].

Bardeen, Cooper, and Schrieffer's theoretical breakthrough [7], coupled with Giaever's development of the tunnel junction [8], stimulated new concepts such as the pair-breaking tunnel junction detector [9]. Indeed, by the 1980s, tunnel junctions enabled the first practical application of superconducting detectors in astronomy, when used in sensitive radio-style receivers for millimeter and sub-millimeter wavelengths [10,11]. A sophisticated quantum-mechanical theory is needed to describe their operation [12], and these SIS receivers were used on the Herschel Space Observatory [5,13] (Fig. 1) and enable the ALMA interferometer in Chile.

The superconducting bolometer made a return in the mid-1990s with the use of superconducting quantum interference device (SQUID) readouts [14], especially multiplexed versions [15] that opened a path to larger detector arrays [16,17]. However, the complexity of this technology spurred us to find a much simpler solution, the frequency-multiplexed kinetic inductance detector [18, 19] (Fig. 2), which is now being developed in over a dozen countries for deployment on large telescopes,

from millimeter to optical wavelengths [20], and for use in future space missions [21].



Fig. 1. 1.2 THz SIS mixer developed at Caltech/JPL for the Herschel Space Observatory [13].



Fig. 2. Left: 484-pixel array of superconducting kinetic inductance detectors (KID) for 350 µm imaging. Right: An integrated KID-based millimeter-wave spectrometer.

#### References

- [1] D. H. Andrews, W. F. Bruksch, W. T. Ziegler, and E.R. Blanchard, Phys. Rev. 59, 1045-1046 (1941).
- [2] A. Goetz, Phys. Rev. 55, 1270-1271 (1939).
- [3] F. J. Low, J. Opt. Soc. Am. 51, 1300-1304 (1961).
- [4] P. L. Richards, J. Opt. Soc. Am. 54, 1474-1484 (1964).
- [5] G. L. Pilbratt et al., Astron. Astrophys. 518, L1 (2010).
- [6] P. A. R. Ade et al., Astron. Astrophys. 536, A1 (2011).
- [7] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175-1204 (1957).
- [8] I. Giaever. Phys. Rev. Lett. 5, 147-148 (1960).
- [9] E. Burstein and D. N. Langenberg, Phys. Rev. Lett. 6, 92 (1961).
- [10] G.J. Dolan, T.G. Phillips, and D.P. Woody, Appl. Phys. Lett. 34, 347-349 (1979).
- [11] P.L. Richards, T.M. Shen, R.E. Harris, and F.L. Lloyd, Appl. Phys. Lett. 34, 345-347 (1979).
- [12] J. R. Tucker and M. J. Feldman, Rev. Mod. Phys. 57, 1055-1113 (1985).
- [13] A. Karpov, D. Miller, F. Rice, J.A. Stern, B. Bumble, H.G. Leduc, and J. Zmuidzinas, Proc. SPIE 5498, 616-621 (2004).
- [14] K.D. Irwin, Appl. Phys. Lett. 66, 1998-2000 (1995).
- [15] J.A. Chervenak, K.D. Irwin, E.N. Grossman, J.M. Martinis, C.D. Reintsema, M.E. Huber, Appl. Phys. Lett. 74, 4043-4045 (1999).
- [16] W.S. Holland et al., M.N.R.A.S. 430, 2513-2533 (2013).
- [17] P. A. R. Ade et al., Ap. J. 812, 176 (2015).
- [18] P. K. Day, H. G. LeDuc, B. A. Mazin, A. Vayonakis, and J. Zmuidzinas, Nature 425, 817–821 (2003).
- [19] J. Zmuidzinas, Annu. Rev. Cond. Matt. Phys. 3, 169–214 (2012).
- [20] S. Meeker, ``DARKNESS: The First Microwave Kinetic Inductance Detector Integral Field Spectrograph for Exoplanet Imaging'', Ph.D. Thesis, U.C. Santa Barbara (2017).
- [21] J.J.A. Baselmans et al., Astron. Astrophys. 601, A89 (2017).

#### Aerozolių, debesų ir klimato sąveika

#### **Aerosol-Cloud-Climate Interactions**

Darius Čeburnis, Jurgita Ovadnevaitė, Colin D. O'Dowd

School of Physics and Centre for Climate and Air Pollution Studies, National University of Ireland Galway, Galway,

Ireland

darius.ceburnis@nuigalway.ie

Jūrinis aerozolis yra ypatingai svarbi globalinės atmosferos sudedamoji dalis, nes vandenynai dengia 70% Žemės paviršiaus, o dėl vandenynų tamsaus paviršiaus iš kosmoso pusės aerozoliai bei dėl jų susidarantys debesys žymiai keičia Saulės spinduliuotės sklaidą bei atspindį. Priklausomai nuo jų sudėties, aerozoliai veikia Žemės šiluminį balansą ir klimatą tiesiogiai, sklaidydami Saulės šviesą atgal į kosmosą, arba netiesiogiai, lemdami debesų susidarydamą bei jų gyvavimo trukmę, tokiu būdu šaldydami klimatą. Jūrinis aerozolis susidaro vandens paviršiuje, veikiamas vėjo, tačiau biologiniai procesai ir jų sąveikos keičia jų susidarymo procesą, t.y. šaltinio funkciją.

Prieš daugiau nei dešimtmeti nustatėme, kad organinės medžiagos yra ženkli sudedamoji jūrinio aerozolio dalis, kuri keičia aerozolio klimatines savybes [1]. Organinės medžiagos patenka į aerozolio sudėtį tiesiogiai, formuojantis oro burbuliukams, arba netiesiogiai, kuomet lakios dujinės organinės medžiagos besijungdamos į klasterius formuoja aerozolio daleles. Buvo nustatyta, kad jūrinio aerozolio organinės medžiagos yra ne tik unikalios savo sudėtimi (sudarytos ilgagrandininiu angliavandenilių, tokiu kaip lipopolisacharidai, baltymai ir amino rūgštys), bet ir sudėtingai keičiančios aerozolio fizines savybes higroskopiškumą bei debesų kondensacinių branduolių susidarymą - priklausomai nuo biologinio aktyvumo pasauliniame vandenyne. Organinės medžiagos pasižymi ryškiu dualizmu – menkai absorbuoja vandenį neisotintoje vandens garais aplinkoje, bet puikiai virsta debesų lašeliais persotintoje vandens garais aplinkoje [2]. Toks dualizmas buvo užfiksuotas ir pirminiame aerozolyje, susidarančiame lūžtant bangoms, ir antriniame aerozolyje, susidarant dalelėms iš dujinės fazės bei prieštaravo visuotinai pripažintai kappa-Kohler'io teorijai, numatančiai, kaip aerozoliai virsta debesų lašeliais. Skystų fazių atsiskyrimo termodinaminės pusiausvyros modelis (Liquid-Liquid Phase separation) labai gerai paaiškino proceso vyksmą bei atitiko eksperimentinius rezultatus. Skystų fazių atsiskyrimo metu netirpios organinės medžiagos koncentruojasi dalelės paviršiuje, ženkliai mažindamos paviršiaus įtempimo jėgas, tačiau beveik nepaveikdamos tirpalo savybių ir Raoult'o efekto, o fazių atsiskyrimas išsilaiko debesų lašelio augimo metu, net kai organinių medžiagų monosluoksnis nebedengia viso paviršiaus [3]. Fazių atsiskyrimo efekto pasekoje, esant konkrečiam debesų persotinimo laipsniui, debesų kondensacinių branduolių skaičius padidėja iki 10 kartų, lyginant su kappa-Kohlerio teorija ir, tuo būdu, žymiai keičia debesų

susidarymą bei jų gyvavimo trukmę.

Izotopiniais matavimo metodais pavyko atskleisti organinių medžiagų susidarymo ir virsmų dėsningumus pasauliniame vandenyne [4]. Stabilios anglies izotopinio santykio kaita turi ryškią vandenyno paviršiaus temperatūrinę priklausomybę, rodančią fotosintezės reakcijų poveikį izotopiniam santykiui bei organinių medžiagų praturtinimui aerozolio dalelėse. Eksperimentinių rezultatų paaiškinimui buvo sukurtas pusiau-empirinis modelis, kuriame tuo pat metu koegzistuoja ir netolygiai pasklidusios netirpios organinės medžiagos, susidarančios iš jūrinio planktono sąveikų su bakterijomis ir virusais bei sąveikų aukštesnėse mitybinėse grandinėse, bei tirpių organinių medžiagų, kurios yra galutinis sąveikų produktas bei yra tolygiai pasklidusios vandenynuose, o abiejų tipų organines medžiagos dinamiškai keičia viena kitą priklausomai nuo vandenyno paviršiaus temperatūros ir greičio, sąlygojančio pirminio aerozolio vėio susidarymą. Tuo pat metu, minėtų sąveikų metu vyksta ir dujinių medžiagų emisija į jūrinę atmosferą, iš kurių vėliau susidaro antriniai aerozoliai. Po visų šių transformacijų aerozoliai su krituliais grižta į vandenynų paviršių, taip užbaigdami organinių medžiagų apykaitos cikla (1 pav.).



1 pav. Organinių medžiagų jūros vandenyje bei atmosferoje apykaitos ciklas, atskleistas izotopiniais matavimais [4].

Reikšminiai žodžiai: aerozolis, jūrinė atmosfera, organinės medžiagos, izotopai, fazių atskyrimas, debesų konsaciniai branduoliai.

- [1] C.D. O'Dowd et al., Nature, 431, 676-680 (2004).
- [2] J. Ovadnevaite et al., Geophys. Res. Lett., 38, L21806 (2011)
- [3] J. Ovadnevaite et al., Nature, **546**, 637-641 (2017)
- [4] D. Ceburnis et al., Scientific Reports, 6, 36675 (2016)

### Krūvininkų lokalizacija, judris ir atsiskyrimo greičiai polimeriniuose saulės elementuose

#### Charge carrier localisation, mobility and separation rates in polymer solar cells

<u>Arvydas Ruseckas<sup>1</sup></u>, Dimali A. Vithanage<sup>1</sup>, Andrew Matheson<sup>1</sup>, Gordon J. Hedley<sup>1</sup>, Scott J. Pearson<sup>1</sup>, Ifor D.W. Samuel<sup>1</sup>, Vytenis Pranculis<sup>2</sup> and Vidmantas Gulbinas<sup>2</sup> <sup>1</sup>School of Physics and Astronomy, University of St Andrews, United Kingdom <sup>2</sup>Centre for Physical Sciences and Technology, Vilnius, Lithuania <u>ar30@st-andrews.ac.uk</u>

Organic photovoltaic cells can be assembled into lightweight and flexible solar panels which can be easily integrated into semitransparent windows, car roofs, etc. They are researched actively and small devices with power conversion efficiencies over 13% have been demonstrated. Photon absorption in organic semiconductor generates tightly bound excitons and charge generation occurs by electron or hole transfer at an interface between electron donor and acceptor materials. Most popular organic solar cells are made using conjugated polymers as electron donors and fullerene derivatives as acceptors which are blended together to fabricate bulk heterojunctions with large interface area. Because electron and hole transfer are short-range processes and the dielectric constants of organic semiconductors are low (typically between 3 and 4), the generated charge pairs are expected to be bound by Coulomb attraction. Yet the majority of pairs split into free carriers in the weak built-in electric field induced by a difference in the electrode work functions. The mechanisms of charge separation are still not understood and widely disputed [1].

We have combined broadband transient absorption spectroscopy with ultrafast carrier drift measurements to study the dynamics of charge separation in high performance solar cells based on the blends of the conjugated polymer PTB7 and the fullerene derivative  $PC_{71}BM$  as the active layers [2]. We found that the photogenerated electron-hole pairs separate into free carriers on a picosecond time scale with the fieldindependent rate which is determined by electron mobility in fullerene clusters (Fig. 1). The photogenerated holes delocalise on PTB7 chains which decreases the Coulomb binding energy of charge pairs. We will also discuss how the entropy increase upon charge transport from a mixed donor-acceptor phase to the pure donor and acceptor domains provides the gain of the free Gibbs energy which drives charge separation. Pure domains are less than 10 nm in size in optimised morphologies and provide efficient carrier generation as well as separation [3].



Fig. 1. Schematic illustration of the charge separation mechanism in efficient polymer-fullerene solar cells by electron hopping between fullerene molecules and hole hopping to a next polymer chain. The bottom panel shows hypothetic free energy surfaces of the electronic states along the charge separation coordinate and experimentally observed separation times.

Keywords: Organic semiconductors, bulk heterojunction, charge photogeneration, binding energy, transient absorption spectroscopy, ultrafast carrier drift.

#### References

- [1] G.J. Hedley, A. Ruseckas, I.D.W. Samuel, Chem. Rev., 117, 796-837 (2017).
- [2] D.A. Vithanage, A.B. Matheson, V. Pranculis, G.J. Hedley, S.J. Pearson, V. Gulbinas, I.D.W. Samuel, A. Ruseckas, J. Phys. Chem. C, **121**, 14060-14065 (2017).
- [3] G.J. Hedley, A.J. Ward, A. Alekseev, C.T. Howells, E.R. Martins, L.A. Serrano, G. Cooke, A. Ruseckas, I.D.W. Samuel, Nature Commun., 4, 2867 (2013).

#### Pilnojo lauko optinė koherentinė tomografija ir jos taikymai

#### Full-field optical coherence tomography and its applications

Egidijus Auksorius

Institut Langevin, ESPCI ParisTech, PSL Research University, CNRS UMR 7587, 1 rue Jussieu, 75005 Paris, France egidijus.auksorius@espci.fr

Optical coherence tomography (OCT) has become an established tool in biomedical imaging. Standard OCT is a fast point-scanning interferometric technique capable of in vivo visualization of tissue architecture. Detection can be parallelized by employing a camera and an imaging Michelson/Linnik interferometer to enable fast en face image acquisition deep in tissue. Furthermore, utilization of an inexpensive and spatially incoherent light source, such as an LED, can eliminate the cross-talk between pixels in the image. This technique, known as "full-field optical coherence tomography" (FF-OCT), is cost-effective, simple and achieves quick en face imaging that is challenging with a standard scanning OCT systems. FF-OCT is useful in a range of applications that require high resolution and/or en face imaging. For example, thanks to its high isotropic resolution (< 1  $\mu$ m in 3D), it can be used in applications that normally require the preparation of histology slides, such as in studying the enteric nervous system [1], for example. On the other hand, spatial resolution can be traded-off for a larger field-of-view  $(>1 \text{ cm}^2)$  that is necessary in, for example, subsurface fingerprint imaging [2].

Images of subsurface fingerprints are of great interest in biometrics since they can contain more details than the surface fingerprints and, most importantly, be largely free of imaging artifacts caused by damage, moisture or dirt on the surface. Thanks to the recent appearance of silicon cameras with high frame rate (~1 kHz) and high full well capacity (2 Me<sup>-</sup>), specifically designed for FF-OCT, a sensor can be built that is capable of detecting tissue reflectivity that is smaller than 10<sup>-10</sup> in just 0.1 s [3]. Such FF-OCT sensor allowed acquisition of high quality subsurface fingerprints, and subsequently, identification of individuals with high accuracy (with the equal error rate < 1 %) from a single finger [3]. Fig. 1 shows an example of such a subsurface fingerprint that contains sweat ducts and a fingerprint pattern from which a person can be identified.

Dark-field detection can be implemented in the FF-OCT configuration [4] to increase the sensor's performance in terms of the signal-to-noise ration (SNR) or acquisition time. Dark-field detection can reject spurious signal, such as specular reflections from a sample and other optical elements, that effectively allows a more efficient use of camera's detection bandwidth. Since some of the genuine signal is also rejected in the process, a brighter light source or a configuration that utilizes the limited light budget more efficiently is needed. A particular configuration that

involves an asymmetric interferometer with a 10:90 beamsplitter allows theoretical near ×4 increase in the detected signal. Another way to increase SNR is to use a light sources with a longer coherence length (>100  $\mu$ m), such as a VCSEL array, which effectively integrates the signal from a thicker tissue slice.



Fig. 1 Fingerprint as imaged with FF-OCT 100 to 200 µm below the finger surface. The white dots are sweat ducts and the black lines correspond to valleys of the surface fingerprint

The developed instrument could be used in a number of other *en face* deep-tissue imaging applications thanks to its high sensitivity and speed. Naturally, it could be used for imaging various skin conditions, such as cancer and other dermatological diseases. We are currently also using it for passive elastography experiments that can map the stiffness of biological tissues.

Keywords: Optical coherence tomography, Medical and biological imaging, Biophotonics, Fingerprints.

#### References

- [1] Coron, E., Auksorius, E., Pieretti, A., Mahé, M. M., Liu, L., Steiger, C., ... & Goldstein, A. M. (2012). Full-field optical coherence microscopy is a novel technique for imaging enteric ganglia in the gastrointestinal tract. *Neurogastroenterology & Motility*, 24(12).
- [2] Auksorius, E., & Boccara, A. C. (2015). Fingerprint imaging from the inside of a finger with full-field optical coherence tomography. *Biomedical optics express*, 6(11), 4465-4471.
- [3] Auksorius, E., & Boccara, A. C. (2017). Fast subsurface fingerprint imaging with full-field optical coherence tomography system equipped with a silicon camera. *Journal of Biomedical Optics*, 22(9), 096002.
- [4] Auksorius, E., & Boccara, A. C. (2015). Dark-field full-field optical coherence tomography. *Optics letters*, 40(14), 3272-3275.

#### Ilbaganges šviesos gijos atmosferos skaidrumo lange

#### Long-wavelength filaments in the atmospheric transparency window

<u>Audrius Pugžlys<sup>1,2</sup></u>, Claudia Gollner<sup>1</sup>, Valentina Shumakova<sup>1</sup>, Skirmantas Ališauskas<sup>1</sup>, Andrius Baltuška<sup>1,2</sup>, Alexander Voronin<sup>3,4</sup>, Alexander Mitrofanov<sup>3,4</sup>, Dmitriy Sidorov-Biryukov<sup>3,4</sup>, Alexey Zheltikov<sup>3,4,5</sup>, Daniil Kartashov<sup>6</sup> <sup>1</sup>Photonics Institute, TU Wien, Gusshausstrasse 27-387, A-1040 Vienna

<sup>2</sup>Center for Physical Sciences & Technology, Savanoriu Ave. 231 LT-02300 Vilnius, Lithuania

<sup>3</sup>Physics Department, M.V. Lomonosov Moscow State University, 119992 Moscow, Russia

<sup>4</sup>Russian Quantum Center, ul. Novaya 100, Skolkovo, Moscow Region, 143025 Russia

<sup>5</sup>Department of Physics and Astronomy, Texas A&M University, College Station TX, 77843 - 4242, USA

<sup>6</sup>Friedrich-Schiller University Jena, Max-Wien Platz 1, 07743 Jena, Germany

pugzlys@tuwien.ac.at

Following a steady progress in the development of mid-IR optical parametric chirped pulse amplification (OPCPA) technology [1] first successful demonstration of mid-IR filaments in ambient air was recently achieved [2] initiating a vigorous debate in the community on the filamentation mechanisms in the mid-IR. Substantially lower ionization rates cause significantly smaller electron plasma densities in mid-IR filaments as compared to the case of filaments generated by more common 800-nm and 1030-nm near-IR drives. Because of the low plasma density alternative mechanisms responsible for the intensity clamping and the arrest of the self-focusing collapse, namely, a saturation of higher order Kerr nonlinearity terms or shock driven walk-off of generated harmonics, have to be considered. Additionally, since mid-IR spectral range contains numerous vibrational resonances, an additional mechanism of losses, i.e., absorption of spectral components generated in a filament due to the spectral broadening needs to be considered next to ionization [3], rotational Raman excitation [4], and plasma absorption [3, 4]. Furthermore, GVD of air it the vicinity of 3.6 µm changes from positive to negative [5] which makes filamentation dynamics even more complicated and sensitive to the experimental conditions.

In this contribution we examine experimentaly properties of filaments ignited by multi-millijoule, 90 fs mid-IR pulses centered at 3.9 µm. The filaments are characterised by monitoring plasma density distribution and losses as well as temporal and spectral dynamics and beam profile evolution at different focusing strength. By strengthening focusing we observe a shift from plasma assisted filamentation to filaments with negligible plasma content. In the case of very low if any plasma density filamentation manifests itself by beam selfsymmetrization and spatial self-channeling. Spectral dynamics in the case of loose focusing are dominated by the Raman red shift, which leads to the overlap with  $\text{CO}_2$ resonance in the vicinity of 4.2 µm. Dynamic CO<sub>2</sub> absorption plays an important role in filamentation of 3.9 µm pulses and either alone or together with other nonlinear processes is responsible for the arrest of intensity. Finaly we show that filamentation of 3.9-µm pulses is very sensitive to temporal/spectral phase of mid-IR pulses. By controlling the chirp one can achieve 3D

self-compression which leads to a formation of mid-IR light bulets.



Fig.1 Input pulse duration dependent temporal (top panel) and spatial (bottom panel) profiles of mid-IR pulses after filamentation in ambient air.

Keywords: ultrafast non-linear optics, mid-infrared, filamentation.

#### Literature

- G. Andriukaitis, T. Popmintchev, S. Ališauskas, M.-C. Chen, A. Pugžlys, M.M. Murnane, A. Baltuška, and H.C. Kapteyn, Opt. Lett. 36, 2755 (2011).
- [2] A. V. Mitrofanov, T. Floery, A. A. Voronin, S. Alšauskas, D. A. Sidorov-Biryukov, A. B. Fedotov, A. Baltuška, A. Pugžlys, E. A. Stepanov, A. M. Zheltikov, Nature Sc. Reports 5, 8368 (2014).
- [3] A. Couairona, and A. Mysyrowicz, Physics Reports 441, 47 (2007).
  [4] Y.-H. C. H. M. Milchberg, Y.-H. Cheng, N. Jhajj, J. P. Palastro, E.
- [4] I.-H. C. H. M. Micholeg, I.-H. Cheng, N. Jiajj, J. F. Falasti, E. W. Rosenthal, S. Varma, J. K. Wahlstrand, and S. Zahedpour, Physics of Plasmas 21, 100901 (2014).
- [5] R. J. Mathar, J. Opt. A: Pure Appl. Opt. 9, 470 (2007).

#### Kelių optinių ciklų teravatų smailinės galios impulsų generacija parametrinio stiprinimo sistemomis

#### Few cycle terwatt peak power pulse generation in parametric amplification systems

Arūnas Varanavičius Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <u>arunas.varanavicius@ff.vu.lt</u>

Pastarojo dešimtmečio lazerių fizikos pasiekimai kuriant itin trumpų impulsų lazerius atvėrė naujas galimybes įvairių fizikos, chemijos, biologijos sričių tyrimuose pasiekiant atosekundinę laikinę ir angstreminę erdvine skyra mikropasaulio vyksmu tyrimo eksperimentuose. Čirpuotu impulsu parametrinio stiprinimo (ČIPS) metodas yra vienas iš pagrindinių būdų formuoti didelės smailinės galios kelių optinių ciklų trukmės impulsus. Pastaruoju metu viena pagrindinių tokių sistemų vystymo krypčių yra ne tik smailinės, bet ir vidutinės išvadinės spinduliuotės galios didinimas [1], leidžiantis paspartinti eksperimentus bei plėsti tokių šviesos šaltinių taikymų ratą.

Šiame pranešime apžvelgsiu Vilniaus universiteto Lazerių tyrimo centro ir lazerių gamybos kompanijų Šviesos Konversija, Ekspla mokslininkų pasiekimus vystant čirpuotų impulsų parametrinio stiprinimo metodiką bei kuriant 50 W vidutinės galios bei 5 TW smailinės galios parametrinio stiprinimo sistemą Ekstremalios šviesos infrastruktūrai Vengrijoje.

Mūsų ČIPS sistemų koncepcijos pagrindas daugiapakopis plataus spektro signalo stiprinimas femtosekundinėse ir pikosekundinėse pakopose kaupinamose Yb:KGW ir Nd:YAG lazeriais. Didelio kontrasto plataus spektro užkratas formuojamas kontinuumo generatoriuose ir parametrinio stiprinimo pakopose kaupinamose femtosekundinio Yb:KGW plečiami spinduliuote. lazerio Toliau impulsai neigiamos dispersijos grizmių sistemoje iki ~ 70 ps ir stiprinami pikosekundinėse pakopose, kurios yra kaupinamos didelės energijos pikosekundiniais Nd:YAG lazerio impulsais. Panaudojus 10 Hz pasikartojimo dažnio lempinio kaupinimo Nd:YAG lazeri ir aktyvią dispersijos valdymo sistemą buvo generuojami 35 mJ energijos išvadiniai impulsai, kurie galėjo būti spaudžiami iki 9 fs trukės [2]. Vėlesniuose tyrimuose buvo realizuotas užkrato signalo gaubtinės fazes stabilizavimas kontinuumo generatorių kaupinimui panaudojus femtosekundinio parametrinio stiprintuvo skirtuminę bangą [3].

Reikšmingas vidutinės galios padidinimas pasiektas panaudojus diodinio kaupinimo Nd:YAG stiprinimo sistemas pikosekundinių ČIPS sistemos pakopų kaupinimui. Įdiegus 4 kanalų bendros 300 W vidutinės galios kaupinimo lazerį ir panaudojus specialų hipergausinio spinduliuotės erdvinio profilio formavimo metodą buvo pasiekta 53 mJ išvadinių impulsų energija ČIPS sistemai veikiant 1 kHz pasikartojimo dažniu [4]. Išvadinių impulsų spektras apima 720-1000 nm diapazoną, o stiklo blokuose suspaustų impulsų trukmė neviršija 8 fs (1 a,b pav.). Išskirtinė šios ČIPS sistemos savybė – labai aukštas 10<sup>11</sup> vertę viršijantis impulso kontrastas (1 c pav.). Erdvinės išvadinės spinduliuotės charakteristikos pavaizduotos 1 d-f paveiksluose. Kaupinimo pluoštų parametrų optimizavimas ir aktyvios pluoštų valdymo sistemos panaudojimas užtikrino aukštą Strehl parametro S= 0.89 vertę fokusuojamam pluoštui.



1 pav. Išvadinės ČIPS sistemos spinduliuotės parametrai. a) laikinės charakteristikos, b) spektras, c) kontrasto charakteristikos, d) erdvinis intensyvumo skirstinys, e) bangos fronto parametrai, e) suskaičiuotas sufokusuoto pluošto erdvinis skirstinys

Sistemos stabilumą ir veikos patikimumą iliustruoja sub-220 mrad gaubtinės fazės bei <0.9% energijos standartiniai nuokrypiai užregistruoti 16 val. nepertraukiamos veikos testo metu.

Reikšminiai žodžiai: parametrinis stiprinimas, kelių optinių ciklų impulsai.

- [1] H. Fattahi et al., Optica 1(1), 45-63 (2014).
- [2] T.Stanislauskas et al., Optics Express, 22(1), 1865 (2014).
- [3] R. Budriūnas, T. Stanislauskas, A. Varanavičius, Journal of Optics, 17(9), 094008. (2015)
- [4] R. Budriūnas et al., Optics Express, 25(5), 5797 (2017).

#### APPOLO projektas - kaip lazerinės technologijos randa kelią į pramonę

#### APPOLO project – how laser technologies pave their way to industry

Gediminas Račiukaitis

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

Mokslinė veikla neatsiejama su siekiu pritaikyti sukurtas žinias kasdieniame gyvenime. Lazerio spinduliuotės sąveika su medžiaga pasireiškia didžiule įvairove priklausomai nuo lazerio ar medžiagos savybių ir suteikia laisvės vaizduotei ieškoti naujų sąveikos formų ar praktinio pritaikymo. Lazerinės technologijos viena iš tokių sričių. Sėkmingam žinių pritaikymui būtina apjungti pastangas tų, kas gamina įrangą, kuria technologijas ir tų, kas rengiasi visa tai panaudoti savo gamybos procese. 7-osios Bendrosios programos projektas APPOLO, kuris po ketverių metų vykdymo baigėsi šiemet, buvo bandymas sukoordinuoti 36 partnerius kūrybingam darbui įvertinant įrangą ir technologijas lazeriais paremtai gamybai, atsižvelgiant į galutinių technologijų vartotojų poreikius.

Šis didžiulis projektas apėmė 15 nepriklausomų projektų, kuriuose buvo testuojami nauji partnerių sukurti lazeriai, lazerio spindulio skenavimo įranga, lazerinių mašinų mazgai, visa tai buvo integruojama į sistemas artimas gamybinėms linijoms. Po to, kartu su kompanijų iš automobilių, gamybos priemonių gamybos, elektronikos, fotovoltaikos, spausdinimo sričių specialistais technologijos buvo išbandomos jų realiems gamybos procesams tenkinti.

FTMC Lazerinių technologijų skyrius ne tik koordinavo visą projektą, tačiau mūsų mokslininkai intensyviai dirbo keturiose kryptyse:

- lazerinio raižymo technologijos monolitinėms jungtims plonasluoksniuose CIGS saulės elementuose formuoti;
- selektyvus lazeriu inicijuoto katalitinio polimerų metalizavimas elektronikai;
- polimerų apdorojimas rezonansine infraraudona spinduliuote membraniniams filtrams biomedicinos pramonei;
- precizinis metalų paviršiaus tekstūravimas lazeriais juvelyrikai.

Visose šiose kryptyse pasiekėme įdomių ir svarbiausia pritaikomų rezultatų. Besiremdami partnerių patirtimi sukūrėme naują metodą matuoti fotovoltinių elementų elektrines charakteristikas lazerinio tekstūravimo metu. Kombinuojant didelio impulsų pasikartojimo dažnio lazerius su ypatingai greitu poligoniniu skeneriu, P3 lazerinis raižymo procesas gali būti sėkmingai vykdomas iki 50 m/s greičiu, kas dešimt kartų viršija dabartinius gamybos poreikius.

Ieškodami būdų selektyviam įvairių polimerų metalizavimui, sukūrėme patentuojamą metodą panaudojant pikosekundinį lazerį ir katalitinį vario nusodinimą ant lazeriu aktyvuotų polimerų vietų. Šis metodas leidžia panaudoti standartinis, pramonėje naudojamus polimerus ir tuo atpigina elektronikos integravimą ant sudėtingos formos polimerinių gaminių. Metodas toliau vystomas, siekiant jį visapusiškai išbandyti ir kaip galima greičiau komercializuoti.

Rezonansinis polimeru sužadinimas lazeriu infraraudonoje spektro dalyje ir jo panaudojimas medžiagų apdirbimui derinamo bangos ilgio lazeriais, sena idėja sklandžiusi mūsų bendruomenėje. Lazerinė abliacija šio tipo lazeriais buvo pritaikyta polimerų perforacijai. Didelės impulso energijos subnanosekundiniai lazeriai buvo testuojami preciziniam metalų graviravimui juvelyrikos dirbiniams. Tai suteikia naujas galimybes partneriams tiekti į rinką naujus produktus.

labai svarbi projekto pusė: Kita glaudus bendradarbiavimas su panašių, lazerinių technologijų užsiimančių kūrimu laboratoriju mokslininkais Ispanijoje, Olandijoje, Suomijoje, Šveicarijoje, Vokietijoje. Visi atėjome į projektą su skirtingomis žiniomis, įgūdžiais ir tradicijomis. Nuolatinis keitimasis informacija padėjo sukurti kūrybišką atmosferą. Teikiant pagalbą verslo įmonėms projekto vykdymo metu, mums visiems kartu padėjo susisteminti savo žinias apie efektyvų lazerio energijos panaudojimą, procesų optimizavimą, spartų ir tikslų paviršių tekstūravimą lazeriais. APPOLO paskleistos žinios pritaikomos kitose lazerių centruose.

Didžioji partnerių dalis – pramonės įmonės, mažos ir labai didelės. Bendravimas su jais leido "prakirsti langą į pasaulį": Europos (ir ne tik) įmonės mato mūsų laboratorijos galimybes ir pasiekimus, panaudojant lazerius realiems gamybos procesams įgyvendinti. APPOLO projektas suteikė matomumą ir pasitikėjimą mūsų moksline veikla. Tai leidžia pritaikyti mūsų žinias naujų klientų poreikių tenkinimui, generuoti idėjas naujiems tarptautiniams projektams.

Reikšminiai žodžiai: lazerinės technologijos.

#### Ultrastruktūrinis bio-vaizdinimas su polarimetriniu netiesiniu optiniu mikroskopu

#### Ultrastructural Bio-imaging with Polarimetric Nonlinear Optical Microscopy

Lukas Kontenis<sup>1</sup>, Ahmad Golaraei<sup>1</sup>, Masood Samim<sup>1</sup>, Serguei Krouglov<sup>1</sup>, Kamdin Mirsanaye<sup>1</sup>, Richard Cisek<sup>1</sup>, Brian Wilson<sup>2</sup>, Roya Navab<sup>2</sup>, Ming-Sound Tsao<sup>2</sup>, Edvardas Žurauskas<sup>3</sup>, Jonas Venius<sup>4</sup>, Ričardas Rotomskis<sup>4</sup> and Virginijus Barzda1

<sup>1</sup>University of Toronto, Department of Physics, Department of Chemical and Physical Sciences, 3359 Mississauga Rd, Mississauga, ON, L5L1C6, Canada

<sup>2</sup>Princess Margaret Cancer Centre, University Health Network, 610 University Avenue, Toronto, ON M5G2M9, Canada <sup>3</sup>National Centre of Pathology, P.Baublio str 5, Vilnius, LT - 08406, Lithuania

<sup>4</sup>National Cancer Institute, Baublio 3B, Vilnius, LT- 08406, Lithuania

virgis.barzda@utoronto.ca

Advanced optical microscopy is experiencing a renaissance by breaking the diffraction limit of spatial resolution, providing imaging at video frame rates and achieving deep tissue imaging. Significant advancements in microscopy are realized by employing nonlinear light-matter interactions. Many biological structures, when exposed to high intensity femtosecond laser radiation, exhibit harmonic generation effects, and hence, do not require labeling with dyes that can potentially disrupt the functionality of the system.

In this lecture, novel double and triple Stokes-Mueller polarimetry formalism will be reviewed [1, 2] and examples of polarimetric second harmonic generation (SHG) [3] and third harmonic generation (THG) [4] microscopy imaging will be presented. The nonlinear Stokes-Mueller polarimetric microscopy enables to extract ultrastructural information from each voxel of the imaged area, beyond the diffraction limited resolution. Sampe images can be constructed containing structural maps with various information such as crystallographic symmetry and orientation, nonlinear susceptibility ratios, degree of polarizations and disorder parameter (in the form of entropy) for each pixel of the image. The detailed ultrastructural information can be employed for material science, biological and biomedical studies.

Nonlinear digital histopathology investigations with polarimetric SHG and THG microscopy will be reviewed and imaging examples will be given for lung, thyroid, breast and pancreas tumors. The polarimetric SHG microscopy can be applied for routine cancer diagnostics together with standard hematoxylin and eosin labeled (H&E) pathology slides [5].

The examples of ultrastructural studies of human heart conduction system will be shown. Label-free, wide-field video-rate microscopy will be presented. Live imaging of muscle cell contractions is achieved with the wide-field microscopy at a single sarcomere spatial resolution. The live imaging of muscle contraction can be used as an investigation platform for contractility research and discovery of new antiarrhythmic agents.

The presentation will be concluded with the overview of future directions of nonlinear optical microscopy in biomedical imaging.



Fig. 1. Polarimetric SHG microscopy of H&E stained normal and malignant lung tissue. Column (a) shows bright-field microscopy images with square indicating area of 110  $\mu$ m×110  $\mu$ m used for SHG imaging (columns b to e), (b) SHG intensity images, (c) the susceptibility ratio map, (d) the fibril orientation map, and (e) the degree of linear polarization map.

Keywords: nonlinear Stokes-Mueller polarimetry, polarimetric second harmonic generation microscopy, ultrastructural microscopy, collagen, cancer diagnostics.

#### References

- M. Samim, S. Krouglov, and V. Barzda, J. Opt. Soc. Am. B, 32, 451 (2015).
- [2] M. Samim, S. Krouglov, and V. Barzda, Phys. Rev. A., 93, 0138471 (2016).
- [3] L. Kontenis, M. Samim, A. Karunendiran, S. Krouglov, B. Stewart, and V. Barzda, Biomed. Opt. Express, 7, 559 (2016).
- L. Kontenis, M. Samim, S. Krouglov and V. Barzda, Opt. Express, 25, 13174 (2017).
- [5] M. Burke, A. Golaraei, A. Atkins, M. Akens, V. Barzda and C. Whyne, J. Struct. Biol. 199, 153 (2017).

#### Didžioji šimtmetį brandinta fizikų svajonė išsipildė: tapo aptiktos gravitacinės bangos ir **GW150914** signalas

#### The great century-old physics dream came true: gravitational waves and GW150914 signal are detected

Kazimieras Pyragas

Lietuvos edukologijos universitetas, Gamtos, matematikos ir tecnologijų fakultetas, Studentų g., 39, LT-08106 Vilnius. kazimieras.pyrgas@vpu.lt

Pranešime pateigtos šioulaikinės žinios apie prieš šmtmetį nusakytas gravitacines bangas. Jame nagrinėjami šie klasymai: gravitacinių bangų fizikos raidos pradmenys, kas yra gravitacinės bangos, gravitacinės bangos Einšteino teorijoje, gravitacinių bangų šaltiniai, gravitacinių bangų detetoriai, rezonansiniai ir lazerinai tektoriai, penki gravitacinių bangų paieškos etapai, Hanfordo ir Livingstono GW150914 įvykis, bei kita.

A. Kas yra gravitacinės bangos. Apie bendrasias bangų terpėse sampratas. Gravitacinės bangos Einšteino gravitacijos teorijoje [1-4].

B. GB generavimas. Silpnosios GB. Pespektyviausi **GB šaltiniai.** Silpnosios GB ( $g_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu+} h_{\mu\nu}$ , čia  $g_{\mu\nu}$ silpnosioms GB atitinkanti erdvėlaikio metrika,  $\eta_{\mu\nu}$ , Minkovskio metrika, mažiejinuo jos nuokrypiai) tekina tokias Einšteino lygtis

$$\Box h_{\mu\nu} = \frac{16\pi G}{c^2} T_{\mu\nu}.$$
 (1)

čia  $\square$  yra Dalamdero operatorius,  $T_{\mu\nu}$  - sistemos energijos ir impulso tenzorius. Žemiausias spuindliuojantis EM bangas multipolis yra sistemos dipolis. Žemiausias spuindliuojantis silpnasias GB bangas multipolis yra mechaninės sistemos kvadrupolis.

• EM, bei GB bangų sistemos visos energijos išspinduliavimo galia yra:

$$\varepsilon = \frac{2}{3cc^3} \ddot{d}^2, \quad \frac{d\epsilon}{dt} = -\frac{G}{45c^5} \ddot{D}_{ik} \ddot{D}^{ik}, \tag{2}$$

čia  $d=\Sigma e_i r_i$  sistemos elektros dipolinis momentas c šviesos greitis, G – Niutono gravitacinė konstanta,  $D_{ik}$ . sistemos kvadrupolinis momentas. Pastebėtina, kad GB energijos išspinduliavimo intensyvumas beveik 10<sup>40</sup> mažesnis nei atitikantis EB intensyvumas. Taip:

Jupiteris judėdamas aplink Saulę ( $\Omega = 1,68 \cdot 10^{-8} s^{-1}$ ,  $M = 1.9 \cdot 10^{30}$ g,  $R = 7.78 \cdot 10^{13}$ cm) išspinduliuoja gravitacinių bangų dėka viso apie  $P \approx 5.3$  kW energijos srautą (akad. V. Foko įvertinimas)! Sukantis aplik statmeną ašį plieno stripas (ilgis l yra 20 m, spindulys r = 1 m, tankis  $\rho = 7.8 \ g/cm^3$ , masė  $M = 4.910^8$  g), gravitacinėmis ban-gomis išspinduliuoja energijos srautą  $\frac{d\varepsilon}{dt} \approx 2.210^{-22} \frac{erg}{s}$ C. Perspektyviausi gravitacinių bangų šaltiniai. Apart

paminėtų GB bangų šaltinių dabar manoma, kad perspektyviausi yra gamtos sukurti šaltiai, tai:

Masyvių juodųjų skylių susiliejimas, susiduriant galaktikoms, galimas juodųjų skylių formavimasis.

> Juodosios skylės besisukančios apie masyviases juodasias skyles.

Daugybė galaktikų dvinarių sistemų, kurių daugelis yra sudarytos iš neutroninių žvaigždžių ir juodųjų skylių.

Dvinarių sistemų dinamika yra įdomi tuo, kad dvinarės sistemos, spinduliuojančios energiją gravitacinėmis bangomis, komponentai turi judėti ne stacionariomis (elipsinėmis) orbitomis, bet spiralinėmis, artėdamos viena prie kitos. Jų artėjimo greitį galime gauti, energijos spinduliavimą susieję su jų suartėjimu

$$=r_0(1-t/\tau_0),$$
 (3)

čia  $au_0 = 64G^3m_1m_2(m_1 + m_2)/5c^3$ , komponentų susiliejimo laikas. vra

D. Gravitacinių bangų detektorai. GB detektoriai (antenos) buvo pradėtos gaminti JAV. 1967 m. J. Veberis sukūrė pirmąjį GB detektorių. Po to Veberio tipo antenos buvo pagamintos Moskvos Universitete (Prof. V. Braginskis), Kijevo Teorinės fizikos institute Ukrainos MA (Prof. K. Pyragas [3]) ir su lomis atlikti atitinkantys matavimai. Dabar pasaulyje veikia virš dešimties vadinamųjų strypinių, sferinių, lazerinių GB detektorių milijonus kartų jautresnių nei Veberio antena.

E. Signalas GW150914. GB Lazerinės antenos LIGO, dislokuotos JAV Hanforde ir Livingstone (tarp jų atstumas yra apie 3000 km.) 2015 m. rusėjo 14 d. 09 val. 50 min. 45 s. faktškai vienu ir tuo pačiu metu (vėlavimas vra apie 7 milisekundes) užregistravo signala (1 pav.).



1 pav. Signalas GW150914

Jį, labai kompetentingų mokslininkų grupė, interpretavo kaip dviejų juodųjų skylių kurių masės yra apie 36  $M_{\odot}$ ir 29Mo susiliejimą, prarandant 3Mo. Naujai susidariusi juodoji skylė turi masę lygią apie 62 M<sub>o</sub>. Šie signalai mokslinėje literatūroje yra žymimi, kaip GW150914 įvykiai. Jie ženkliai skiriasi nuo fono triukšmų.

#### Literatūra

[2] Pyragas K. Svirskas K. Erdvėlaikioir gravitacijos teorija. II Bendroji reliatyvumo teorija. Vilnius 1998, VPU Leidykla, 328 p.

[5] Abbott B. et al. Phys.Rev.Lett. 116, 061102 (2016).

<sup>[1]</sup> Misner C.W., Thorne K.S., Wheeler J.A., Gravitation. San Francisco, W.H. Freeman and Company, 1973, 1279p.

<sup>[3]</sup> Pyragas K. Grav. bangos. Vilnius 2000, VPU Leidykla, 58 p.

<sup>[4]</sup> Pyragas K. (mokslo vadovas) Разрабока теоретических основ и осущестление измерении гравитационных волн (Отчет по научной теме ИТФ АН УССР, Киев 1974, 95 стр.; Исследование временных характеристик высокочастотной составляюшей гравитационного поля

#### Tiesioginės viršūninio kvarko ir Higgs bozono sąveikos paieška su LHC

#### Search for Direct Interactions Between the Higgs Boson and the Top Quark at the LHC

Aurelijus Rinkevičius<sup>1,2</sup>, CMS kolaboracija<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Cornell University, Cornell Laboratory for Accelerator-based Sciences and Education, 245 East Avenue, Ithaca,

NY 14853-2501, USA

<sup>2</sup>CERN, CH-1211 Geneva 23, Switzerland aurelijus.rinkevicius@cern.ch

Prieš penkis metus atrasta 125-GeV elementarioji dalelė reikšmingai sutampa su Standartinio Modelio Higgs bozonu. Atradimą pavyko padaryti pasinaudojant keletu lengviausiai eksperimentiškai aptinkamų Higgs skilimų (į leptonus ir fotonus), tačiau dalis svarbių savybių tokiais skilimais nėra ištiriami. Pasibaigus Didžiojo hadronų greitintuvo (LHC) pirmajam duomenų rinkimo etapui (Run 1), šį rezonansą/dalelę tapo įmanoma pastebėti ar įtarti dar keliose reakcijose. Viena svarbesnių iš tų reakcijų yra vektorinių bozonų sintezė (vector-boson fusion, VBF), kurios metu sukuriamas Higgs bozonas. Kita vertus, kone pati svarbiausia reakcija, Higgs bozono sąveika su top kvarkais, liko vis dar nepastebėta nepaisant prasidėjusių precizinių tyrimų leptoniniuose skilimuose.

Tiesioginę reakciją tarp Higgs bozono ir top kvarko yra lengviausia stebėti ieškant  $t\bar{t}H$  procesų. Kita vertus, Standartinis Modelis numato, kad didžiausia dalis Higgs bozonų yra sukuriama (LHC eksperimentuose) jungiantis dviems gluonams. Dviejų gluonų jungimasis (gluongluon fusion, ggF) yra efektinė reakcija, kurios viduje dalyvauja top kvarkai — jie nėra stebimi, nes yra vidinės kilpos dalis.  $t\bar{t}H$  aptikimas leistų tiesioginius top–Higgs sąveikos tyrimus, kurie, kol kas, yra tiktai teorinio pobūdžio. Tiesioginis top-Higgs sąveikos tyrimas padės eksperimentiškai pagrįsti ggF procesus, palyginti su teoriniais modeliais — čia gali slypėti nauja fizika (Beyond Standard Model, BSM). Kadangi ggF į Higgs yra efektinis mazgas, jame gali dalyvauti dar neatrastos dalelės, kur Standartinio Modelio atveju ten dominuoja top kvarkai (99,8%). Galima tvirtai teigti, kad top-Higgs saveikos nustatymas yra vienas kertinių Higgs fizikos elementų. Apibendrinti LHC Run 1 sąveikų stiprių rezultatai yra pateikti 1-ame pav.







1 pav. Išmatuoti H pagaminimo būdų stipriai su visais 7+8 TeV duomenimis, žiūrėti [1].

tīH tyrimai yra skirstomi į keletą pagrindinių kategorijų pagal teoriškai laukiamus Higgs skilimus (H  $\rightarrow$ ): bb,  $\gamma\gamma$ , multileptoniniai,  $\tau\bar{\tau}$  ir kitus, kurie šiuo metu nenagrinėjami. Pagal tīt sistemą tyrimai toliau fragmentuojami į subkategorijas: pilnai hadroniniai, pusiau leptoniniai (hadroninai), leptoniniai, t.y., tīt  $\rightarrow$  bjj' bj''j''', bjj' b $\ell\nu$ , b $\ell^-\nu$  b $\ell^+\nu'$ . Kiekviena kategorija turi gana savitą tyrimo strategiją, tačiau tarp jų yra keletas svarbių bendrų bruožų: labai svarbus b ženklinimas, bent dvi čiurkšlės, daugelio kūnų galutinė būsena, multivariacinė analizė bei vieninga statistinė analizė/kombinacija. Preliminarūs tyrimų rezultatai gali būti apibendrinti 2-ame pav.

Nors rezultatai nėra baigtiniai ar rodantys atradimą,  $t\bar{t}H$  atradimas tikriausiai pasirodys netolimoje ateityje. 2017 metais LHC padvigubins surinktų duomenų kiekį su 13 TeV energija. Taigi, gal netrukus bus galima žengti į dar įdomesnę precizinių  $t\bar{t}X$  tyrimų erą.

Reikšminiai žodžiai: CMS, LHC, ttH, top kvarkas, Higgs bozonas, efektinė sąveika, multivariacinė analizė

- G. Aad *et al.* [ATLAS and CMS Collaborations], JHEP **1608**, 045 (2016) doi:10.1007/JHEP08(2016)045 [arXiv:1606.02266 [hepex]].
- [2] ATLAS Collaboration, ATLAS-CONF-2016-068.
- [3] CMS Collaboration, CMS-PAS-HIG-16-038.
- [4] CMS Collaboration, CMS-PAS-HIG-16-020.
- [5] CMS Collaboration, arXiv:1706.09936 [hep-ex].
- [6] CMS Collaboration, CMS-PAS-HIG-17-004.

# Žodinė sesija 1A

Teorinė ir skaičiuojamoji fizika

#### Supertakumas ir sukinio supertakumas spinorinėse Bozė dujose

#### Superfluidity and spin superfluidity in spinor Bose gases

Jogundas Armaitis<sup>1</sup>, Rembert Duine<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio Ave. 3, LT-10222 Vilnius, Lithuania <sup>2</sup>Institute for Theoretical Physics and Center for Extreme Matter and Emergent Phenomena, Utrecht University,

Princetonplein 5, 3584 CC Utrecht, The Netherlands

<sup>3</sup> Department of Applied Physics, Eindhoven University of Technology, P.O. Box 513, 5600 MB Eindhoven, The

Netherlands

jogundas.armaitis@tfai.vu.lt



Fig. 1. By counterflowing, a supercurrent and a spin supercurrent create a stationary state with no mass flow in a spinor Bose gas on a ring. In a uniform-density system, the supercurrent  $v_{scalar}$  is due to the global phase texture of the atomic condensate (indicated by color online), whereas the spin supercurrent  $v_{spin}$  is due to the in-plane magnetization texture (indicated by arrows which can be recast in terms of a phase  $\theta$ ) of the magnon condensate with a measure of the condensate fraction  $\eta$ . The two textures can be independently engineered in a ferromagnetic spinor Bose gas.

We show that spinor Bose gases subject to a quadratic Zeeman effect exhibit coexisting superfluidity and spin superfluidity, and study the interplay between these two distinct types of superfluidity. To illustrate that the basic principles governing these two types of superfluidity are the same, we describe the magnetization and particledensity dynamics in a single hydrodynamic framework. In this description spin and mass supercurrents are driven by their respective chemical potential gradients. As an application, we propose an experimentally accessible stationary state, where the two types of supercurrents counterflow and cancel each other, thus resulting in no mass transport. Furthermore, we propose a straightforward setup to probe spin superfluidity by measuring the in-plane magnetization angle of the whole cloud of atoms. We verify the robustness of these findings by evaluating the four-magnon collision time, and find that the time scale for coherent (superfluid) dynamics is separated from that of the slower incoherent dynamics by one order of magnitude. Comparing the atom and magnon kinetics reveals that while the former can be hydrodynamic, the latter is typically collisionless under most experimental conditions. This implies that, while our zero-temperature hydrodynamic equations are a valid description of spin transport in Bose gases, a hydrodynamic description that treats both mass and spin transport at finite temperatures may not be readily feasible.

Reikšminiai žodžiai: superfluid, spin superfluid, ultracold atomic gas

#### Literatūra

[1] J. Armaitis and R. A. Duine, Phys. Rev. A 95, 053607 (2017).

#### Netiesinė kvantinė optika sukininei lėtai šviesai

#### Nonlinear quantum optics for spinor slow light

Julius Ruseckas<sup>1</sup>, Gediminas Juzeliūnas<sup>1</sup>, Ite A. Yu<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva

<sup>2</sup>Department of Physics and Frontier Research Center on Fundamental and Applied Sciences of Matters, National Tsing

Hua University, 30013 Hsinchu, Taiwan

julius.ruseckas@tfai.vu.lt

Atomai, sužadinti į aukštai esančias Rydbergo būsenas turinčias pagrindinį kvantinį skaičių didesnį negu 50, pastaruoju metu susilaukė didelio dėmesio [1]. Kadangi van der Waals'o sąveika tarp atomų didėja didėjant pagrindiniam kvantiniam skaičiui n kaip  $n^{11}$ , sąveika tarp Rydbergo atomų yra daug eilių stipresnė negu sąveika tarp atomų esančių pagrindinėje būsenoje. Viena iš stiprios sąveikos tarp Rydbergo atomų pasekmių yra Rydbergo blokados efektas, kai dėl stiprios sąveikos negalima tuo pačiu metu sužadinti greta esančių atomų. Stipri sąveika tarp Rydbergo atomų taip pat leidžia tirti netiesinės kvantinės optikos efektus pavienių šviesos kvantų lygyje. To pasiekiama koherentiškai susiejant lėtai sklindančius fotonus ir stipriai sąveikaujančias Rydbergo būsenas esant elektromagnetiškai indukuoto praskaidrėjimo sąlygoms [2].

Dažniausiai Rydbergo elektromagnetiškai indukuoto praskaidrėjimo eksperimentuose yra naudojama kopėčių tipo atomo ir šviesos sąveikos konfigūracija. Tokia konfigūracija yra sudaryta iš atomo pagrindinės būsenos, tarpinės sužadintos būsenos bei Rydbergo būsenos. Šiame pranešime mes siūlome Rydbergo elektromagnetiškai indukuotam praskaidrėjimui panaudoti sudėtingesnę dvigubo tripodo atomo ir šviesos sąveikos schemą, parodytą 1 pav. Dvigubo tripodo atomo ir šviesos saveikos schemoje du zonduojantys lazerių laukai sklinda atomų terpėje, sukurdami dvikomponentę (sukininę) lėtą šviesą. Dvikomponentės lėtos šviesos sklidimas neseniai buvo eksperimentiškai pademonstruotas naudojant nesąveikaujančius atomus [3]. Dvigubo tripodo atomų ir šviesos sąveikos schema leidžia sukurti efektinę sukinio ir orbitos sąveiką sukininei lėtai šviesai.

Palyginus su ligi šiol naudotomis kvantinės netiesinės optikos schemomis su Rydbergo atomais, dvigubo tripodo schema pasižymi tiek sukinio ir orbitos sąveika sukininei lėtai šviesai tiek efektine sąveika tarp fotonų. Kopėčių tipo atomų ir šviesos sąveikos konfigūracijoje efektinė sąveika tarp zonduojančio lauko fotonų yra visada pritraukianti, nepriklausomai nuo jų vienfotoninio išderinimo [4]. Tuo tarpu mūsų siūlomoje dvigubo tripodo schemoje sąveika gali tapti atstumianti jei dviejų zonduojančių laukų vienfotoniniai išderinimai  $\Delta_1$  ir  $\Delta_2$  turi priešingus ženklus.



1 pav. Dvigubo tripodo atomo ir šviesos sąveikos schema turinti Rydbergo lygmenis *s*<sub>1</sub> ir *s*<sub>2</sub>.

Reikšminiai žodžiai: Rydbergo atomai, elektromagnetiškai indukuotas praskaidrėjimas, lėta šviesa

- [1] M. Saffman et al., Rev. Mod. Phys. 82, 2313 (2010).
- [2] D. Petrosyan et al., Phys. Rev. Lett. 107, 213601 (2011).
- [3] M.-J. Lee et al., Nat. Commun. 5, 5542 (2014).
- [4] O. Firstenberg et al., Nature 502, 71 (2013).
### Trupmeninio krūvio sužadinimai ribotų matmenų gardelėje

# Charge fractionalization in small fractional-Hall samples

Mantas Račiūnas<sup>1</sup>, Nur Ünal<sup>2</sup>, Egidijus Anisimovas<sup>1</sup>, André Eckardt<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Nöthnitzer Straße 38, D-01187 Dresden, Germany

mantas.raciunas@gmail.com

The discovery of fractional quantum Hall effect (FQHE) in 2D electron gas gave rise to immense interest in topological phases of matter [1]. One of the most intriguing features of FQHE state is fractionally charged excitations which embody anyonic statistics. Even though the FQHE was first observed in GaAs-GaAlAs heterojunctions, experiments in optical lattices [2] allow much more controllable study of many-body systems, therefore allowing regimes that are impossible to realise in semiconductor based experiments. Historically, FQHE comes from the field of condensed matter systems, which can be characterized by a macroscopically large number of particles, and as a consequence, numerical studies were focused only on infinite or periodical Hamiltonians in order to circumvent the limits of classical computers. Therefore, finite size systems remain mostly untouched. One can raise important questions, such as: can FQHE states be realised in minuscule lattices, containing only several sites in diameter? What additional effects would open boundary conditions introduce? What filling factor needs to be set in order to observe FQHE states? In this work we try to tackle all of these questions by numerically solving the Harper-Hofstadter Hamiltonian in the presence of bosonic onsite interactions:

$$H = \sum_{n,m} (e^{im\pi/2} a^{\dagger}_{m,n+1} a_{m,n} + a^{\dagger}_{m+1,n} a_{m,n} + h.c.) + \frac{U}{2} \sum_{j} \hat{n_{j}} (\hat{n_{j}} - 1) + \sum_{i} V_{j} \hat{n_{j}}.$$
(1)

The first and the second terms in this equation represent the kinetic energy and interactions between bosons respectively. The last term represents a potential relief, which was used as a main probe to look for charge fractionalization. It is worth noting, that in this system charge is defined as a particle number  $n_j$  on every lattice site. The idea is to introduce localised potential defects in the form of hills or valleys and by varying their depth we expect to observe elementary excitations forming around them.



Fig 1. Charge fractionalization in  $9 \times 6$  square lattice. Lattice used in simulations is depicted on the left panel. On the right plot – integrated densities  $\langle n_j \rangle$  for lattice sites belonging to different shaded areas in the left panel with corresponding color. Lattice potential is set to 0 for

all lattice sites, except those, marked with red  $(V_j = +V/4)$  or blue  $(V_j = -V/4)$  dots. When strength of introduced potential defects are small we see, that the sample shows almost no reaction to it as is expected from fluid-like state, however, around V = 1.5 there is a very steep jump (drop) in the densities around defects, indicating localisation of some charge, which reflects the formation of fractionally charged excitations with charge 1/2.

Indeed, by using this simple method we were able to observe localisation of fractional charge in several lattices with artificial magnetic flux. Various magnetic flux values, particle concentrations and geometries were evaluated. It would also be interesting to observe fractional statistics, however, proximity of the edges makes a direct observation difficult.

Keywords: Fractional quantum Hall effect, Bose-Hubbard model, optical lattice, fractional charge, Hofstadter-Harper Hamiltonian

### References

- E. J. Bergholtz, Z. Liu, Topological flat band models and fractional Chern insulators, Int. J. Mod. Phys. B 27(24), 1330017 (2013).
- [2] I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger, Many-body physics with ultracold gases, Rev. Mod. Phys. 80, 885 (2008).

# Dvigubų sužadinimų spektrinių linijų formos dvimatėje elektroninėje spektroskopijoje

# Spectral line shapes of double excitations in two-dimensional electronic spectroscopy

Olga Rancova<sup>1</sup>, Darius Abramavičius<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius

olga.rancova@ff.vu.lt

Šiuolaikinė netiesinė spektroskopija leidžia tirti skirtingų trukmių koherentinę ir nekoherentinę sužadinimo evoliuciją molekuliniuose agregatuose. Dvimatėje elektroninėje spektroskopijoje (2DES) sistemos žadinimai ir zondavimai kontroliuojamos fazių konfigūracijos trumpais lazerio impulsais įgalina sekti nepusiausvyrą dinamiką, atsispindinčią sudėtinguose spektrinių smailių formų ir intensyvumų pokyčiuose, pradedant femtosekundėmis ir tęsiant iki nanosekundžių [1]. Fotosintetiniuose pigmentų ir baltymų kompleksuose 2DES stebėti spektrinių smailių mušimai atkreipė ypatingą dėmesį į kompleksus sudarančių molekulių branduolių dinamiką ir jos sąveiką su elektroniniais sužadinimais [2].

Teorinėje spektroskopijoje sistemos optinių sužadinimų sąveiką su virpesiniais laisvės laipsniais įprasta aprašyti spektrinio tankio funkcija. Ypač žemoje temperatūroje (iki 10K), kai virpesiniai laisvės laipsniai aktyvuojami tik kartu su optiniais sužadinimais, spektrinį tankį galima tiesiogiai matyti spektrinių linijų formose gautose aukštos raiškos selektyvinės spektroskopijos metodais, pvz., spektrinių skylių deginimo (HB) eksperimentuose [3]. Tiek 2DES, tiek HB matuojamas signalas atsiranda dėl sistemos netiesinio trečios eilės atsako į optinius sužadinimus, o jų rezultatus galima susieti tarpusavyje [4].

Trečios eilės atsaką sukelia viengubi ir dvigubi sistemos sužadinimai. Modeliuojant, dvigubus sužadinimus įprasta aprašyti viengubų sužadinimų parametrų kombinacijomis. Šiame darbe parodoma, kad tam tikrais atvejais toks aprašymas yra nepakankamas. Viena iš tokių sistemų - tai fotosintetinis bakterinis reakcinis centras (bRC). Jame po bakteriochlorofilų specialios poros sužadinimo įvyksta krūvio atskirimas ir pernaša, kurios metu molekuliniame komplekse susidaro atskirtų krūvių (CT) būsenos. Nors šios CT būsenos yra tamsinės, jos pasižymi dideliais statiniais dipoliniais momentai, kurie ženkliai įtakoja bRC dvigubų sužadinimų charakteristikas.

Šiame darbe parodoma, kaip dvigubuose sužadinimuose su CT būsenomis pakinta spektrinių linijų padėtys ir formos. Šiam efektui įskaityti molekulinio komplekso teorinis aprašymas praplėčiamas į Frenkelio eksitonų hamiltonianą įtraukiant sistemos ir aplinkos sąveikos narį su pataisa dvigubiems sužadinimams:

$$\hat{H}_{SB} = \sum_{\alpha} (\sum_{m} d_{\alpha,m} \hat{B}_{m}^{\dagger} \hat{B}_{m} + \frac{1}{2} \sum_{mn} \Delta_{\alpha,mn} \hat{B}_{m}^{\dagger} \hat{B}_{n}^{\dagger} \hat{B}_{m} \hat{B}_{n}) (\hat{b}_{\alpha}^{\dagger} + \hat{b}_{\alpha}), \qquad (1)$$

čia  $\hat{B}_m^{\dagger}$  ir  $\hat{B}_m$  yra sužadinimo mazge *m*, o  $\hat{b}_{\alpha}^{\dagger}$  ir  $\hat{b}_{\alpha}$  aplinkos harmoninių virpesių sukūrimo ir sunaikinimo operatoriai,  $d_{\alpha,m}$  yra sąveikos tarp elektroninių sužadinimų

ir aplinkos virpesių parametras, o  $\Delta_{\alpha,mn}$  yra šios sąveikos pataisa dvigubiems sužadinimams. Dėl pastarosios pataisos sužadintos sistemos relaksaciją ir spektrinių linijų formas aprašančiose funkcijose atsiranda viengubų ir dvigubų sužadinimų fliuktuacijų koreliacijos keičia 2DES sužadintos būsenos sugerties linijų formas, kas atitinka HB skirtuminio spektro sugerties su įjungtu žadinančiu lazeriu komponentę. Tokiu būdu suskaičiuoto bRC komplekso 2DES spektro linijų formos palygintos su eksperimentiniais HB spektrais (1 pav.). Geras sutapimas tarp suskaičiuoto 2DES spektro vertikalaus pjūvio ir eksperimentinio HB spektro gautas derinant dvigubų sužadinimų su CT būsenomis fliuktuacijų koreliacijų parametrus.



1 pav. A: Suskaičiuotas bRC pilnas 2DES spektras T=5K. Žalia linija žymi vertikalų spektro pjūvį ties žadinimo dažniu  $\omega_1$ . B: Spektro A pjūvis (žalias) palygintas su eksperimentiniu HB spektru (raudonas).

Reikšminiai žodžiai: sistemos ir termostato sąveika, trečios eilės atsako funkcija

- D. Abramavicius, B. Palmieri, D. V. Voronine, F. Šanda, S. Mukamel, Chem. Rev. 109, 2350 (2009).
- [2] D. Abramavicius, L. Valkunas, Photosynth. Res. 127, 33 (2016).
- [3] R. Jankowiak, M. Reppert, V. Zazubovich, J. Pieper, T. Reinot, Chem. Rev. 111, 4546 (2011).
- [4] O. Rancova, R. Jankowiak, D. Abramavicius, J. Chem. Phys. 142, 212428 (2015).

# Žodinė sesija 1B

Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos

# Neigiamos gigantiškos pjezovaržos efektas deimanto tipo anglies dangose

# Giant negative piezoresistance effect in diamond like carbon films

<u>Šarūnas Meškinis</u>, Andrius Vasiliauskas, Sigitas Tamulevičius, Rimantas Gudaitis Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas sarunas.meskinis@ktu.lt

Pjezovaržinis efektas naudojamas daugumoje šiuo metu gaminamų slėgio bei įtempių jutiklių ir didelio pagreičio akselerometrų. Šiuo metu didėja jutiklių, gebančių registruoti itin mažus pokyčius bei veikti agresyviose aplinkose poreikis. Metalo plėvelės ir Si netenkina tokiems jutikliams keliamų reikalavimų. SiC ir polikristalinis deimantas - galima alternatyva. Tačiau jie auginimami aukštose temperatūrose. Šių medžiagų temperatūrinis varžos koeficientas (TVK) yra didelis. Čia perspektyvi medžiaga yra deimanto tipo anglis amorfinė medžiaga susidedanti iš sp<sup>2</sup> tipo (grafito tipo) anglies klasterių įterptų į sp<sup>3</sup> tipo (deimanto tipo) anglies matricą - pasižyminti geru mechaninių ir elektrinių savybių deriniu, cheminiu inertiškumu, biosuderinamumu. Deimanto tipo anglies dangų (DTAD) pjezovaržinis keitimo faktorius (KF) didesnis nei Si, SiC, deimanto. DTAD savybes galima papildomai valdyti auginimo metu į amorfinės anglies matricą įterpiant metalų nanoklasterius ir taip suformuojant nulinio TVK dangas. Neseniai mūsų buvo parodyta, kai kurių deimanto tipo anglies dangų pjezovaržinis keitimo faktorius (santykinio varžos pokyčio ir santykinio plėvelės matmenų pokyčio) santykis gali daugiau nei per eilę viršyti silicio pjezovaržinį keitimo faktorių. Kitaip tariant stebimas taip vadinamas gigantiškosios pjezovaržos reiškinys.

Šiame darbe hidrogenizuotos deimanto tipo anglies dangos ir hidrogenizuotos deimanto anglies bei nikelio nanokompozitų (DTAD:Ni) plėvelės užaugintos Ni taikinio reaktyviojo magnetroninio dulkinimo būdu. Auginimui naudotas didelės galios impulsinis magnetroninis dulkinimas. Palyginimui kai kurios plėvelės užaugintos nuolatinės srovės magnetroninio dulkinimo būdu. DTAD ir DTAD:Ni struktūra bei sudėtis tirti Raman'o sklaidos spektroskopijos, Rentgeno fotoelektronu spektroskopijos ir Rentgeno spinduliu energijos dispersijos spektrometrijos būdais. Bandinių pjezovaržinės savybės tirtos keturių taškų lenkimo būdu.

Darbe išnagrinėta DTAD ir DTAD:Ni struktūros bei cheminės sudėties įtaka plėvelių pjezovaržinėms savybėms. DTAD, kaip ir daugumos kitų medžiagų, varža jas tempiant paprastai didėja. DTAD teigiamas pjezovaržinis keitimo faktorius gali siekti iki 100. Šiame darbe, kai kuriuose DTAD ir DTAD:Ni bandiniuose stebėtas labai didelis varžos sumažėjimas, bandinius veikiant tempiamiesiems įtempiams (1 pav.). Šių bandinių keitimo faktoriaus vertės siekė -3200. Neigiamos gigantiškosios pjezovaržos reiškinys buvo paaiškintas galimu dviejų fizikinių mechanizmų deriniu. Pirmasis jų - tai sp<sup>2</sup> tipo ryšiais susijungusios anglies nanoklasterių telkinių susidarymas. Antrasis – sričių su sumažintu vandenilio kiekiu susidarymas. Kitaip tariant, dangose susidaro padidinto elektrinio laidumo (sumažėjusios varžos) sritys. Veikiant tempiamiesiems įtempiams, šios padidinto elektrinio laidumo sritys persirikiuoja bei jungiasi tarpusavyje. Taip susidaro padidinto elektrinio laidumo kanalai. Tuo tarpu pagrindinis srovės pernešimo mechanizmas tarp atskirų sp<sup>2</sup> tipo ryšiais susijungusios anglies nanoklasterių yra elektronų šokavimas ir/arba tuneliavimas.



1 pav. DTAD:Ni plėvelės varžos priklausomybė nuo deformuojančios jėgos (a) ir varžos priklausomybės nuo laiko grafikas didinat bei vėliau mažinant bandinį deformuojančią jėgą (išmatuotas bandinio keitimo faktorius buvo -1028).

Reikšminiai žodžiai: gigantiškoji neigiama pjezovarža, deimanto tipo anglis, reaktyvusis magnetroninis dulkinimas.

# Fazinių virsmų kietųjų oksidų joniniuose laidininkuose tyrimai superplačiajuostės pilnutinės varžos spektroskopijos metodu

# Investigation of phase transitions in the osolid oxide ionic conductors by methods of ultra-broadband impedance spectroscopy

Algimantas Kežionis<sup>1</sup>, Edvardas Kazakevičius<sup>1</sup>, Dalius Petrulionis<sup>1</sup>, Saulius Kazlauskas<sup>1</sup>, Artūras Žalga<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius,

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Chemijos fakultetas Naugarduko 24, LT-03225 Vilnius

algimantas.kezionis@ff.vu.lt

Kietieji oksidiniai deguonies laidininkai yra plačiai taikomi įvairiuose elektrocheminiuose įrenginiuose. Šio tipo kietieji elektrolitai įgauna žymų laidumą tik pakankamai aukštose temperatūrose, todėl dažniausiai vra taikomi aukštatemperatūriuose įtaisuose. Kaip taisyklė, oksidiniai kietieji elektrolitai turi fazinius virsmus (FV), kurie riboja tokių medžiagų praktinį pritaikymą. FV tyrimai gali padėti surasti junginių būdus, igalinančius modifikavimo išvengti šiu nepageidautinų fazinių virsmų. Šiame darbe FV buvo didelio laidumo kietuosiuose tirti oksidiniuose joniniuose laidininkuose - Sc<sub>2</sub>O<sub>3</sub> stabilizuotame Zr<sub>2</sub>O, bei gryname ir įvairiais priedais legiruotame lantano molibdate La<sub>2</sub>Mo<sub>2</sub>O<sub>9</sub> (LMO).

FV buvo stebimi naudojant du inovatyvius tyrimo ir rezultatų apdorojimo metodus, tai:

- Superplačiajuostė aukštatemperatūrė pilnutinės varžos spektroskopija;
- Pilnutinės varžos modeliavimas panaudojant krūvininkų relaksacijos trukmių pasiskirstymo (RTP) funkciją.

RTP funkcija buvo randama skaitmeniškai sprendžiant integralinę lygtį [1]:

$$\frac{\tilde{z}(\omega)}{z_{\rm b}} = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\tau) \cdot \frac{1 - i\omega\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} d\lg(\tau).$$
(1)

Čia:  $f(\tau)$  ieškomoji RTP funkcija,  $\tilde{z}(\omega)$  - bandinio savitoji pilnutinė varža dažnyje  $\omega$ ,  $z_h$  – bandinio žemadažnė varža,  $\tau$  – relaksacijos trukmė, *i* – menamasis vienetas. Lygtis (1) yra vadinamasis nekorektiškasis uždavinys, kuris sprendžiamas uždedant papildomas (vadinamas reguliarizavimu) salygas. Tik labai tikslūs plačiajuosčiai  $\tilde{z}(\omega)$  matavimų duomenys leidžia surasti patikima RTP funkcijos pavidalą. buvo naudotas superplačiajuostis Eksperimentui aukštatemperatūris pilnutinės varžos spektrometras [2], kurio darbiniai dažnių ir temperatūrų intervalai yra atitinkamai 0,1 Hz-10 GHz ir 20-1000 °C. Šiuo spektrometru galima išmatuoti  $\tilde{z}(\omega)$  visame nurodytame dažnių ir temperatūrų intervale atliekant tik eksperimentą. Taip išvengiama duomenų, viena išmatuotų skirtingais matavimo stendais ir atliekant kelis temperatūrinius ciklus, sujungimo. O tai dėl sunkiai kontroliuojamu papildomu paklaidu labai pablogintų (1) lygties sprendinio kokybę.

Pasirodo, naudojant RTP funkciją, galima stebėti atskirų fazių varžos indėlį daugiafazėje sistemoje, kai tų fazių krūvininkų relaksacijos trukmės skiriasi visiškai nedaug. Tai leidžia taikyti impedanso spektroskopijos metodus stebėti fazių pusiausvyros dinamika laidžiose sitemose FV metu. Atitinkamas pavyzdys pateiktas 1 pav. [3], kur parodyti skirtingų La2Mo2O9 fazių indėliai į bendrą bandinio varžą struktūrinio  $\alpha \leftrightarrow \beta$ -La<sub>2</sub>Mo<sub>2</sub>O<sub>9</sub> fazinio virsmo aplinkoje, esant mažam (0,3 K/min.) temperatūros kitimo greičiui. Taip pat buvo stebėtas temperatūros kitimo greičio bei priemaišu poveikis faziu varžu indėlių temperatūrinei priklausomybei FV aplinkoje.



1 pav. α-, β-, γ- fazių varžų procentiniai indėliai ( $p_{\alpha}$ ,  $p_{\beta}$ ir  $p_{\gamma}$ ) α $\leftrightarrow$ β- La<sub>2</sub>Mo<sub>2</sub>O<sub>9</sub> fazinio virsmo aplinkoje.

Reikšminiai žodžiai: pilnutinės varžos spektroskopija, relaksacijos trukmių pasiskirstymo funkcija.

- S. Kazlauskas, A. Kezionis, T. Salkus, A.F. Orliukas, Solid State Ionics 231, 37 (2013).
- [2] A. Kežionis, S. Kazlauskas, D. Petrulionis, A.F. Orliukas, IEEE transactions on Microwave theory and Technique 62(10), 2456 (2014).
- [3] A. Kežionis, D. Petrulionis, E. Kazakevicius et al., Electrochimica Acta 213, 306 (2016).

# Eksitonų difuzija bifluoreno organiniuose kristaluose

# Exciton diffusion in bifluorene single crystals

Paulius Baronas<sup>1</sup>, Patrik Ščajev<sup>1</sup>, Vladislavas Čerkasovas<sup>1</sup>, Gediminas Kreiza<sup>1</sup>, Povilas Adomėnas<sup>1</sup>, Karolis Kazlauskas<sup>1</sup>, Jean-Charles Ribierre<sup>2</sup>, Chihaya Adachi<sup>2</sup> and Saulius Juršėnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institute of Applied Research, Vilnius University, Saulėtekio 3, LT-10222 Vilnius, Lithuania
<sup>2</sup> Center for Organic Photonics and Electronics Research (OPERA), Kyushu University, Kyushu University, 744 Motooka, Nishi, Fukuoka 819-0395, Japan paulius.baronas@tmi.vu.lt

Organic solid state lasers are often associated with easy and low-cost fabrication, broad tunability of emission wavelength and other features competitive to their inorganic counterparts [1]. Nonetheless, challenges such as low charge carrier mobility and high amplified spontaneous emission (ASE) threshold have yet detained researchers from presenting any electrically driven laser action in organic materials. Recently, organic single crystal materials have been under intense investigation for applications in novel field effect transistor configurations allowing high current densities that are essential for lasing action [2]. Our recent contribution in this field included developing new bifluorene single crystals with record low ASE threshold reaching 700 W/cm2 (0.35 µJ/cm2) [3]. Nonetheless, investigation of other crucial parameters considering high density effects associated with laser operation are still needed.



Fig. 1. Top: Diffusion parameters as a function of excitation density obtained by the LITG and SSA methods. Bottom: Simplified bifluorene crystal structure with diffusion direction indicated.

One of the key parameters in organic materials is exciton diffusion, which influences high density effects such as exciton-exciton annihilation, degrading the device performance. In this work we have investigated exciton diffusion properties in bifluorene single crystals by two time resolved "pump-probe" methods: light induced transient grating (LITG) and singlet-singlet annihilation (SSA). The results shown on fig. 1 revealed highly anisotropic singlet exciton transport with diffusion length  $L_D$  reaching 100 nm in bifluorene single crystals, which is longer than for most organic crystals at room temperature. To our knowledge, the anomalous behavior of increasing exciton diffusion coefficient D at higher exciton densities has not been observed yet in organic single crystal materials.

Additional studies of exciton diffusion in similar organic single crystals of slightly modified bifluorene molecules allowed to estimate the interplay between diffusion mediated exciton annihilation processes and ASE properties as a function of molecular and crystal structure. Future studies will include measuring charge transport properties and employing knowledge about ASE threshold and diffusion constants for optimizing exciton interaction in an organic single-crystal light-emitting field-effect transistor device architecture.

Key words: Organic single crystal, exciton diffusion, light induced transient gratings, singlet-singlet annihilation

### Literature

- A. J. C. Kuehne, M. C. Gather, "Organic Lasers: Recent Developments on Materials, Device Geometries, and Fabrication Techniques" Chem. Rev. 116, 13823-12864 (2016).
- [2] S. Hotta, T. Yamao, S. Z. Bisri, T. Takenobu, Y. Iwasa, "Organic single-crystal light-emitting field-effect transistors", J. Mater. Chem. C 2, 965 (2014).
- [3] G. Kreiza, P. Baronas, E. Radiunas, P. Adomėnas, O. Adomėnienė, K. Kazlauskas, J. C. Ribierre, C. Adachi, S. Juršėnas, "Bifluorene single crystals with extremely low-threshold amplified spontaneous emission", Adv. Opt. Mater. (2017).

# Saulės elementų metilamonio švino halogenidų sugėriklių dielektrinis atsakas

# Dielectric Response of the Methylammonium Lead Halide Solar Cell Absorbers

I. Anusca<sup>1</sup>, S. Balčiūnas<sup>2</sup>, P. Gemeiner<sup>3</sup>, Š. Svirskas<sup>2</sup>, M. Sanlialp<sup>1</sup>, G. Lackner<sup>1</sup>, C. Fettkenhauer<sup>1</sup>, J. Belovickis<sup>2</sup>, V. Samulionis<sup>2</sup>, M. Ivanov<sup>2</sup>, B. Dkhil<sup>3</sup>, <u>J. Banys<sup>2</sup></u>, V. V. Shvartsman<sup>1</sup>, D. C. Lupascu<sup>1</sup>

<sup>1</sup>University of Duisburg-Essen

<sup>2</sup>Vilnius University

<sup>3</sup>CNRS-UMR8580 Université Paris-Saclay juras.banys@ff.vu.lt

Juras.Danys@11.vu.n

Hybrid organic–inorganic perovskites have recently attracted overwhelming attention due to their excellent photovoltaic performance yielding efficiencies well exceeding 20%. This has been related to properties such as long charge carrier lifetime, the exceptionally large diffusion length, large absorption coefficient, high carrier mobilities, large open-circuit voltages, and direct band gap. The organo-lead-trihalide perovskite compounds, CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbX<sub>3</sub>, are the forerunners in efficiency.

Among the most intriguing properties of MAPbI<sub>3</sub> are the high charge carrier life times (up to 3 ms) and the diffusion length of up to hundreds of micrometers in single crystals, which are much longer than those in high-purity crystalline organic semiconductors. One of the reasons is the fast dissociation of excitons into free charge carrier pairs. It was argued that the low exciton binding energy is due to the relatively large dielectric permittivity at room temperature. The excitonic binding becomes significant only below the tetragonal-toorthorhombic phase transition due to lowering of both dielectric permittivity and temperature. The long electron/hole diffusion length was attributed to rather weak trapping. Direct electron-hole recombination dominates over the indirect trap assisted decay regime associated with shallow levels of the defect states in the band gap.

The collective motion of the MA cations has been proposed to screen the electron-hole Coulomb potential and promote dissociation of excitons into free carriers, as well as to inhibit their recombination. It has further been suggested that the interaction between charge carriers and MA dipoles can result in the formation of polarons showing much reduced scattering by defects or phonons compared to free electrons or holes. Another mechanism is the interaction of defects with MA cations, which possess  $C_{3v}$  symmetry and their proper dipole moment. When the potential barrier for MA dipole rotation is smaller than the energy gain associated with the dipole trap interaction, the rearrangement of MA dipoles in the vicinity of defects will reduce the defect trapping cross section.

Although crucial information about ordering and dipolar dynamics of MAPbX<sub>3</sub> can be obtained from dielectric spectroscopy, if measured across broad frequency and temperature ranges, only limited data exist. Earlier performed dielectric measurements for only a few discrete frequencies in the gigahertz range.

Similarly, characterization of thin polycrystalline films at frequencies below 100 kHz revealed an increase of dielectric permittivity at the decreasing frequency related to ionic transport and charge separation at grain boundaries, It have been reported dielectric measurements in the optical range (above 400 THz), however the frequency range between 1 MHz and 100 GHz remains unexplored.

We address the key role of the dynamical nature of MA dipoles by combining large frequency range and temperature-dependent dielectric measurements with ultrasonic. To do that, organolead trihalide perovskite samples,  $CH_3NH_3PbX_3$  (X = Cl, Br, I), were synthesized in two steps according to the procedure reported by Im et al. with small modifications. The phase purity and crystalline structure of the samples were analyzed by powder XRD using a Bruker Siemens D5000 diffractometer operating in reflection mode with Cu K<sub>a</sub> radiation. Relatively large crystallites of CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> and CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbBr<sub>3</sub> were chosen. Since the crystallites of the chloride compositions were too small, they were pressed to pellets and sintered at 120 °C for 2 h. Opposite faces of the samples were electroded with cold curing silver paste (Ferro GmbH).

Dielectric measurements were performed between temperatures 100 and 300 K and frequencies  $10^2 - 10^{11}$  Hz. For frequencies from  $10^2$  to  $10^6$  Hz the complex impedance was measured using a HP 4284A precision LCR meter. For the higher frequency band  $(10^6 - 10^9$  Hz) the samples were placed at the end of a coaxial line. Reflection and phase were measured using an Agilent 8714ET vector network analyzer. For highest frequencies, dielectric rods were made and measured in the rectangular waveguide system, then reflection and transmission were measured using an Elmika scalar network analyser R2400. All measurements were performed at a rate of 1 K min<sup>-1</sup>.

We show that a sufficiently high dielectric constant exists across the entire frequency range allowing for efficient screening of charged entities, that is, carriers and defects. This is the fundamental effect facilitating the diffusion of photogenerated carriers.

# Žodinė sesija 2A

Cheminė fizika

## Spektroskopinės antrosios fotosistemos reakcijų centro savybės

# Spectroscopic properties of photosystem II reaction center

Andrius Gelžinis<sup>1,2</sup>, Darius Abramavičius<sup>1</sup>, Jennifer P. Ogilvie<sup>3</sup>, Leonas Valkūnas<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9-III, 10222 Vilnius <sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius <sup>3</sup>Department of Physics, University of Michigan, Ann Arbor, 48109, USA <u>andrius.gelzinis@ff.vu.lt</u>

Antroji fotosistema (PSII) yra vienintelis žinomas molekulinis biologinis kompleksas, gebantis suskaidyti vandenį, todėl ji yra ne tik žmonijai, bet ir kitiems gyviems organizmams reikalingo deguonies šaltinis. Jos reakcijų centre (RC) (žr. 1 pav.) vyksta pirminis krūvio atskyrimas [1]. Nepaisant daugelio tyrimų, dar nėra visuotinio sutarimo dėl krūvio atskyrimo kelių bei šiame procese dalyvaujančių būsenų.

Ankstesniuose darbuose buvo pristatytas PSIIRC stipriojo ryšio modelis [2]. Šiame pranešime aptariamas atnaujintas modelis, į kurį įtraukta viena krūvio pernašos (CT) būsena. Modelio parametrai (pigmentų energijos, netvarka, sąveikos su virpesiniais laisvės laipsniais stiprumas) buvo nustatyti derinant suskaičiuotus spektrus su eksperimentiniais rezultatais. Skaičiavimai atlikti panaudojant ctR teoriją [3]. Buvo gautas geras sutapimas tarp eksperimentinių ir sumodeliuotų spektrų.

Taip pat remiantis ctR teoriją buvo sumodeliuoti 77 K PSII RC Štarko spektroskopijos rezultatai. Skaičiavimų palyinimas su eksperimentiniais duomenimis pateiktas 2 pav. Modeliavimas buvo atliktas į modelį įtraukus arba  $Chl_{D1}^{+}Pheo_{D1}^{-}$  arba  $P_{D2}^{+}P_{D1}^{-}$  CT būseną, o jos parametrų vertės buvo gautos derinant suskaičiuotus ir eksperimentinius spektrus. Matyti, kad skaičiavimai su  $Chl_{D1}^+Pheo_{D1}^$ būsena duoda rezultatus artimesnius eksperimentiniams. Be to, skaičiavimai be jokių CT būsenų (mėlynos brūkšninės linijos 2 pav.) duoda kur kas blogesnius rezultatus nei skaičiavimai su bent viena CT būsena. Skaičiavimai su dviem CT būsenomis parodė, kad kai kurios spektro vietos geriau, o kai kurios – blogiau sutampa su eksperimentinais rezultatais.



1 pav. Pigmentų ir kitų kofaktorių išsidėstymas PSII RC.



2 pav. PSII RC Štarko spektroskopijos rezultatai esant 77 K temperatūrai. Juodi apskritimai žymi eksperimentinius duomenis (paimtus iš šaltinio ), raudona linija žymi skaičiavimus, kai į modelį įtraukta a)  $Chl_{D1}^+Pheo_{D1}^-$  CT būsena, b)  $P_{D2}^+P_{D1}^-$  CT būsena, c) abi CT būsenos.

Reikšminiai žodžiai: fotosintezė, antroji fotosistema, reakcijų centras, spektroskopija

- R. E. Blankenship, *Molecular Mechanisms of Photosynthesis*, 2nd edition (Wiley Blackwell, Chichester, 2014).
- [2] A. Gelzinis, L. Valkunas, F. D. Fuller, J. P. Ogilvie, S. Mukamel, D. Abramavicius, Tight-binding model of the photosystem II reaction center: application to two-dimensional electronic spectroscopy, New J. Phys. 15, 075013, 2013.
- [3] A. Gelzinis, D. Abramavicius, L. Valkunas, Absorption lineshapes of molecular aggregates revisited, J. Chem. Phys. 142, 154107, 2015.

# Karotenoidų vaidmuo dinamiškai reguliuojant šviesorankos kompleksų sužadinimą

# Role of carotenoids in dynamical regulation of excitation within light-harvesting complexes

Vytautas Balevičius jaun.<sup>1</sup>, Kieran F. Fox<sup>1</sup>, Benedetta Mennucci<sup>2</sup>, Christopher D. P. Duffy<sup>1</sup>

<sup>1</sup>School of Biological and Chemical Sciences, Queen Mary University of London, Mile End Road, E14NS London,

UK

<sup>2</sup>Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale, University of Pisa, Via Giuseppe Moruzzi 13 56126 Pisa, Italy <u>v.balevicius@qmul.ac.uk</u>

Fotosintetiniai šviesorankos kompleksai yra augalu, dumblių ir kai kurių bakterijų baltymai, koordinuojantys kelių rūšių pigmentus, iš kurių pagrindiniai yra chlorofilai ir karotenoidai. Chlorofilai yra atsakingi už šviesos sugertį, o karotenoidų pagrindinė funkcija yra fotoapsauga. Yra seniai žinoma, jog ksantofilai (karotenoidai, į kurių sudėtį įeina deguonis), tokie kaip luteinas, vaidina esminį vaidmenį neutralizuojant potencialiai pavojingą singletinį deguonį. Tačiau tik neseniai buvo suprasta, jog ksantofilai apsauginiame mechanizme pradeda veikti dar ankstesnėje stadijoje. Yra pademonstruota, jog didelio apšviestumo sąlygomis ksantofilai geba šalinti perteklinį sužadinimą tiesiogiai sąveikaudami su žemiausiomis chlorofilų singletinėmis būsenomis, taip išvengiant singletinio deguonies susidarymo [1].

Charakterizuoti rezonansinę pernašą iš chlorofilų į karotenoidus yra sudėtinga dėl žemiausios karotenoidų singletinės būsenos, S1, ypatybių: ji yra labai trumpai gyvuojanti ir turi nykstamą šuolio dipolinį momentą. Vis dėlto, rezonansinę saveika tarp šių pigmentų galima apskaičiuoti naudojant šuolio tankio kubų (angl. transition density cube) metodą [2]. Jį pritaikius chlorofilu ir pademonstravome, jog baltymuose artimiausių ksantofilų tarpusavio orientacija užtikrina mažiausią rezonansinę sąveiką. Iš esmės tai reiškia, kad evoliuciškai susiformavo struktūros užtikrinančios efektyvią šviesoranką, bet kartu turinčios galimybę dinamiškai reguliuoti sukauptą sužadinimą, įjungiant disipacijos kanalą per karotenoidų S1 būseną. Tik lieka atviras klausimas, kokiu būdu įvyksta persijungimas iš šviesorankos režimo į disipatyvų. Siekdami į jį atsakyti atlikome LHCII anteninio komplekso molekuliu dinamikos modeliavimą, pradine struktūra pasirinke kristalografiškai nustatytają.

Iš gautos trajektorijos buvo nustatytos ribos, kuriose kinta pigmentų tarpusavio atstumas ir orientacija. Šioje orientacijų ir padėčių fazinėje erdvėje apskaičiavome rezonansinę sąveiką. Paaiškėjo, jog yra du esminiai parametrai lemiantys sąveikos stiprį – tai kampai, kuriuos luteinas sudaro su chlorofilo zx ir yx plokštumomis. Naudodami šį sąveikos energijos paviršių apskaičiavome sužadinimo šuolio iš chlorofilo į luteiną spartas. Tuomet žinodami pigmentų gyvavimo trukmes ir taikydami supaprastintą baltymo modelį įvertinome bendrą komplekso sužadinimo gyvavimo trukme. Ši priklausomybė pavaizduota 1 paveiksle (4 ns atitinka chlorofilų sužadinimo gyvavimo trukmę). Matome, kad vos dešimties laipsnių abiejų kampų pokytis yra

pakankamas perjungti sistemą iš smarkiai disipatyvaus režimo (400 ps gyvavimo trukmė) į įprastai funkcionuojančios fotosintetinės membranos režimą (gyvavimo trukmė 2 ns). Baltais taškais pavaizduotos vieno iš dviejų luteinų polinkių vertės trajektorijoje: jos atitinka tarpinį režimą, o tokios gyvavimo trukmės yra būdingos šviesorankos baltymų kristalams. Tai reiškia, jog tirtoji modeliavimo trajektorija atitinka lokalų minimumą ne per daug nutolusį nuo pradinės kristalografinės struktūros.





Apibendrinant, nustatėme, jog didžiausią įtaką rezonansinei karotenoidų ir chlorofilų žemiausių būsenų sąveikai turi orientaciniai pokyčiai. Molekulių dinamikos modeliavimas patvirtino, kad būtent tokie pokyčiai yra dominuojantys baltyme patalpintame membranoje. Nustatyti konkrečius pokyčius sukeliančius persijungimą iš šviesorankos į disipatyvų režimą (ir atvirkščiai) prireiks tolimesnio molekulių dinamikos modeliavimo.

Reikšminiai žodžiai: fotosintezė, energijos pernaša, gyvavimo trukmė.

- [1] C. D. P. Duffy, A. V. Ruban, J. Photochem. Photobiol. B, 152, 215-226 (2015).
- [2] K.F. Fox, W.P. Bricker, C. Lo and C.D.P. Duffy, J. Phys. Chem. B, 119, 15550-15560 (2015).

### Temperatūros poveikis klampai jautriems fluoroforams

### **Temperature effect on viscosity-sensitive fluorophores**

Aurimas Vyšniauskas<sup>1,2</sup>, Marina K. Kuimova<sup>2</sup> <sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 102457 Vilnius <sup>2</sup>Chemistry Department, Imperial College London, London, UK <u>aurimas.vysniauskas@ftmc.lt</u>

Vienas patogiausių būdų matuoti klampai mikroskopinio dydžio objektuose (modelinėse membranose, aerozoliuose, gyvose ląstelėse) yra naudojantis klampai jautriais fluoroforais [1]. Įprastai jų fluorescencijos gyvavimo trukmė yra priklausoma nuo klampos ir tas leidžia juos taikyti naudojantis fluorescencijos gyvavimo trukmės vaizdinimo mikroskopija (FLIM), ko pasekoje yra gaunamas mikroskopinio objekto klampos "žemėlapis". Nepaisant metodikos potencialo, klampos šios sensorių fotofizikinės savybės ir jų jautrumas kitiems aplinkos parametrams (temperatūrai ar tirpiklio poliškumui) nėra pakankamai ištirtas, nors tai yra svarbu žinoti juos taikant.



1 pav. Klampai jautrių fluoroforų molekulinės struktūros. A) Porfirino dimero struktūra. B) Šiuo metu labiausiai taikomo klampos sensoriaus struktūra.

Šiame darbe buvo ištirtos dvi svarbios klampos sensorių klasės. Pirmoji yra porfirino dimerai (1 pav. A). Jie fluorescuoja raudonoje spektro srityje ir suteikia galimybę matuoti klampą iškart dviem metodais: per jų fluorescencijos gyvavimo trukmę ir per fluorescencijos spektro formos pokytį. Mes tyrėme fotofizikinių savybių skirtumus tarp keleto porfirino dimerų ir taip pat matavome kaip jų fluorescencijos savybės yra veikiamos temperatūros. Rezultatai parodė, kad porfirino dimerų savybės tarpusavyje smarkiai skiriasi: dalis jų nėra jautrūs temperatūrai ir gali būti naudojami kaip klampos sensoriai kintančios temperatūros aplinkoje, bet kita dalis porfirino dimerų yra ženkliai veikiami temperatūros ir gali būti naudojami ir klampos, ir temperatūros matavimu i vienu metu [2,3]. Šiuo metu tai yra vien intelė žinoma fluoroforų grupė, turinti tokias savybes.

Antroji tirta klampos sensorių grupė buvo boro dipiridino (BODIPY) struktūra paremti fluoroforai, įskaitant vieną iš šiuo metu labiausiai naudojamų fluorescuojančių klampos sensorių (1 pav. B) [4]. Mes tyrėme kaip modifikuojant šio fluoroforo molekulinę struktūrą keičiasi jo jautrumas klampai ir kaip BODIPY grupės fluoroforai yra veikiami temperatūros bei tirpiklio poliškumo. Rezultatai parodė, jog visos tirtos BODIPY grupės molekulės demonstravo sudėtingą priklausomybę ir nuo klampos, ir nuo temperatūros, ir nuo tirpiklio poliškumo [5]. Mums pavyko šią priklausomybę paaiškinti gana paprastu fotofizikiniu modeliu. Apibendrinant, šis darbas parodė, kodėl yra svarbu išsamiai tirti klampos sensorius skirtingos temperatūros ir tirpiklio poliškumo aplinkose prieš juos taikant klampos matavimams.

Tolimesniuose ateities planuose numatyta tolesni BODIPY klasės fluoroforų tyrimai, siekiant suprasti kaip fluoroforo struktūra turėtų būti modifikuota norint maksimaliai sustiprinti molekulės jautrumą klampai ar temperatūrai ir panaikinti jautrumą likusiems aplinkos parametrams.

Reikšminiai žodžiai: fotofizika, fluoroforai, laikinės skyros fluorescencija.

- M. K. Kuimova, Phys. Chem. Chem. Phys., 2012, 14, 12671– 12686.
- [2] A. Vyšniauskas, M. Qurashi, N. Gallop, M. Balaz, H. L. Anderson and M. K. Kuimova, *Chem. Sci.*, 2015, 6, 5773– 5778.
- [3] A. Vysniauskas, D. Ding, M. Qurashi, I. Boczarow, M. Balaz, H. L. Anderson and M. K. Kuimova, *Chem. - A Eur. J.*, 2017, 1– 11.
- [4] M. K. Kuimova, G. Yahioglu, J. A. Levitt and K. Suhling, J. Am. Chem. Soc., 2008, 130, 6672–6673.
- [5] A. Vysniauskas, I. Lopez-Duarte, N. Duchemin, T. T. Vu, Y. Wu, E. M. Budynina, Y. A. Volkova, E. Pena-Cabrera, D. E. Ramirez-Ornelas and M. K. Kuimova, 2017.

# Žodinė sesija 2B

Nanomokslas ir nanotechnologijos

# Trimačių stiklo-keramikos mikro- ir nanodarinių gamyba panaudojant tiesioginį lazerinį rašymą ir pirolizę

# Fabrication of Tri-dimensional Glass-Ceramic Micro- and Nanostructures using direct laser writing and pyrolysis

Darius Gailevičius<sup>1</sup>, Linas Jonušauskas<sup>1</sup>, Simas Šakirzanovas<sup>2</sup>, Roaldas Gadonas<sup>1</sup>, Kestutis Staliunas<sup>3,4</sup>

Vygantas Mizeikis<sup>5</sup>, Saulius Juodkazis<sup>6,7</sup>, Mangirdas Malinauskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laser Research Center, Department of Quantum Electronics, Vilnius University, Sauletekio Ave. 10, LT-10222, Vilnius <sup>2</sup>Department of Applied Chemistry, Vilnius University, Naugarduko Str. 24, LT-03225 Vilnius

<sup>3</sup>Departament de Física i Enginyeria Nuclear, Universitat Politècnica de Catalunya, Colom 11, 08222 Terrassa (Spain)
 <sup>4</sup>Institucio Catalana de Reserca i Estudis Avançats (ICREA), passeig Lluis Companys 23, 08010 Barcelona (Spain)
 <sup>5</sup>Research Institute of Electronics, Shizuoka University, 3-5-3-1 Johoku, Naka-ku, 432-8561 Hamamatsu (Japan)
 <sup>6</sup>Swinburne University of Technology, Victoria 3122, Hawthorn (Australia)

<sup>7</sup>Melbourne Center for Nanofabrication, Australian National Fabrication Facility, Victoria 3168, Hawthorn (Australia) darius.gailevicius@ff.stud.vu.lt

Ceramics play an important role in today's science and industry as it can withstand immense heat, mechanical and other hazards. Consequently, there is a need to find ever-new ways to acquire more sophisticated free-form 3D ceramic structures. Recently, stereolithographic 3D printing of hybrid organic-inorganic photopolymer and subsequent pyrolysis was demonstrated to be capable of providing true 3D ceramic structures [1]. However, such approach was limited to millimeter scale, while one of the aims in the field is to acquire functional 3D glass-like structures in micro- or even nano-dimensions, respectively.

In this paper, we explore a possibility to apply ultrafast 3D laser nanolithography [2] in conjunction with pyrolysis [3] to acquire ceramic 3D structures in micro- and nano-scale. Laser fabrication allows production of initial 3D structures with relatively small (hundreds nm) feature sizes out of hybrid organic-inorganic material SZ2080 [4]. Then, a post-fabrication heating at different temperatures up to 1000 °C in Ar andair atmospheres decomposes organic part of the material leaving only the glass-ceramic component of the hybrid. As we show, this can be done to 3D woodpiles [Fig 1] and bulk objects. We uncover that the shrinkage during sintering can reach up to 40%, while the aspect ratio of single features as well as filling ratio of the whole object remains the same. This hints at homogeneous reduction in size that can be easily accounted for and compensated before manufacturing. Finally, thermal gravimetric analysis (TGA) and Fourier transform infrared micro-spectroscopy measurements are performed in order to uncover undergoing chemical and physical phenomena during pyrolysis and composition of the remnant material.

The presented results suggest that the combination of 3D laser nanolithography and pyrolysis can be applied to great effect in creating glass-ceramic structures as well as downscaling their dimensions. This can be used in creation of highly resilient ceramic micronano-optical elements [5] or photonic lattices with ultra-fine internal periods and features [6].



Fig. 1 A woodpile made from SZ2080 that has beend concistently shrunk down through the use of pyrolysis.

*Reikšminiai žodžiai:direct laser writting, pyrolysis, SZ2080, polymer.* 

- [1] Z. C. Eckel, C. Zhou, J. H. Martin, A. J. Jacobsen, W. B. Carter, T. A. Schaedler, Additive manufacturing of polymer-derived ceramic, Science 351, 58-62 (2016).
- [2] M. Malinauskas, A. Žukauskas, S. Hasegawa et al., Ultrafast laser processing of materials: from science to industry, Light: Sci. Appl. 5, e16133 (2016).
- [3] L. Jonušauskas, D. Gailevičius, L. Mikoliūnaitė et al., Optically Clear and Resilient Free-Form μ-Optics 3D-Printed via Ultrafast Laser Lithography, Materials 10(1), 12 (2017).
- [4] A. Ovsianikov, J. Viertl, B. Chichkov et al., Ultra-low shrinkage hybrid photosensitive material for two-photon polymerization microfabrication, ACS Nano 2(11), 2257–2262 (2008).
- [5] X. Wang, A. A. Kuchmizhak, E. Brasselet, and S. Juodkazis, Appl. Phys. Lett. 110, 181101 (2017).
- [6] D. Gailevičius et al, in preparation (2017).

## 2D molibdeno disulfido lakštų auginimo CVD metodu iš metalinio Mo tyrimas

# Investigation of growth of 2D molibdenum dislufide sheets by CVD method using metallic Mo

Marius Treideris, Mantas Norkus, Mindaugas Kamarauskas, Audružis Mironas, Saulius Balakauskas, Virginijus

Bukauskas, Ieva Matulaitienė, Gediminas Niaura, Arūnas Šetkus

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

marius.treideris@ftmc.lt

Dvimačių (2D) medžiagų savybėmis pasižyminčių junginiu integravimas i daugiakomponenčius darinius leistų gauti savitų charakteristikų prietaisus. Tuo tikslu greta grafeno intensyviai siekiama sintetinti kitus junginius taip, kad jie atitiktų 2D medžiagų modelį ir būtų charakterizuojami panašiomis į grafeno savybėmis, kaip, pvz., molibdeno disulfidas (MoS<sub>2</sub>) [1]. Nors, skirtingai nuo grafeno, MoS2 egzistuoja draustinių energijų tarpas, tačiau šios medžiagos savybes lemia molekulinių plokštumų skaičius bei išsidėstymas ir, dėl to, išrandamos unikalios priemonės integruotų prietaisų formavimui [2]. Plečiantis tokių dvimačių medžiagų pritaikymo galimybėms, dažniausiai pademonstruojamoms mechaniškai nuo gamtinio kristalo nuskeltuose 2D lakštuose, sparčiai kyla poreikis tikslingai auginti tas medžiagas su iš anksto pasirenkamomis savybėmis. Šiuo metu intensyviai kuriamos technologijos, tinkančios užauginti priimtinai didelio ploto 2D MoS2 sluoksnius su nuspėjamomis charakteristikomis. Savo darbe demonstruojame savo originalios auginimo metodikos galimybes kryptingai pasirinkti sluoksnių su 2D molibdeno lakštais auginima ir tuo pakeisti sluoksnio savybes.

Šiame darbe sluoksniai su 2D MoS<sub>2</sub> buvo sintetinami cheminių garų nusodinimo (CVD) metodika, kai iš ultra-plono metalinio molibdeno (Mo) sluoksnio ant silicio padėklo aukštoje temperatūroje yra formuojamas MoS<sub>2</sub>. Sulfido formavimo sąlygos keičiamos, pasirenkant dujų mišinį, iš kurio nusodinama siera. Mo sluoksnių storis ir sintezės temperatūra buvo pagrindiniai parametrai, kuriais keičiamos MoS<sub>2</sub> sluoksnių savybės šiame darbe. Buvo tiriama MoS<sub>2</sub> sluoksnių morfologija, Ramano sklaidos spektrinės charakteristikos ir jų pasiskirstymo žemėlapiai.

Pasirenkamo storio metalinis Mo buvo užaugintas magnetroninio dulkinimo metodu, o CVD procesui naudota krosnis "Nabertherm, RS 120/1000/13S". Sluoksnių paviršius buvo skenuotas atominės jėgos mikroskopu "SPM-Dimension 3100". Ramano sklaidos spektrai išmatuoti spektrometru "Renishaw, inVia, (spinduliuotės:  $\lambda = 442$  nm,  $\lambda = 532$  nm,  $\lambda = 633$  nm).

600 °C užaugintuose bandiniuose, tyrimais buvo gautas ryšys tarp Ramano sklaidos spektrų ( $\lambda = 532$  nm) ir molekulinių MoS<sub>2</sub> sluoksnių skaičiaus ir įrodyta pradinio metalinio Mo sluoksnio storio įtaka MoS<sub>2</sub> sandarai, kurią nusako atstumas tarp charakteringųjų Ramano smailių padėčių (1 pav.).

Atstumas tarp charakteringų Ramano smailių padėčių kitų autorių publikuotais duomenimis yra tinkamas identifikuoti MoS<sub>2</sub> monosluoksnių skaičių.

Pasinaudoję empiriniu ryšiu, aprašėme MoS<sub>2</sub> monosluoksnių skaičiaus priklausomybę nuo mūsų darbe užgarinto Mo sluoksnio storio. Įrodėme, jog MoS<sub>2</sub> monosluoksnių skaičius buvo keičiamas nuo 1 iki 4.



1 pav. Skirtumo tarp charakteringų Ramano MoS<sub>2</sub> smailių E<sub>12</sub>g ir A<sub>1</sub>g padėčių priklausomybė nuo pradinio Mo storio

Naudojant kitas CVD sintezės temperatūras (850°C, 950°C) buvo nustatyta, kad MoS<sub>2</sub> sluoksnį sudarantys lakštai auga, o juos charakterizuojančių Ramano smailių padėčių skirtumas taip pat didėja.

Atlikti tyrimai parodė, kad naudojant MoS<sub>2</sub> sluoksnių formavimo iš Mo metalinio prekursoriaus metodiką keičiant technologinius parametrus (Mo sluoksnio storį, sulfido susidarymo temperatūrą) galima kontroliuoti suformuotų MoS<sub>2</sub> sluoksnių morfologiją bei juos sudarančių monosluoksnių skaičių.

Reikšminiai žodžiai: molibdeno disulfidas, 2D medžiagos, ploni sluoksniai

- [1] D. Lembke, S. Bertolazzi, and A. Kis, Acc. Chem. Res. 48(1), 100-110 (2015).
- [2] Z. Tu, G. Li, X. Ni, L. Meng, S. Bai, X. Chen, and Y. Qin, Appl. Phys. Lett., 109(22), 223101(2016).
- [3] H. Li, Q. Zhang, C. C. R. Yap, B. K. Tay, T. H. T. Edwin, A. Olivier, and D. Baillargeat, Adv. Funct. Mater. 22(7), 1385-1390 (2012).

# Au@SiO2 nanodalelių sintezė ir pritaikymas paviršiaus sustiprintos Ramano spektroskopijos tyrimuose

# Synthesis and application of Au@SiO2 nanoparticles in surface enhanced Raman spectroscopy

<u>Agnė Zdaniauskienė</u><sup>1,2</sup>, Tatjana Charkova<sup>2</sup>, Ieva Matulaitienė<sup>2</sup>, Gediminas Niaura<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius agneka999@gmail.com

Tradiciškai paviršiaus sustiprinta Ramano spektroskopija (PSRS) yra apribota Au, Ag ir Cu nanostruktūrinių paviršių tyrimais. Siekiant praplėsti metodo galimybes kitu metalu (Pt, Fe, Co, Pd, Ni ir kt.) ir paviršių tyrimuose, 2010 metais buvo pasiūlyta panaudoti Au ir Ag nanodaleles, apsaugotas plonu silicio oksido sluoksniu [1]. Tokių nanodalelių spektru branduolys atlieka Ramano stiprintuvo vaidmenį, o silicio oksido sluoksnis apsaugo jas nuo tarpusavio ir cheminės sąveikos su tiriamuoju paviršiumi. Taip pat dielektriko sluoksniu lengvai kontroliuojamas atstumas tarp Au branduolio ir tiriamojo paviršiaus. Tokios dalelės suteikia galimybę tirti biologines ar elektrochemines sistemas ant lygiu paviršių in-situ vandeninėje terpėje keičiant elektrodo potenciala. Šiame darbe buvo susintetintos naujo tipo Au nanodalelės su SiO<sub>2</sub> sluoksniu (Au@SiO<sub>2</sub>) (1 pav.) ir pritaikytos PSRS tyrimams su modeliniu junginiu tiofenoliu.



 pav. Principinė Au@SiO<sub>2</sub> nanodalių sintezės schema:
 (A) Au branduolio formavimas; (B) dielektrinio sluoksnio formavimas [adaptuota pagal [2]].

Yra žinoma, kad negalima užregistruoti savitvarkių monosluoksnių (SM) Ramano spektrų nuo lygių paviršių, nebent panaudojant tauriųjų metalų koloidus (nanodaleles). Deja, dauguma tokių dalelių yra nestabilios ir dažnai jų sudėtyje esančių medžiagų (chlorido ar citrato) jonų virpesinės juostos užgožia tiriamo junginio virpesines juostas. Taip pat naudojant įprastas nanodaleles nepavyksta išvengti cheminės sąveikos su tiriamuoju junginiu. Norėdami parodyti, kad naujo tipo Au@SiO<sub>2</sub> nanodalelės sustiprina Ramano spektrus, buvo suformuotas tiofenolio SM ant lygaus Au paviršiaus ir užregistruoti Ramano spektrai su ir be Au@SiO<sub>2</sub> nanodalelėmis (2 pav.). Ramano sklaidos spektrai registruoti *in situ* vandeninėje terpėje.



2 pav. Tiofenolio savitvarkio monosluoksnio, suformuoto ant lygaus aukso paviršiaus, Ramano sklaidos (a) ir PSRS (b) spektrai.

Naujo tipo Au@SiO<sub>2</sub> nanodalelės sustiprina tiofenolio SM, suformuoto ant lygaus Au paviršiaus, Ramano spektrus.

Reikšminiai žodžiai: Au nanodalelės, paviršiaus sustiprinta Ramano sklaida

- [1] J. F. Li, Y. F. Huang, Y. Ding, Z. L. Yang, S. B. Li, X. S. Zhou, F. R. Fan, W. Zhang, Z. Y. Zhou, D. Y. Wu, B. Ren, Z. L. Wang, and Z. Q. Tian, Nature 464, 392-395 (2010).
- [2] J. F. Li, X. D. Tian, S. B. Li, J. R Anema, Z. L. Yang, Y. Ding, Y. F. Wu, Y. M. Zeng, Q. Z. Chen, B. Ren, Z. L. Wang, and Z. Q. Tian, Nature Protocols 8, 52-65 (2013).

# Boro vakansijų ir boro vakansijų kompleksų heksagoniniame boro nitride optinės savybės

# Optical properties of boron vacancies and boron vacancy complexes in hexagonal boron nitride

<u>Mažena Mackoit</u><sup>1</sup>, Audrius Alkauskas<sup>1</sup>, Leigh Weston<sup>2</sup>, Darshana Wickramaratne<sup>2</sup>, Marcus W. Doherty<sup>3</sup>, Chris G. Van de Walle<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva

<sup>2</sup>Materials Department, University of California, Santa Barbara, California 93106-5050, USA

<sup>3</sup>Laser Physics Centre, Research School of Physics and Engineering, Australian National University, Canberra, Australian Capital Territory 0200, Australia

mazena.mackoit@ftmc.lt

Heksagoninis boro nitridas (h-BN) - sluoksniuota sp<sup>2</sup> hibridizacijos medžiaga. h-BN pasižymi puikiu cheminiu ir šiluminiu stabilumu, o dėl gardelės konstantos atitikimo su grafenu, ši medžiaga plačiai naudajama kaip padėklas dvimatei elektronikai. Neseniai parodyta, kad h-BN draustinis tarpas siekia ~ 6 eV [1]. Paskutiniai pasiekimai pavienių kristalų, mono- ir multisluoksnių auginimo technikose prisidėjo prie dar aktyvesnių šios medžiagos tyrimų kaip potencialaus kandidato elektronikos ir optoelektronikos taikymuose.

Paskutiniu metu mokslininkams pavyko stebėti pavienių fotonų emisiją (SPE) h-BN kambario sąlygomis. *Tran ir kt.* nustatė SPE iš spalvinių centrų h-BN emituojančių ties ~ 2 eV [2]. Kiti matavimai atskleidė platų spalvinių centrų befononinių linijų (ZPL) ir vibroninių savybių pasiskirstymą. Tokia fluorescencija (FL) stebėta žadinant su 532 nm ir su 405 nm ZPL diapazone nuo 1.6 eV iki 2.25 eV (560 – 775 nm) [3-5].

Šiame darbe buvo atlikti skaičiavimai paremti tankio funkcionalo teorija (DFT) boro vakansijoms ir boro vakansijų kompleksams su deguonimi heksagoniniame boro nitride. Parodyta, kad sąveika su deguonimi ženkliai sumažina boro vakansijos formavimosi energiją. Dėl to sistemoje, kurioje esama deguonies, labiau tikėtinas kompleksų susidarymas, negu paprastų boro vakansijų.

Ištirta, kad elektroninės defekto būsenos gali būti  $\sigma$ - arba  $\pi$ -tipų. Dėl to galime turėti skirtingas pagrindinės ir sužadintos būsenų konfigūracijas. Visų pirma, vidinė liuminescencija tarp defekto orbitalių gali būti poliarizuota tiek plokštumoje, tiek statmenai plokštumai. Taip pat šiame darbe pateikiami sužadinimo energijų ir su jomis susijusių Franck-Condon poslinkių įvertinimai, susiejant gautas vertes su naujausiais eksperimentiniais rezultatais. Gautos relaksacijos energijos yra didelės, nes įkrauto ir sužadinto komplekso geometrijos stipriai pakinta.

Įvertinti optiniai ZPL tokiuose defektuose vyktų giliai infraraudonoje srityje (1.6 - 1.35 eV), o jų relaksavimo energijos būtų didelės (0.35 – 1.2 eV), todėl jie negali paaiškinti stebimos  $E_{ZPL} \approx 2$  eV emisijos. Nors  $a_2b_1$  perėjimas atitiktų ZPL iš pavienių defektų kristaliniame *h*-BN  $E_{ZPL} \approx 1.6$  eV [5], jo sugertis turėtų

vykti gilioje UV srityje ~ 3.4 eV (kas panašu į [4]).

komplekso būsenose ir aproksimuotos jų FL ZPL vertės.						
V <sub>B</sub> -O <sub>N</sub> būsena	Optiniai perėjimai	$E_{\rm ZPL}$ , eV	λ, nm			
neutrali	$b_2a_1$	1.40	885			
	$b_2b_1$	3.09	400			
	$a_2a_1$	1.40	885			
įkrauta	$b_2b_1$	1.63	760			
	$a_2b_1$	1.63	760			
	$a_1b_1$	1.35	918			

1 lentelė. Galimi optiniai perėjimai skirtingose  $V_{\rm B}$ -O<sub>N</sub>



1 pav. Elektroninės įkrautų a)  $V_{\rm B}\text{-}O_{\rm N}\text{-}$  ir b)  $V_{\rm B}\text{-}$  defektų struktūros.

Reikšminiai žodžiai: pavienių fotonų šaltiniai, heksagoninis boro nitridas, taškiniai defektai, DFT

- [1] G. Cassabois, P. Valvin, B. Gil, Nat. Photonics, 10 262 (2016).
- [2] T. T. Tran, C. Elbadawi, D. Totonjian, et al., ACS Nano, 10 7331, (2016).
- [3] N. R. Jungwirth, B. Calderon, Y. Ji, et al., Nano Lett., 16 6052 (2016).
- [4] Z. Shotan, H. Jayakumar, C. R. Considine, et al., ACS Photonics, 3 12, (2016).
- [5] T. T. Tran, C. Zachreson, A. M. Berhane et al., *Phys. Rev. Appl.* 5, 034005 (2016).

# Žodinė sesija 3A

Lazerių fizika ir šviesos technologijos

# Erdvėje ir laike koncentruotos šviesos sąveikos su medžiaga: I. fotocheminių reakcijų tyrimai ir valdymas

# Matter in spatio-temporally compressed light: I. Interrogation and control of photochemical reactions

Roaldas Gadonas, Mangirdas Malinauskas, <u>Mikas Vengris</u> Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius <u>mikas.vengris@ff.vu.lt</u>

Pranešimų cikle pristatomi šviesos ir medžiagos sąveikų, vykstančių šviesą koncentruojant erdvėje (t.y. fokusuojant) ir laike (t.y. naudojami itin trumpi šviesos žybsniai), tyrimai. Erdvėlaikinį šviesos koncentruotumą aprašantis dydis yra fotonų koncentracija, t.y. fotonų skaičius, tenkantis šviesos žybsnio užimamos erdvės tūrio vienetui. Teikiamo darbų ciklo apimamas šviesos koncentracijas apibendrina 1 pav. Pasiekus 1017 fot./cm3 šviesos koncentracijas, medžiagoje galima stebėti sužadintas būsenas, padidinus fotonų skaičių iki 1018 fot./cm<sup>3</sup> – fotoreakcijas galima ne tik pasyviai stebėti, bet ir aktyviai valdyti, 1019 fot./cm3 jau sukelia negrįžtamus pokyčius medžiagoje, o ties 10<sup>20</sup> fot./cm3 šis poveikis jau tampa destruktyvus - medžiaga išgarinama. Pranešimų cikle pristatomi tyrimai apima visas šias šviesos ir medžiagos sąveikas.

Sąveikos rūšis	Sužadinimas	Valdomos fotoreakcijos	Negrįžtamas poveikis medžiagai	Medžiagos ardymas	
Fotonų koncentracija, cm <sup>-3</sup>	1017	1018	1019	10 <sup>20</sup>	

1 pav. Šviesos koncentracijos ir jas atitinkančios šviesos-medžiagos sąveikos

Esant sąlyginai nedidelėms fotonų koncentracijoms, pirmiausia pasiekiamos sąlygos medžiagai sužadinti – elektroninėse sužadintose būsenose esančių dalelių skaičius pasiekia ribą, kai šias būsenas jau galima stebėti, tirti jų dinamiką, priklausomybes nuo aplinkos ir t.t. Ultratrumpųjų šviesos impulsų privalumas yra tas, jog jie leidžia tirti elektroninio sužadinimo sukeltus vyksmus, pasiekiant pikosekundžių ir net femtosekundžių laikinę skyrą.

Tokia skyra būtina todėl, kad aibė biologijoje ir fizikinėje chemijoje svarbių molekulių funkcijų kurias sukelia šviesa (rega, fotosintezė, fototropizmas, fototaksis, fotoizomerizacija, fotoindukuota krūvio pernaša ir kt.), panaudoja sugertų fotonų energiją itin sparčiai. Kad reakcijos būtų našios, energijos panaudojimo sparta turi konkuruoti su sužadintu būsenų savaiminio gesimo sparta (paprastai kelios nanosekundės). Todėl molekulių fotoreakcijos itin sparčios - jų būdingos trukmės dažnai tesiekia vos pikosekundę. Galimybės tokias reakcijas tirti atsiveria tik naudojant dešimčių ar šimtų femtosekundžių trukmės impulsus, kurie tapo plačiau prieinami paskutiniame praeito amžiaus dešimtmetyje.

Autoriai išplėtojo ir sėkmingai pritaikė plataus spektro femtosekundinės žadinimo-zondavimo bei

kinetinės fluorimetrijos metodus eksperimentiškai tirdami energijos pernašą ir gaudyklių formavimąsi fotosintetiniuose pigmentų-baltymų kompleksuose, tamsiųjų karotenoidų būsenų dinamiką ir vaidmenį dirbtinės fotosintezės kompleksuose, rekombinacijos mechanizmus III-V grupės puslaidininkiuose bei tirdami procesus, vykstančius tiek biologinėse, tiek žmogaus susintetintose fotoaktyviose molekulėse [1,2].

Viena iš svarbiausių problemų, kylančių analizuojant elektroninės ultrasparčiosios spektroskopijos eksperimentų duomenis, yra ta, jog fotoreakcijose matomų tarpinių būsenų spektrai persikloja tarpusavyje ar net kompensuoja vieni kitus. Kartais kai kurių trumpai gyvuojančių būsenų koncentracijos susidaro tokios mažos, kad jų aptikti eksperimentiniais metodais nepavyksta. Vienas iš sėkmingiausių eksperimentinių šios problemos sprendimų - standartinio žadinimozondavimo eksperimento (vienas lazerio impulsas sužadina bandinį, o kitas registruoja sugerties pokytį), papildymas dar vienu lazerio impulsu. Šio papildomo impulso patekimo į bandinį laiką bei bangos ilgį galima parinkti taip, kad jis selektyviai sąveikautų su tarpiniais reakcijos produktais, leisdamas atskirti ju spektrinius požymius. Taip valdant ultrasparčias fotochemines reakcijas autoriams pavyko išnarplioti sudėtingus šakotų fotoreackijų kelius geltonojo fotoaktyviojo baltymo ir jo chromoforo fotocikluose, išsiaiškinti detalią žaliojo (GFP) fluorescuojančio baltymo chromoforo izomerizacijos dinamiką, išmatuoti fundamentalios biologinės reakcijos – protono pernašos sparta pagrindinėje būsenoje GFP, bei sėkmingai tirti optiškai nematomas karotinoidų būsenas tiek atskirose molekulėse, tiek fotosintetiniuose pigmentų-baltymų kompleksuose [3]. Šis ultrasparčiosios spektroskopijos patobulinimas davė puikių rezultatų ir tiriant sudėtingus fotoaktyvių molekulių izomerizacijos procesus.

Reikšminiai žodžiai: ultrasparčioji spektroskopija, fotoreakcijų dinamika

- Berera, R.; Herrero, C.; van Stokkum, L. H. M.; Vengris, M.; Kodis, G.; Palacios, R. E.; van Amerongen, H.; van Grondelle, R.; Gust, D.; Moore, T. A.; Moore, A. L.; Kennis, J. T. M. *PNAS* 2006, *103*, 5343.
- [2] Vengris, M.; Larsen, D. S.; Valkunas, L.; Kodis, G.; Herrero, C.; Gust, D.; Moore, T.; Moore, A.; van Grondelle, R. J. Phys. Chem. B 2013, 117, 11372.
- [3] Vengris, M.; Larsen, D. S.; Papagiannakis, E.; Kennis, J. T. M.; van Grondelle, R. In *Analysis and Control of Ultrafast Photoinduced Reactions*; (Springer-Verlag: Berlin Heidelberg, 2007; p 750).

# Erdvėje ir laike koncentruotos šviesos sąveikos su medžiaga: II. gamtos įkvėpti nanodariniai

# Matter in spatio-temporally compressed light: II. bioinspired nanostructures

<u>Roaldas Gadonas</u><sup>1</sup>, Mangirdas Malinauskas<sup>1</sup>, Mikas Vengris<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius roaldas.gadonas@ff.vu.lt

Daugiafotonė fotopolimerizacija: lazerinis 3D spausdinimas su nanometrine skyra.

Priartėjus prie (bet neperžengus) medžiagos optinio pažeidimo slenksčio, kai fotonų koncentracija pasiekia 1019 fot./cm3, šviesos poveikis medžiagai tampa negrįžtamas. Vienas iš svarbiausių tokių tvarių fotoreakcijų pavyzdžių yra organinių molekulių polimerizacija (tinklinimas) šviesos sukeltas \_ monomerinių molekulių jungimasis vieną į makromolekulinį junginį. Netiesinės erdvėlaikyje koncentruotos šviesos sąveikos su medžiaga dėka šias reakcijas galima inicijuoti itin mažų matmenų tūryje - tik aštriai sufokusuoto pluošto sąsmaukos aplinkoje. Slenkstinis polimerizacijos reakcijos pobūdis lemia tai, negrįžtama fotomodifikacija įvyksta kad daug mažesniame nei pluošto sąsmauka tūryje. Tai sudaro labai mažų trimačių (3D) polimerinių darinių formavimo technologijos su nanometrine erdvine skyra pagrindą. Nuosekliai keičiant pluošto sąsmaukos padėti fotojautrios medžiagos tūryje galima formuoti laisvai pasirinktos geometrijos erdvinius polimerinius darinius, o juos atskirti nuo nepaveiktos medžiagos padeda (ryškikliai), organiniai tirpikliai išplaunantys neeksponuotą medžiagos monomerinę frakciją. Ši adityvioji (pridedanti medžiagos prie ruošinio) itin lanksti technologija mokslinėje spaudoje dažnai vadinama "tiesioginio lazerinio rašymo 3D litografijos" (TLR3DL) technologija. Pastaruoju metu jos galimybės vystosi labai sparčiai, o taikymai apima visą eilę svarbių sričių, tokių kaip šviesos sklidimo mikrometriniame mastelyje valdymas mikrooptiniais (miniatiūriniais optikos elementais) ir nanooptiniais komponentais (fotoniniais kristalais), įvairių mikrofluidinių lustų funkciniu komponentu formavimas ir integravimas, tvarkių porinių specifinės mikroarchitektūros karkasų kamieninių ląstelių kultūroms bei individualių dirbtinių implantų prototipavimas, ir t.t.

Šios krypties darbai Lietuvoje prasidėjo 2005 m. Pirmoji publikacija paskelbta 2009 m., o 2013 m. jau publikuotas apžvalginis straipsnis prestižiniame žurnale Physics Reports [1]. Šis tyrimas yra daugiaplanis, nes jungia darbus, nukreiptus į TLR3DL technologijos pagrindą sudarančių fizikinių procesų tyrimus, šviesos ir medžiagos sąveikos fizikinių ir cheminių mechanizmų supratimą (identifikavimą), darinių formavimo našumą ir atkartojamumą, jų savybių charakterizavimą, papildomą funkcionalizavimą ir panaudojimą moksliniams, pramoniniams bei biomedicininiams uždaviniams spręsti.

Pastaraisiais metais buvo ženkliai pasistūmėta į priekį sprendžiant visą eilę uždavinių, tokių kaip formavimo erdvinės raiškos didinimas ir darinių kokybės bei savybių įvairiems taikymams valdymas (per ekspozicijos moduliaciją, inicijuojamo poveikio mechanizmus, medžiagų sudėtį ir t.t.), darinių reikalingo dydžio ir priimtinos praktinių uždavinių sprendimui gamybos spartos bei atkartojamumo užtikrinimas, tinkamų formavimui medžiagų plėtra ir technologinių formavimo parametrų pritaikymas, technologijos praplėtimas pritaikant skaidrių terpių tūriniam modifikavimui (fotoniniai kristalai, skirti šviesos pluoštų erdvinių charakteristikų valdymui), unikalių integruotų ir daugiafunkciniu (refrakcinių bei difrakciniu) mikrooptikos komponentų modeliavimas, gamyba bei tyrimas, technologijos integravimas su tradicinėmis (UV litografija, minkštoji ir nanoispaudu litografija, cheminis ėsdinimas, tiesioginio lazerinių impulsų indukuota dalelių pernaša) technologinėmis platformomis, taip pat pademonstruoti biomedicininiai metodų taikymai in vitro ir in vivo (biosuderinamumas, ląstelių proliferacija ir diferenciacija, bioskaidumas).

Šių darbų svarbą liudija glaudus bendradarbiavimas su užsienio mokslo centrais, kartu vykdyti tiriamieji projektai ir parengtos publikacijų serijos. Tyrimai šia kryptimi sėkmingai tęsiami ir toliau nuolat vystomi [2].

Reikšminiai žodžiai: ultratrumpieji šviesos impulsai, tiesioginis lazerinis rašymas, mezoskopiniai dariniai, fotoniniai kristalai, mikrooptiniai komponentai, dirbtiniai karkasai, biomimetiniai dariniai.

- M. Malinauskas, M. Farsari, A. Piskarskas and S. Juodkazis, Phys. Rep. 533, 1 (2013).
- [3] D. Gailevičius, V. Purlys, M. Peckus, R. Gadonas, K. Staliunas, Spatial Filters on Demand Based on Aperiodic Photonic Crystals, spaudoje, Annal. Physik. Spaudoje, 10.1002/andp.201700165.

# Erdvėje ir laike koncentruotos šviesos sąveikos su medžiaga: III. trimačių nanodarinių taikymai fotonikoje, optikoje, ir biomedicinoje

# Matter in spatio-temporally compressed light: III. Photonic, optical and biomedical applications of three-dimensional nanostructures

Roaldas Gadonas, <u>Mangirdas Malinauskas</u>, Mikas Vengris Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius <u>mangirdas.malinauskas@ff.vu.lt</u>

Pranešime pristatomas ženklus tiesioginio lazerinio rašymo 3D litografijos (TLR3DL) postūmis į priekį sprendžiant visą eilę uždavinių, tokių kaip formavimo erdvinės raiškos didinimas ir darinių kokybės bei savybiu ivairiems taikymams valdymas (per ekspozicijos moduliacija, inicijuojamo poveikio mechanizmus, medžiagų sudėtį ir t.t.) [1], darinių reikalingo dydžio ir priimtinos praktinių uždavinių sprendimui gamybos spartos bei atkartojamumo užtikrinimas [2], tinkamų formavimui medžiagų plėtra ir technologinių formavimo pritaikymas, technologijos praplėtimas parametru pritaikant skaidrių terpių tūriniam modifikavimui (fotoniniai kristalai, skirti šviesos pluoštų erdvinių charakteristikų valdymui) [3], unikalių integruotų ir (refrakciniu daugiafunkciniu bei difrakciniu) mikrooptikos komponentų modeliavimas, gamyba bei tyrimas [4,5], technologijos integravimas su tradicinėmis (UV litografija, minkštoji ir nanojspaudų litografija, cheminis ėsdinimas, tiesioginio lazerinių impulsų indukuota dalelių pernaša) technologinėmis platformomis [6].

Šviesos koncentracijai pasiekus maždaug 10<sup>20</sup> fot./cm<sup>3</sup>, viršijamas medžiagos optinio pažeidimo slenkstis – intensyvi šviesa išgarina jį sugėrusią medžiagą. Tai leidžia lazeriu formuoti medžiagoje darinius ne adityviuoju, bet subtraktyviuoju būdu, pašalinant nereikalingą medžiagą. Femtosekundiniais impulsais pavyksta pasiekti itin tikslų medžiagos išgarinimą, nepaliekant šiluminio poveikio padarinių greta esančioje medžiagoje. Autoriai atliko tyrimus, kuriais siekiama išbandyti Lietuvoje gaminamus kietakūnius femtosekundinius lazerius akies ragenos chirurgijai. Šiuo metu ragenos operacijose naudojami du lazeriai - femtosekundinis infraraudonosios (IR) srities lazeris atpjauna ragenos lopą, o nanosekundinis ultravioletinės (UV) srities lazeris po šiuo atidengtu lopu suformuoja lęšio pavidalo darinį, kuris ištaiso akies refrakcijos ydas. Autoriai savo darbuose pamėgino pakeisti du lazerius vienu femtosekundiniu šaltiniu, kurio skleidžiama IR srities spinduliuotė leistų atpjauti ragenos lopą, o penktoji jos harmonika (UV srityje) tiktų refrakcinių darinių formavimui. Sėkmingi tokių taikymų tyrimai buvo paskelbti prestižiniuose medicinos ir taikomosios optikos žurnaluose [7,8], o šiuo metu kuriamos lazerinio apdirbimo sistemos, kurias numatoma testuoti klinikose ir diegti į praktiką.



1 pav. Trimačių nanodarinių pavyzdžiai: (a) trimatis fotoninis kristalas; (b) daugiafunkcinis optinis komponentas integruotas ant vienmodžio šviesolaidžio galo, (c) ir (d) – tvarkūs karkasai audinių inžinerijai [9].

Reikšminiai žodžiai: ultratrumpieji šviesos impulsai, daugiafotonė trimatė litografija, mezoskopiniai dariniai, fotoniniai kristalai, mikrooptiniai komponentai, dirbtiniai karkasai, audinių inžinerija.

- A. Zukauskas, I. Matulaitiene, D. Paipulas, G. Niaura, M. Malinauskas, and R. Gadonas, , Laser Photon. Rev. 9, 706 (2015).
- [2] M. Malinauskas, A. Zukauskas, S. Hasegawa, Y. Hayasaki, V. Mizeikis, R. Buividas, and S. Juodkazis, Light: Sci. Appl. 5, e16133 (2016);
- [3] L. Maigyte, V. Purlys, J. Trull, M. Peckus, C. Cojocaru, D. Gailevicius, M. Malinauskas, and K. Staliunas, Opt. Lett. 38, 2376 (2013).
- [4] B. Sanchez-Padilla, A. Zukauskas, A. Aleksanyan, A. Balcytis, M. Malinauskas, S. Juodkazis, and E. Brasselet, Opt. Express 24(21), 24075 (2016).
- [5] A. Zukauskas, V. Melissinaki, D. Kaskelyte, M. Farsari and M. Malinauskas, J. Laser Micro. Nanoen. 9, 68 (2014).
- [6] A. Zukauskas, M. Malinauskas, A. Kadys, G. Gervinskas, G. Seniutinas, S. Kandasamy, and S. Juodkazis, Opt. Express 21, 6901 (2013).
- [7] M. Vengris, E. Gabryte, A. Aleknavicius, M. Barkauskas, O. Ruksenas, A. Vaiceliunaite, R. Danielius, J. Cataract Refrac. Surg. 36, 1579 (2010).
- [8] E. Danieliene, E. Gabryte, R. Danielius, M. Vengris, A. Vaiceliunaite, V. Morkunas, O. Ruksenas, J. Cataract Refract. Surg. 39, 258 (2013).
- [9] J. Maciulaitis, M. Deveikyte, S. Rekstyte, M. Bratchikov, A. Darinskas, A. Simbelyte, G. Daunoras, A. Laurinaviciene, A. Laurinavicius, R. Gudas, M. Malinauskas, and R. Maciulaitis, Biofabrication 7, 015015 (2015).

# Žodinė sesija 3B

Terahercai

# Plačiajuostės terahercų dažnio spinduliuotės generavimas ore

## Generation of broadband terahertz radiation in air

Karolis Adomavičius, Maksym Ivanov, Žilvinas Svirskas ir <u>Virgilijus Vaičaitis</u> Vilniaus universiteto Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius Virgilijus.Vaicaitis@ff.vu.lt

Terahercu (THz) dažnio elektromagnetinės spinduliuotės spektro sritis apima dažnius nuo maždaug 0,1 THz iki 10 THz, o ją atitinkantys bangos ilgiai yra nuo 3 mm iki 30 µm. Tokia spinduliuotė vis dažniau randa taikymų tiek moksle, tiek pramonėje ir net šiuolaikinėse saugumo sistemose. Platesni šin technologijų vystymąsi stabdo mažas terahercų dažnio spinduliuotės šaltinių efektyvumas, todėl nuolat ieškoma naujų ir efektyvių tokios spinduliuotės generavimo metodų. Vienas iš perspektyviausių didelės smailinės galios THz spinduliuotės generavimo metodų yra femtosekundinės trukmės lazerio impulsų dažnio maišymas dujų (iskaitant ir ora) plazmoje, kuriamoje tais lazerio impulsais [1,2]. Tokiu pačiais būdu generuojamos spinduliuotės savybės dar nėra iki galo ištirtos, o ir pats generavimo mechanizmas iki šiol nėra visiškai aiškus, todėl šiame darbe mes pateikiame terahercų dažnio spinduliuotės, generuojamos oro plazmoje, sukurtoje, naudojant bichromatinius femtosekundinus lazerio impulsus, tyrimų rezultatus.

Eksperimento metu buvo naudojamas Ti:Safyro lazeris (impulso energija –iki 8 mJ, trukmė –apie 35 fs, bangos ilgis  $\approx$ 791 nm, pasikartojimo dažnis –1 kHz). Kadangi terahercų dažnio spinduliuotės generacijos efektyvumas keliasdešimt ar net šimtus kartų padidėja, naudojant bichromatinį kaupinimą, oro žadinimui kartu su fokusuotais (lęšio židinio nuotolis –30 cm) 791 nm bangos ilgio šviesos impulsais buvo naudojama ir antroji šio lazerio harmonika, generuojama 100 µm storio netiesiniame BBO kristale. Energinės generuojamų THz impulsų savybės buvo analizuojamos, naudojant itin jautrų kalibruotą piroelektrinį kompanijos "Spectrum detector Inc" THz dažnio radiometrą, o spektrinės – naudojant Maikelsono (Michelson) interferometrą.

Naudojant piroelektrinį energijos detektorių, buvo rastos optimalios THz spinduliuotės generavimo sąlygos (žadinimo impulsų energija, jų fokusavimo sąlygos ir pan.). Be to, detektorių stumdant skersai optinės ašies ir kiekviename taške registruojant jo parodymus, buvo ištirtos ir erdvinės generuojamo THz pluošto savybės. Taip buvo nustatyta, kad generuojamos spinduliuotės pluoštas turi kūgio, kurio puskampis –apie 2 laipsniai, formą, tačiau šį pluoštą buvo galima efektyviai kolimuoti ir fokusuoti, naudojant du papildomus parabolinius veidrodžius.

Maikelsono interferometras buvo sudarytas iš plono pluošto daliklio ir dviejų plokščių veidrodėlių. Vieną veidrodėlį stumdant išilgai optinės ašies, buvo registruojamas nuo abiejų veidrodėlių atspindėtų THz impulsų laikinės interferencijos signalas. Silpnų elektrinių signalų, gaunamų iš piroelektrinio detektoriaus, stiprinimui buvo naudojamas sinchroninis stiprintuvas, kuris ne tik padidindavo detektoriaus signalų amplitudę, bet ir sumažindavo elektrinius triukšmus. Šie duomenys buvo siunčiami į personalinį kompiuterį, kur jie buvo apdorojami ir analizuojami. Personalinis kompiuteris taip pat valdė ir transliacinį staliuką, ant kurio buvo pritvirtintas judantis veidrodėlis, todėl matavimai buvo visiškai automatizuoti.

Atlikus laikinės interferencijos signalų Furje transformaciją, buvo randamas ir THz impulsų spektras, kurio plotis bei forma praktiškai nekito, keičiant eksperimento parametrus (žadinimo galią, fokusavimo sąlygas ir pan.). Tipiški ore generuojamų THz impulsų spektrai parodyti 1 pav. Matome, jog šių impulsų spektro plotis siekia iki 50 THz, o pats spektras yra gana tolygus (išskyrus sritį ties 8 THz), kas leidžia jį naudoti ir plačiajuosčiams spektroskopiniams tyrimams. Taip, naudojant šią metodiką, buvo išmatuota 0,5 mm storio silicio plokštelės sugertis, aiškiai rodanti Si fononinius rezonansus 12-46 THz srityje, kas gerai atitinka kitais metodais gautus duomenis.



1 pav. Tipiški terahercų dažnio spinduliuotės impulsų spektrai, gauti, naudojant 5 (viršutinė kreivė) ir 3 mJ energijos (apatinė kreivė) lazerio impulsus.

Be to, buvo pademonstruota, jog THz impulsų generavimo efektyvumas stipriai (iki 50%) sumažėja, THz spinduliuotę generuojančią oro sritį paveikus papildomu, iš anksto suformuotu, plazmos filamentu, taigi, šis metodas leidžia tirti ir lazeriu sukurtos plazmos savybes (jonizuotų dalelių erdvinį pasiskirstymą, tankį, gesimo konstantas ir pan.).

Reikšminiai žodžiai: lazeris, oras, terahercai, plazma, spektroskopija.

- [1] D.J. Cook, R.M. Hochstrasser, Opt. Lett. 25, 1211 (2000).
- [2] V. Pyragaitė, V. Smilgevičius, K. Steponkevičius, B. Makauskas, and V. Vaičaitis, JOSA B 31, 1430 (2014).

# Didelio jautrio plačiajuostis terahercinis silicio KMOP technologijos jutiklis

# High-sensitivity broadband THz detector based on silicon CMOS

Kęstutis Ikamas<sup>1,3</sup>, Alvydas Lisauskas<sup>1,2</sup>, Daniel Voß<sup>2</sup>, Hartmut G. Roskos<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius

<sup>2</sup>Physikalisches Institut, Goethe-Universität Frankfurt, Max-von-Laue-Str. 1, D-60438 Frankfurt am Main, Germany

<sup>3</sup>Generolo Jono Žemaičio Lietuvos karo akademija, Šilo g. 5a., LT-10322 Vilnius

kestutis.ikamas@ff.vu.lt

Lauko tranzistoriai gali būti panaudoti terahercų ruožo spinduliuotės detekcijai. Šio tipo jutikliai - tai galios jutikliai ir jų veikimo principas - terahercinių bangų lyginimas tranzistoriaus kanale. Kai dažniai yra nedideli, tranzistorius dirba klasikiniu varžinio maišymo režimu, tačiau kylant dažniui pradeda veikti kitas, plazminių bangų sklidimu dvimatėse elektronų dujose grįstas maišymo mechanizmas, leidžiantis jutikliui dirbti viršijančiuose kanalo uždarymą dažniuose [1, 2]. Integriniuose grandynuose įdiegti komplementarūs metalo oksidopuslaidininkių (KMOP) tranzistoriai ir su jais suderintos antenos yra vienas iš galimų kambario temperatūros THz jutiklių sprendimų, panaudotų realaus laiko vaizdo kamerų gamybai [2, 3]. KMOP detektorių konstrukcija nuolat gerinama siekiant padidinti jų jautrį ir patikimumą. Šiame darbe pristatomas plačiajuostis jutiklis su peteliškės formos antena, kurio ekvivalentinė triukšmų galia (NEP) ir jautris 500-750 GHz dažnių srityje išlieka vienodame lygyje ir siekia, atitinkamai, 67 pW/ $\sqrt{\text{Hz}}$  ir 100 V/W, įskaitant visą į prietaisą krentančios spinduliuotės galią.

Terahercinis tranzistorinis jutiklis (TeraFET) buvo sumodeliuotas Vilniaus universitete ir pagamintas Taivanio kompanijos "TSMC", naudojant standartinę 90 nm KMOP technologiją. Siekiant pagerinti detektoriaus jautrį, atsižvelgta į tokius tranzistoriaus geometrijos parametrus kaip kanalo ilgis, užtūros ilgis ir plotis, pilnutinių varžų suderinimą tarp antenos ir tranzistoriaus bei gamybos ypatumus. Viename Si kristale įterpti keli skirtingi jutikliai (1 Pav.). Šiame darbe pristatomas tiriamoje dažnių srityje jautriausias prietaisas su peteliškės formos antena. Jutiklis optimizuotas ryšiui su hiperpusrutulio formos Si lęšiu iš padėklo pusės.



1 pav. Si kristalas su plačiajuosčiu jutikliu su peteliškės formos antena (išskirtas rėmeliu).

TeraFET dažninės ir elektrinės charakteristikos išmatuotos eksperimentiniu stendu, kurį sudarė 500-750 GHz dažnių diapazone derinamas nuolatinės veikos šaltinis "VDI WR1.5" ir du neašiniai ("off-axis") paraboliniai veidrodžiai, skirti spinduliuotę nukreipti į detektorių. Tranzistoriaus atsakas stiprinamas mažatriukšmiu įtampos stiprintuvu ir matuojamas dinaminiu signalo analizatoriumi "SRS SR785". Spinduliuotė moduliuojama šaltinyje stačiakampio formos periodiniu signalu.

Didžiausias įtampos signalas ir jautris jutiklyje pasiekiamas ties 0,06 V užtūros įtampa. Ties 610 GHz dažniu tranzistoriaus jautris siekė 200 V/W įskaitant visą į prietaisą krintančią spinduliuotės galią. Atsižvelgus į nuostolius antenoje ir lęšiuose, įvertinti TeraFET rodikliai būtų kelis kartus geresni, tačiau mažiau naudingi iš praktinės pritaikymo pusės. Optimalesnis detektoriaus darbinis taškas yra ties ~0,45 V užtūros įtampa, kur NEP yra mažiausia - 67 pW/ $\sqrt{\text{Hz}}$ . Nesutapimas tarp jautrio ir NEP atsiranda dėl netiesinės kanalo varžos priklausomybės nuo užtūros įtampos. Tyrimai parodė, kad jutiklis yra plačiajuostis - jo efektyvumas išlieka tame pačiame lygyje plačiame dažnių diapazone. Detektoriaus NEP neperžengia 100 pW/ $\sqrt{\text{Hz}}$  ribos beveik visoje tirtų dažnių srityje (žr. 2 Pav.). Gauti TeraFET jautriai yra kelis kartus geresni už komercinius Golėjaus narverlio tipo terehercinius jutiklius.



2 pav. Jutiklio efektinės triukšmo galios ir jautrio priklausomybės nuo terehercinio šaltinio dažnio. Užtūros įtampa - 0,45 V.

Reikšminiai žodžiai: lauko tranzistorius, silicio KMOP, terahercai, NEP, detektorius

- M. Dyakonov, M. Shur, IEEE Transactions on Electron Devices 43(3), 380 (1996). 10.1109/16.485650
- [2] A. Lisauskas et al., Journal of Applied Physics 105(11) (2009). 10.1063/1.3140611
- [3] J. Zdanevičius, M. Bauer et al., Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves 36(10), 986 (2015). 10.1007/s10762-015-0169-1

# Žodinė sesija 4A

Lazerių fizika ir šviesos technologijos

### Poliarizacinių dislokacijų formavimas parametriškai stiprinant šviesos sūkurius

# Generation of polarization singularities by parametric amplification of optical vortices

<u>Maksym Ivanov</u><sup>1</sup>, Paulius Stanislovaitis<sup>1</sup>, Aidas Matijošius<sup>1</sup>, Titas Gertus<sup>2</sup>, Valerijus Smilgevičius<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius <sup>2</sup>Workshop of Photonics, Mokslininkų g. 6A, LT-08412 Vilnius mals iuonaugomeil com

maks.ivannov@gmail.com

We present a new method to obtain beams with polarization singularities. The proposed method is based on superposition of two optical vortices with opposite topological charges [1]. The vortices can be conveniently obtained during the process of optical parametric amplification.

The experimental setup is shown in Fig. 1. The signal and pump beams are combined in a collinear fashion by a wavelength-selective mirror M. The signal beam, which is an optical vortex of topological charge l, is amplified by a Gaussian pump beam in a nonlinear crystal (NLC). This way, due to the topological charge conservation in nonlinear optical processes [2], the idler wave is formed with the opposite topological charge -l. After filtering off the remaining pump beam, the combined signal-idler beam is transformed into a beam with a polarization singularity by a  $\lambda/4$  waveplate (QW).

It is important to note that this experiment uses a crystal with type-II phase matching in order to obtain two orthogonally polarized vortices at the output of the crystal. In addition, to achieve the superposition of the vortices, they have to be of the same wavelength, therefore the nonlinear interaction has to be degenerate with respect to the wavelength.

The type of the formed singularity will depend on the orientation of the  $\lambda/4$  waveplate as well as the phase shift between the signal and idler waves at the output of the crystal. Therefore a phase retarder (PR), has been put in the path of the signal beam to control the initial phase shift between the signal in pump waves. The phase retarder is a thin glass plate, which can be rotated to change the optical path of the signal beam. The signal, idler and pump waves are connected by certain phase relations during the optical parametric amplification [3], therefore introducing a phase to the signal beam will result in a corresponding phase shift of the idler beam.

By manipulating the orientation of the  $\lambda/4$  waveplate and the phase of the signal beams, it is possible to generate various types of beams with polarization singularities, including the radially and azimuthally polarized beams.

The experiment was carried out using an 8 mm long KTP crystal. The topological charge of the signal beam (Fig. 2 (b)) was l=1 and the amplification in the crystal was about 500 times. This way, a radially (Fig. 2 (c)) and azimuthally polarized beam has been obtained. The output beam was analyzed using a birefringent calcite crystal to ensure the correct polarization structure of the beam (Fig. 3).



Fig. 1. The experimental setup. NLC – nonlinear crystal with type-II phase matching, M – wavelength-selective mirror, PR – phase retarder, F – filter,  $QW - \lambda/4$  waveplate.



Fig. 2. The intensity distributions of the initial pump (a) and signal (b) beams and the radially polarized output beam (c). The arrows indicate the polarization states of the beams.



Fig. 3. The split vertical (top) and horizontal (bottom) polarization components of a radially (a) and azimuthally (b) polarized beam.

*Keywords: optical vortices, radial polarization, polarization singularities, optical parametric amplification.* 

#### References

- [1] C. H. Yang, Y. D. Chen, S. T. Wy, A. Y. W. Fuh, Scientific reports **6**, (2016).
- [2] M. S. Soskin, M. V. Vasnetsov. Pure Appl. Opt. 7(2), 301 (1998).
- [3] Y. R. Shen. Principles of nonlinear optics, (New York, 1984)

# Pasyvios modų sinchronizacijos iterbio femtosekundiniai skaiduliniai lazeriai spinduliuotės dažnio keitimui panaudojant netiesinius procesus

# Passively mode-locked Ytterbium femtosecond fiber lasers for frequency conversion using nonlinear effects

Saulius Frankinas<sup>1</sup>, Tadas Bartulevičius<sup>1,2</sup>, Andrejus Michailovas<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>Ekspla, Savanorių pr. 237, 02300 Vilnius <sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius s.frankinas@ekspla.com

Skaidulinės lazerinės sistemos yra patrauklios didelės galios ultratrumpųjų impulsų generacijai ir stiprinimui dėl plačių sugerties ir emisijos juostų, ilgos fluorescencijos gyvavimo trukmės. Plati emisijos juosta leidžia stiprinti kad ir 30 fs trukmės impulsus [1], o dėl ilgos fluorescencijos gyvavimo trukmės sukaupiama daug energijos. Stipri spinduliuotės lokalizacija skaidulos šerdyje ir mažas kvantinis defektas lemia aukštą skaidulinių lazerinių sistemų našumą. Tačiau stipri šviesos lokalizacija skaidulos šerdyje kartu sukuria ir fundamentalų tokių sistemų ribojimą. Impulsų energinės charakteristikos skaidulinės lazerinės sistemos išvade ribojamos spinduliuotės saviveikos su medžiaga. Ultratrumpuju impulsu atveju fazės moduliavimasis optinėje skaiduloje pasireiškia, kai impulsu energija tesiekia 1nJ [1]. Tokiu atveju atsiranda netiesinis fazės postūmis, impulso čirpas tampa netiesinis ir jau nėra pilnai kompensuojamas naudojant standartinius dispersinius komponentus. Impulso laikinė forma deformuojama, o sistemos išvade sumažėja laikinis impulsų kontrastas ir smailinis intensyvumas.

Faziškai moduliuotų (čirpuotų) impulsų stiprinimas vra vienas iš būdu, leidžiantis pasiekti praktikoje panaudojamas impulsų energijas ir išvengti impulsų laikinės deformacijos dėl fazės moduliavimosi. Šio metodo esmė tokia, jog impulsai yra išplečiami laike, taip sumažinamas smailinis intensyvumas, vėliau pastiprinami ir suspaudžiami iki pradinių, arba trumpesnių impulsų. Kitas būdas sumažinti netiesiškumo įtaką impulsams realizuojamas didinant stiprintuvo skaidulos šerdies diametrą. Tačiau didinant skaidulos diametrą vis sunkiau išlaikyti geras erdvines pluošto charakteristikas. Pastaruoju metu vis plačiau naudojami vieną skersinę modą palaikantys fotoninių kristalų stiprintuvai, kuriu šerdies diametras siekia 30-85 um [2]. Stiprinant čirpuotus impulsus didelio modos ploto stiprintuvuose sumažinama stiprintuvo netiesiškumo įtaka impulsui, todėl sistemos išvade pasiekiami kelių dešimčių uJ energijos femtosekundiniai impulsai. Tokių impulsų charakteristikų pilnai pakanka efektyvių spinduliuotės dažnio keitimo sistemų, paremtų kontinuumo generacija ir stiprinimu, realizacijai.

Šiame darbe demonstruojamos dvi skaidulinės čirpuotų impulsų stiprinimo sistemos panaudojant 30 um ir 45 um skersmens fotoninių kristalų stiprintuvus. Principinė femtosekundinių impulsų skaidulinio lazerio schema parodyta 1a pav. Taip pat darbe pristatomi ir aptariami skaidulinio lazerio spinduliuotės dažnio derinimo schemos, leidžiančios pasiekti 700-2000 nm spektro sritį, rezultatai.

Visiškai skaidulinis pasyvios modų sinchronizacijos osciliatorius generuoja spektriškai ribotiems artimus impulsus 40 MHz pasikartojimo dažnju ties 1030 nm centriniu bangos ilgiu. Osciliatoriaus impulsu spektras išplečiamas ilgoje pasyvioje skaiduloje iki 12,7nm, o trukmė išplečiama iki ~500 ps panaudojant čirpuotą Brego gardele (CFBG). skaiduline Impulsu pasikartojimo sumažinti dažniui naudojamas akustooptinis moduliatorius, po kurio naudojama priešstiprintuvo pakopa (preAMP), optimizuota prie pasirinkto didelio modos ploto stiprintuvo. Sustiprinti impulsai spaudžiami difrakcinių gardelių pora iki sub-300fs.



1 pav. a) principinė skaidulinio femtosekundinio lazerio schema; b) išmatuota spinduliuotės dažnio derinimo kreivė.

Skaidulinės sistemos spinduliuotės dažnio derinimo schema (SCOPA) paremta kontinuumo generacija YAG kristale ir stiprinimu BiBO kristale. Išmatuota spinduliuotės dažnio derinimo kreivė parodyta 1b pav. Taip pat darbe parodoma, jog efektyviam spinduliuotės dažnio keitimui pakanka santykinai mažos impulsų energijos (~1µJ), todėl kaupinimo lazeris gali būti supaprastintas.

- [1] J. Limpert ir kiti, IEEE Quantum Electron, 12, 2 (2006).
- [2] F.Roser ir kiti, Opt. Lett, 32, 24 (2007).

# Žodinė sesija 4B

Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika

### Fe kaip nespindulinės rekombinacijos GaN šaltinis

### Fe as a source of efficient non-radiative recombination in GaN

<u>Audrius Alkauskas</u><sup>1</sup>, Darshana Wickramaratne<sup>2</sup>, Jimmy-Xuan Shen<sup>2</sup>, Cyrus E. Dreyer<sup>2,3</sup>, Manuel Engel<sup>4</sup>, Martijn Marsman<sup>4</sup>, Georg Kresse<sup>4</sup>, Saulius Marcinkevičius<sup>5</sup>, Chris G. Van de Walle<sup>1</sup> <sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio 3, Vilnius, Lithuania <sup>2</sup>Materials Department, University of California, Santa Barbara, California, USA <sup>3</sup>Department of Physics and Astronomy, Rutgers University, Piscataway, New Jersey, USA <sup>4</sup>Faculty of Physics, Computational Materials Physics, University of Vienna, Vienna, Austria <sup>5</sup>Department of Materials and Nano Physics, KTH Royal Institute of Technology, Kista, Sweden <u>audrius.alkauskas@ftmc.lt</u>

Puslaidininkiniai šviestukai (šviesos diodai) yra iš principo patys efektyviausi šviesos šaltiniai. GaN pagrindu pagaminti InGaN/GaN ir AlGaN/GaN diodai yra kol kas vieninteliai, veikiantys mėlynojoje ir ultravioletinėje spektro dalyse. Žinoma, kad prie didelių sužadinimo intensyvumų (srovių) šviestukų efektyvumą riboja Auger rekombinacija ir krūvininkų nuotekis iš aktyviosios srities. Prie mažų sužadinimų šviestukų efektyvumą riboja rekombinacija per gilius lygmenis – taip vadinama Shockley-Read-Hall (SRH) rekombinacija.

Bendra SRH rekombinacijos teorija žinoma daug metų ir yra tvirtų įrodymų, jog ji svarbi nitriduose. Tačiau iki šiol neaišku, kokiuose konkrečiuose defektuose tokia rekombinacija yra galima GaN, puslaidininkyje su draustiniu energijos tarpu 3.5 eV. Kadangi optinių fononų energija GaN yra 0.091 eV, viename rekombinacijos procese turi dalyvauti bent 40 fononų - milžiniškas skaičius. Naudodami elektroninės struktūros skaičiavimus, paremtus tankio funkcionalo teorija, neseniai parodėme, kad plačiatarpiuose puslaidininkiuose labai efektyvus nespindulinės rekombinacijos mechanizmas per sužadintas defekto būsenas [1]. Šis mechanizmas pasireiškia, pvz., SRH rekombinacijoje per galio vakansijas ir galio vakansijos kompleksus InGaN [1].

Dar įdomesnis SRH rekombinacijos mechanizmas atrastas pereinamųjų metalų centruose plačiatarpiuose puslaidininkiuose [2]. Vienas svarbus to pavyzdys – GaN:Fe [2]. Čia rekombinacija vyksta taip, jog ir elektronų, ir skylių pagavoje dalyvauja sužadintos defekto būsenos, o pastoviame režime pagrindinės būsenos praktiškai niekuomet nepasireiškia (1 pav.). Pasiūlytas mechanizmas paaiškina itin efektyvią nespindulinę rekombinaciją per Fe centrus GaN, o suskaičiuotieji elektronų ir skylių pagavos skerspjūviai puikia dera su eksperimentu [3]. Pasiūlytasis mechanizmas yra bendas, ir turėtų galioti labai daugeliui pereinamųjų metalų centrų.



1 pav. Nespindulinės rekombinacijos GaN:F mechanizmas per sužadintas priemaišos būsenas.

Reikšminiai žodžiai: puslaidininkiai, šviestukai, našumas, rekombinacija, nitridai.

- [1] A. Alkauskas, C. E. Dreyer, J. L. Lyons, and C. G. Van de Walle, Phys. Rev. B 93, 201304 (2016)
- [2] D. Wickramaratne et al., Appl. Phys. Lett. 109, 162107 (2016).
- [3] T. K. Uždavinys, S. Marcinkevičus, J. H. Leach, K. R. Evans, and D. C. Look, J. Appl. Phys. **119**, 215706 (2016).

# Krūvininkus lokalizuojančio potencialo InGaN kvantinių duobių dariniuose modifikavimas

# Variation of localizing potential in InGaN QW structures

Jūras Mickevičius, Darius Dobrovolskas, Marek Kolenda, Mantas Dmukauskas, Tomas Grinys, Arūnas Kadys,

Tadas Malinauskas, Kazimieras Nomeika, Ramūnas Aleksiejūnas, Gintautas Tamulaitis

Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas ir Puslaidininkių fizikos katedra, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius juras.mickevicius@ff.vu.lt

Krūvininkų lokalizacija potencialo fliuktuacijose yra viena pagrindinių priežasčių, dėl kurių sumažėja nespindulinės rekombinacijos tikimybė InGaN, o šio puslaidininkio epitaksiniai sluoksniai ir heterodariniai yra plačiai naudojami gaminant optoelektroninius prietaisus, veikiančius regimojoje spektro srityje. Nepaisant sėkmingai išplėtotų nitridinių puslaidininkių auginimo technologijų, kokybiškų InGaN sluoksnių auginimas vis dar yra rimtas technologinis iššūkis, ypač tada, kai siekiama išauginti InGaN su dideliu In kiekiu, kad junginio emisijos spektras pasislinktų į žalią spektro dalį. Potencialo fliuktuacijos, atsiradusios dėl sudėties, sluoksnių storio bei įtempimų erdvinio netolygumo, apsaugo krūvininkus nuo patekimo i nespindulinės rekombinacijos centrus bei leidžia pasiekti aukšta vidini kvantinį našumą, tačiau didėjant potencialo fliuktuacijų energiniam pasikirstymui, platėja liuminescencijos spektras, išauga priverstinės spinduliuotės slenkstis.

Šiuo metu yra du pagrindiniai keliai, siekiant pagerinti InGaN medžiagų kokybę - i) sofistikuotų bei technologiniu auginimo metodu parametru tobulinimas, ir ii) kvantinio darinio sandaros tobulinimas, naudojant papildomus tarpsluoksnius. Šiame tyrime mes naudojame abu kelius - impulsinį InGaN sluoksnių aktyviojoje srityje auginimą MOCVD būdu ir mažo periodo InGaN/GaN supergardelės įterpimą siekiant sumažinti įtempimus aktyviojoje srityje. Šiame darbe mes parodome, kokią įtaką abu šie keliai daro krūvininkus lokalizuojančiam potencialui.

InGaN/GaN dariniai buvo užauginti ant GaN/safyro ruošinių MOCVD būdu. Dalyje bandinių, prieš auginant aktyviąją sritį, buvo užauginta mažo periodo InGaN/GaN supergardelė. InGaN sluoksniai aktyviojoje srityje buvo auginami impulsiniu būdu, kuomet indžio ir galio metalorganiniai prekursoriai yra leidžiami į reaktorių impulsais. Siekiant išsiaiškinti technologinių parametrų įtaką, buvo atlikti auginimai keičiant pauzės tarp metalorganinių impulsų trukmę ir supergardelės bei aktyviosios srities auginimo temperatūras.

Užaugintų sluoksnių struktūrinė kokybė vertinta pasitelkus Rentgeno spindulių difrakciją bei matavimus peršviečiančiuoju elektroniniu mikroskopu. Paviršiaus morfologija tirta jėgos mikroskopu. atominės Liuminescencijos ypatumai buvo tiriami ir mikroskopiniame makroskopiniame mastelyje, naudojant tiek įprastinę liuminescencinę spektroskopiją, tiek konfokalinę mikroskopiją. Krūvininkų dinamika tirta žadinimo-zondavimo bei dinaminių gardelių metodikomis.

Struktūriniai tyrimai atskleidė, kad tiek keičiant pauzės trukmę, tiek auginimo temperatūras, indžio kiekis InGaN junginyje praktiškai nesikeičia. Tuo tarpu, kvantinės duobės plotis didėja mažinant auginimo temperatūras, tačiau pauzės trukmė jam įtakos nedaro.

Liuminescencijos tyrimai atskleidė stipria lokalizuojančio potencialo priklausomybę tiek nuo pauzės tarp metalorganinių impulsų, tiek ir nuo auginimo temperatūrų. Keičiant pauzės trukmę, liuminescencijos juosta stipriai nesislenka, tačiau lokalizuojantis potencialas transformuojasi - pasikeičia lokalizuotų būsenu prigimtis iš sąlygotų sudėties fliuktuacijų į sąlygotas duobės storio fliuktuacijų. Ši transformacija lemia ir stiprų liuminescencijos intensyvumo erdvinio nehomogeniškumo didėjimą. Keičiant auginimo temperatūras, buvo pastebėtas stiprus liuminescencijos juostos raudonasis poslinkis, vėlgi palydimas lokalizuojančio potencialo transformacijos. Dariniuose, šviečiančiuose mėlynoje spektrinėje srityje, optinės savybės yra nulemtos mažo erdvinio mastelio fliuktuaciju, tuo tarpu, didelio mastelio fliuktuacijos salvgoja krūvininku susikaupima 250 nm diametro srityse. Dariniuose, šviečiančiuose oranžinėje spektrinėje srityje, išauga didelio mastelio fliuktuaciju įtaka, o padidėjęs nespindulinės rekombinacijos centrų tankis srityse su didesniu indžio kiekiu lemia mažesnį kvantinį našumą.

Praktiniu požiūriu svarbu tai, kad darbe parodyta, jog panaudojant impulsinį auginimo metodą bei tinkamai parinkus auginimo temperatūras InGaN epitaksinių sluoksnių liuminescencijos juostą įmanoma pastumti į žalią ir dar ilgabangiškesnę spektro dalį, tačiau šį poslinkį lemia ne didesnis indžio kiekis, o išplatėjęs lokalizuotų būsenų tankio ilgabangis šlaitas.

Reikšminiai žodžiai: InGaN, MOCVD technologija, kvantinės duobės, fotoliuminescencija, krūvininkų lokalizacija

# Nepusiausvirųjų krūvininkų tyrimas nepoliniame InGaN kvantiniame lakšte

# Study of excess carrier dynamics in homoepitaxial m-plane InGaN quantum well

Kristina Gelžinytė<sup>1</sup>, Ramūnas Aleksiejūnas<sup>1</sup>, Kazimieras Nomeika<sup>1</sup>, Saulius Nargelas<sup>1</sup>, Saulius Miasojedovas<sup>1</sup>, Audrius

Alkauskas<sup>2</sup>, Kathryn M. Kelchner<sup>3</sup>, Leah Kuritzky<sup>3</sup>, Shuji Nakamura<sup>3</sup>, and James S. Speck<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Institute of Applied Research, Vilnius University, Saulėtekio av. 3, Vilnius 10257, Lithuania

<sup>2</sup>Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio av. 3, Vilnius 10257, Lithuania

<sup>3</sup>Materials Department, University of California, Santa Barbara, CA 93106, USA

kristina.gelzinyte@ff.stud.vu.lt

Efficiency droop is a phenomenon that diminishes the radiative efficiency of III-nitride based light emitting diodes (LED) at sufficiently high carrier densities. However, most of the reported efficiency droop studies are performed in polar InGaN multilayered structures, where carrier delocalization and state filling effects are obscured by the presence of internal electrical fields. Here, we present an analysis of carrier recombination and diffusion processes in *nonpolar single* InGaN quantum well (QW) sample by means of several time- and spectrally-resolved all-optical techniques at room temperature over a wide carrier density range  $(2x10^{17} - 4x10^{20} \text{ cm}^{-3})$ , which marks the onset of droop.

The investigated  $In_{0.15}Ga_{0.85}N$  10 nm width single QW sample was grown by MOCVD on a low dislocation density m-plane GaN substrate with a 1<sup>0</sup> miscut towards the (0001) direction. To study excess carrier dynamics time resolved photoluminescence (TRPL) spectroscopy (pump at 355 nm) was combined with two pump-probe techniques (selective excitation of QW by 250 fs pulses at 386-392 nm): (i) spectrally-resolved differential transmission (DT); (ii) light-induced transient grating (LITG). Quantum efficiency (QE) was estimated using PL and integrating sphere.

The peak PL QE value reaches only ~7%, which confirms the dominance of nonradiative carrier recombination at room temperature. While the shape of QE curve is rather typical, the onset of efficiency droop happens at carrier density as low as  $8 \times 10^{17}$  cm<sup>-3</sup>.

The PL and DT spectra consist of broad and

asymmetrically shaped bands that change and blue shift with (Fig. excitation 1). The large spectral line widths are typical for nonpolar InGaN quantum wells and are attributed to strong carrier localization [1]. To explain the asymmetrical shape of PL



Fig. 1. Instantaneous PL (top) and DT (bottom) spectra measured at various excitation energy fluencies.

spectra at high carrier density, we assumed that the spectra are a result of superposition of different spectral components. In total, four (P1 – P4) Gaussian components were used to fit the TIPL, TRPL, and DT spectra at all photoexcitations. P1 being of the lowest photon energy (2.8 eV), P2 (2.9 eV), P3 (3 eV), and P4 – of the highest energy (3.1 eV); here we assume that spectral components in different techniques but at overlapping spectral position correspond to the same electronic transition.

Additionally, comparison between integrated and time-/spectrally-resolved PL and DT measurements reveals that spectral components P1 – P4 have different decay times ( $\tau_{slow}$ ,  $\tau_{med}$ , and  $\tau_{fast}$ ) that become shorter with increasing component photon energy.  $\tau_{slow}$  was related to peaks P1 and

P2,  $\tau_{med}$  – to P3, and  $\tau_{\text{fast}}$  – to P4. The decay time constant dependences carrier on density show unusual trend (Fig. 2), which cannot be explained by using general ABC



Fig. 2. Decay times of different components as a function of carrier density.

model. The LITG technique was used to assess the decay time  $\tau_R$  and ambipolar diffusivity D of the entire free carrier population as functions of carrier density. An opposite dependence of  $\tau_R$  and D versus excitation was seen (not shown). That suggests delocalization effect relation with increased nonradiative recombination.

To conclude, the change in state occupancy manifests in emergence of higher energy components in spectra that in turn correlates with the decrease in overall carrier lifetime and increase in diffusion coefficient. Therefore, the delocalization effect is proposed as a significant cause of efficiency droop.

#### Reference

 P. Dawson, S. Schulz, R.A. Oliver, M.J. Kappers, and C.J. Humphreys, J. Appl. Phys. 119, 181505 (2016).

# InN sluoksnių auginimas impulsiniu MOCVD metodu

# Growth of InN epilayers by pulsed MOCVD

Jonas Jurkevičius, Darius Dobrovolskas, Žydrūnas Podlipskas, Kazimieras Nomeika, Marek Kolenda, Arūnas Kadys, Tadas Malinauskas, Juras Mickevičius, Ramūnas Aleksiejūnas, Gintautas Tamulaitis Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius jonas.jurkevicius@ff.vu.lt

Siauratarpis InN pasižymi maža elektronu efektine mase, o elektronu dreifo greičiu lenkia tiek GaAs, tiek GaN, todėl yra perspektyvus kuriant greitaveikės elektronikos prietaisus. Tuo tarpu didelis InN sugerties koeficientas ir atsparumas saulės spinduliuotės poveikiui traukia fotovoltainių prietaisų kūrėjų dėmesį. Nepaisant sėkmingai išvystytų nitridinių puslaidininkių auginimo technologijų, kokybiškų InN sluoksnių auginimas vis dar yra rimtas technologinis iššūkis. Aukščiausios kokybės sluoksniai užauginami molekulinio pluoštelio epitaksijos (angl. MBE) metodu, tačiau ši technologija yra brangi. Gamybiniu požiūriu perspektyvesnis yra greitesnis ir lengviau pritaikomas dideliems gamybos mastams cheminio metalorganinių junginių nusodinimo iš garų fazės (angl. MOCVD) metodas, sėkmingai taikomas InGaN prietaisų pramonėje.

Tarp iššūkių, su kuriais susiduriama MOCVD technologija auginant InN yra palyginti aukšta amoniako disociacijos temperatūra ir žema indžio sublimacijos temperatūra, paliekančios siaurą optimalios auginimo temperatūros langą 600 °C aplinkoje. Be to, auginimo greitį ir prekursorių santykį riboja metališko indžio lašelių formavimasis. Čia pateikiamuose tyrimo rezultatuose parodoma, kad impulsinis MOCVD InN auginimo metodas yra tinkamas šių technologinių problemų sprendimui ir ženkliai geresnės kokybės InN sluoksnių gamybai.

Šiame darbe tirti 300-400 nm storio InN sluoksniai buvo užauginti azoto atmosferoje (400 mBar) ant GaN (5 µm c-GaN sluoksnis ant safyro padėklo) paviršiaus. Auginimo sąlygos optimizuotos keičiant temperatūrą, ir trimetilindžio (TMI) srauto impulso trukmę, pauzės trukmę, bei impulsų skaičių. Užaugintų sluoksnių struktūrinė kokybė vertinta pasitelkus rentgeno spindulių difrakcijos spektrus, paviršiaus morfologija tirta atominės jėgos mikroskopu. Konfokaliniu mikroskopu atlikta fotoliuminescencinė spektroskopija su erdvine skyra. Krūvininkų dinamika tirta šviesa indukuotų dinaminių gardelių metodika, kuri leido vienu metu nustatyti ir nepusiausvirųjų krūvininkų gyvavimo trukmę, ir jų bipolinės difuzijos koeficientą.

Palaikant grįžtamąjį ryšį tarp InN sluoksnių auginimo ir struktūrinių, morfologinių bei liuminescencinių savybių charakterizavimo optimizuotos InN auginimo sąlygos impulsiniu MOCVD metodu. Nustatyta, kad InN sluoksnio struktūrinė kokybė gerėja didėjant TMI impulso trukmei, kai užtikrinamas optimalus V/III santykis, valdomas TMI impulso ir pauzės trukmėmis. Didžiausio intensyvumo fotoliuminescencija stebėta sluoksniuose, kurių auginimo metu TMI impulso ir pauzės trukmių santykis buvo 7 s/20 s, atitinkantis 1,5-2 atominių InN sluoksnių užauginimą vieno ciklo metu. Aukštesnėje temperatūroje impulsiškai auginamų sluoksnių fotoliuminescencijos spektrai pasižymi didesniu intensyvumu ir mažesniu mėlynuoju smailės poslinkiu dėl Buršteino-Moso efekto. Didžiausias teigiamas poveikis liuminescencijos savybėms pasiektas auginant pereinamąjį InN sluoksnį palaipsniui keliant temperatūrą su kiekvienu TMI impulsu.

Optimizavus auginimo procedūrą MOCVD būdu pagaminti InN sluoksniai, kurių krūvininkų gyvavimo trukmės prilygsta gyvavimo trukmėms MBE būdu užaugintuose sluoksniuose. Tiriant krūvininkų dinamiką nustatytas sąryšis tarp optimaliomis sąlygomis impulsiškai auginamo InN sluoksnio storio ir elektronų judrio, jų pusiausvirosios koncentracijos, o kartu ir fotoliuminescencijos smailės spektrinės padėties. Nustatytas pagrindinis veiksnys, lemiantis pusiausvirųjų krūvininkų tankį ir liuminescencijos intensyvumą.

Reikšminiai žodžiai: InN, MOCVD technologija, epitaksiniai sluoksniai, fotoliuminescencija

# Žodinė sesija 5A

Lazerių fizika ir šviesos technologijos

# Optinių bangolaidžių integravimas į lydytą kvarcą femtosekundiniais šviesos impulsais

### Optical waveguide integration in fused silica with femtosecond laser pulses

Audrius Puišys, Domas Paipulas, Valdas Sirutkaitis

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

domas.paipulas@ff.vu.lt

Pastaruoju metu skaidrių dielektrinių medžiagų, tokių kaip lydytas kvarcas, apdirbimas panaudojant femtosekundinės trukmės lazerinius šviesos impulsus tampa vis daugiau dėmesio sulaukiančia ir nuolatos augančia mokslinių tyrimų ir optinių technologijų sritimi. Tai lėmė šiuolaikinės ultratrumpųjų impulsų lazerinės sistemos, leidžiančios praktiškai be terminių efektų formuoti paviršines bei tūrines mikrometrinių matmenų medžiagos modifikacijas su pakitusiu lūžio rodikliu, o šias modifikacijas išnaudoti fotoninių elementų formavimui [1].

Vienas paprasčiausių ir fundamentaliausių tokių elementų – bangolaidžiai, suformuoti iš taip vadinamų I tipo modifikacijų (sričių su padidėjusiu lūžio rodikliu), turintys daug potencialo juos pritaikant telekomunikacijų, mikrofluidikos, sensorių ar astrofizikinių matavimų srityse.

Šiame darbe pristatomos tokių bangolaidžių integravimo į lydyto kvarco tūrį galimybės, panaudojant Yb:KGW lazerinę sistemą, generuojančią 320 fs trukmės impulsus. Įprastai laikoma, jog optinių bangolaidžių įrašinėjimas lydytame kvarce su >180 fs trukmės impulsai yra sunkiai realizuojamas, nes tokie impulsai indukuoja taip vadinamas II tipo modifikacijas, savitvarkias nanogardelės, kurios sklaido spinduliuotę ir nepalaiko bangolaidžiavimo reiškinio [2]. Šiame darbe demonstruojama, jog panaudojant plyšio metodiką lazerio pluoštui formuoti bei optimizavus impulso energiją ir pluošto fokusavimo gylį, įmanoma slopinti sferinių aberacijų poveikį fokusuojamam lazerio pluoštui ir formuoti simetriniu skerspjūviu pasižyminčias I tipo lydyto kvarco modifikacijas, o jų pagrindu – visame regimajame spektro ruože veikiančius vienamodžius bangolaidžius ir šakotuvus, palaikančius 632,8 nm bangos ilgio Gauso modos sklidimą (1 pav.). Panaudojant Fabry – Perot interferometrinį bei "cut back" metodus, skirtus bangolaidžių šviesos sklidimo nuostoliu koeficiento matavimui, nustatyta, jog minimali šių bangolaidžių sklidimo nuostolių vertė siekia 0,79 dB/cm ir atitinka tipines nuostolių vertes, gaunamas bangolaidžius formuojant su titano safyro sistemomis, generuojančiomis <100 fs trukmės impulsus.

Šie rezultatai rodo, jog tinkamai parinkus pluošto fokusavimo sąlygas, I tipo modifikacijas (t. y. tolygų lūžio rodiklio padidėjimą be nanogardelių formavimosi) lydytame kvarce yra įmanoma įrašyti ir ilgesniais nei 180 fs impulsais, kas atveria naujas galimybes formuoti integuotos optikos ar sudėtingesnės architektūros mikrosistemas.



1 pav. Tiesioginis bangolaidžių integravimas lydytame kvarce plyšio metodu (*viršuje*). Bangolaidinių šakotuvų, veikiančių gęstančio lauko sietimi, modeliavimo (*viduryje*) (dalinimas:(a) 50 %, (b) 100 % ir (c) 0 % perkaupimo atvejis) ir eksperimentiniai rezultatai (*apačioje*).

Reikšminiai žodžiai: integruota optika, optiniai bangolaidžiai, lydyto kvarco modifikavimas, femtosekundinis mikroapdirbimas

- R. Osellame, H. J. W. M. Hoekstra, G. Cerullo, M. Pollnau, Laser Photon. Rev. 5 (3), 442–463 (2011),
- [2] C. Hnatovsky, R. S. Taylor, Appl. Phys. Lett. 87, 14104 (2005)

# Kreiva trajektorija sklindančių femtosekundinių šviesos pluoštų formavimas naudojant iš stiklo išpjautas fazines kaukes

# Forming accelerating light beams by means of phase plates cut from glass

<u>Mykolas Karpavičius</u>, Simas Butkus, Domas Paipulas, Valdas Sirutkaitis Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, 10223 Vilnius mykolas.karpavicius@ff.stud.vu.lt

Kreivomis trajektorijomis sklindantys pluoštai yra neseniai pademonstruoti šviesos pluoštai, kurie, dėl savo unikalios savybės sklisti bet kokiomis išlenktomis trajektorijomis, susilaukė didelio dėmesio įvairiose srityse. Tokių pluoštų taikymai pademonstruoti šviesos lakštų mikroskopijai, optiniam dalelių manipuliavimui bei lazeriniam mikroapdirbimui [1, 2]. Norint suformuoti kreiva trajektorija sklindantį pluoštą reikia moduliuoti Gauso pluošto bangos frontą tam tikra faze, paprastai tai atliekama naudojantis erdviniu šviesos moduliatoriumi (spatial light modulator), tačiau jie yra gana brangūs bei pasižymi žemu optinės pažaidos slenksčiu, todėl nėra optimalūs taikymui medžiagų apdirbimo tikslais. Pastaraisiais metais stebima pasaulinė didelės galios (> 100 W) femtosekundinių lazerių atsiradimo tendencija [3, 4]. Tokioms lazerinėms sistemos aukščiau aptarti pluošto manipuliavimo metodai bus praktiškai nepritaikomi, taigi atsiranda didelis poreikis naujų, alternatyvių pluošto manipuliavimo metodikų kūrimui bei tyrimams.

Šiame darbe tirta alternatyvi kreiva trajektorija sklindančių pluoštų formavimo metodika pasitelkiant iš stiklo išpjautas dvinares fazines kaukes. Naudojantis femtosekundiniu lazeriu tokias kaukes galima pagaminti greitai ir nesudėtingai, taip pat, kadangi pagamintos iš stiklo, jos turi daug aukštesnį pažaidos slenkstį nei erdviniai šviesos moduliatoriai, taigi tokio tipo fazines kaukes būtų galima taikyti ir didelės galios femtosekundinėms sistemos. Fazinių kaukių formos buvo apskaičiuotos pasitelkiant kreivomis trajektorijomis sklindančių pluoštų geometrinės optikos interpretaciją, šiuo metodu galima sukurti fazines kaukes, kuriomis suformuoti pluoštai sklinda iš anksto pasirinktomis išlenktomis trajektorijomis.

Minėtos fazinės kaukės buvo gaminamos iš 0, 1 mm storio silikatinio stiklo, tam tikrose vietose išabliuojant kiaurymes stiklo bandinyje. Eksperimentai atlikti įmonės "Šviesos Konversija" gamybos femtosekundiniu lazeriu "Carbide". Per taip apdirbtą stiklo plokštelę praleidus Gauso pluošta, jo bangos frontas yra faziškai moduliuojamas tam tikru dydžiu, dėl atsiradusio lūžio rodiklio skirtumo tarp kiaurymės (oras ,  $n \simeq 1$ ) ir likusios plokštelės dalies (stiklas,  $n \simeq 1, 5$ ). Taip moduliuoto šviesos pluošto komponentai užlinksta skirtingais kampais ir konstruktyviai interferuoja pagal iš anksto parinktą sklidimo trajektoriją. Pagamintomis kaukėmis suformuoti pluoštai buvo registruojami su ant poslinkio staliuko įtvirtinta CCD kamera. Pluoštai sklido pagal iš anksto parinktą trajektoriją ir, per 300 mm sklidimo, statmenose koordinatėse užlinksta 0,55 mm. Eksperimento rezultatai gerai sutampa su teoriškai modeliuotais rezultatais. Toks pluošto sklidimo trajektorijos manipuliavimas ateityje gali būti taikomas tūrinių modifikacijų rašymui bei jų ėsdinimui skaidriose terpėse, siekiant suformuoti kanalus pagal kreivas trajektorijas. Taip pat potencialus tokių pluoštų taikymas medžiagų abliacijos eksperimentuose, kuriuose siekiama kontroliuoti formuojamos įpjovos pasvirimo kampą.





Reikšminiai žodžiai: Airy pluoštas, kreiva trajektorija skilndantis pluoštas, fazinė kaukė

- M. A. Bandres, I. Kaminer, M. S. Mills, B. M. Rodriguez-Lara, E. Greenfield, M. Segev and D. N. Christodoulides, Opt. & Photon. News 24, 30 (2013).
- [2] A. Mathis, F. Courvoisier, L. Froehly, L. Furaro, M. Jacquot, P. A. Lacourt and J. M. Dudley, Appl. Phys. Lett. 101, 071110 (2012).
- [3] P. Russbueldt, T. Mans, M. Hermans, D. Hoffmann and D. Wortmann, Laser Technik Journal 7, 2 (2010).
- [4] P. Russbueldt, T. Mans, J. Weitenberg, H.-D. Hoffmann and R. Poprawe, Opt. Lett. 35, 4169-4171 (2010).

# Naujos kartos optiniai komponentai: nuo skaidrinančių iki aukšto atspindžio dangų

# New generation optical components: from anti- to high-reflection coatings

Tomas Tolenis<sup>1</sup>, Lina Grinevičiūtė<sup>1</sup>, Andrius Melninkaitis<sup>2</sup>, Rytis Buzelis<sup>1</sup>, Lina Mažulė<sup>2</sup>, Linas Smalakys<sup>2</sup>, Mindaugas Ščiuka<sup>2</sup>, Algirdas Selskis<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius

tomas.tolenis@ftmc.lt

Dauguma lazerinių sistemų charakteristikų yra apribotos jas sudarančių optinių komponentų atsparumo spinduliuotei, ilgaamžiškumo, spektrinių savybių ir kt. Nuolatiniai tyrimai optinių dangų srityje leidžia tobulinti plonų sluoksnių parametrus. Vienas iš pagrindinių parametrų yra lazerio spinduliuote indukuotos pažaidos slenkstis (LIPS), kuris apibūdina spinduliuotės energijos kiekį, kuriuo danga gali būti apšviesta, jos nepažeidžiant. Optinių dangų pažaidos slenksčio tyrimai vykdomi jau nuo pat lazerio atradimo. Dauguma ju apima daugiasluoksnių dangų dizaino optimizavimą ir medžiagų inžineriją. Pastaroji tiria plonų sluoksnių formavimo technologijas, jų optimizavimą, medžiagų maišyma ir t.t. Medžiagų maišymas leidžia padidinti individualių sluoksnių optinį atsparumą ir keisti jų lūžio rodiklį [1]. Optinio elemento pažaidos slenkstis paprastai yra apribotas didelio lūžio rodiklio medžiagos, kuri pasižymi mažesniu atsparumu lazerinei spinduliuotei dėl mažo draustinės juostos tarpo.

Konferencijos metu ketinama pristatyti novatorišką metodiką, kuri leidžia garinant vien didelį draustinės juosto tarpą turinčią medžiagą (SiO<sub>2</sub>) keisti individualių sluoksnių lūžio rodiklį. Tai atliekama naudojant plonų sluoksnių dengimo slystančiu kampu technologiją, kurios metu kontroliuojamas sluoksnių porėtumas keičiant garinimo kampą.

Naudojant dengimo slystančiu kampu technologiją buvo suformuotos vienasluoksnės silicio oksido dangos ir ištirtos jų charakteristikų priklausomybės nuo garinimo kampo. Buvo pastebėta, kad didinant garinimo kampą didėja dangos porėtumas ir lazerinės pažaidos slenkstis UV spektrinėje srityje. Pastarieji tyrimai leido suformuoti naujos kartos optinius komponentus, pasižyminčius dideliu optiniu atsparumu.

Nanostruktūrinio silicio oksido pagrindu buvo suformuotos įvairaus spektro skaidrinančios dangos: plačiajuostės, plačiakampės ir daugiabangės. Lyginant jas su standartinėmis metodikomis suformuotomis skaidrinančiomis dangomis buvo pastebėta, kad iš porėto silicio oksido suformuotos dangos pasižymi mažesniais įtempiais ir ženkliai didesnėmis LIPS vertėmis. Pažeidimo slenkstis ties 355 nm banga siekė 15 J/cm<sup>2</sup> matuojant nanosekundžių trukmės impulsiniu lazeriu [2]. Tokios dangos gali būti dengiamos tiek ant stiklo padėklų, tiek ant netiesių kristalų.

Tyrimo metu taip pat buvo suformuota aukšto atspindžio danga, naudojant vien SiO<sub>2</sub> medžiagą. Ši novatoriška technologija leido išvengti mažą draustinės juostos tarpą turinčių sluoksnių, kurie paprastai yra

visos dangos pažaidos priežastis. Tokių daugiasluoksnių dangų sukūrimas leidžia atverti naujus kelius optinių dangų, naudojamų didelių galių lazerinėse sistemose, srityje. Nanostruktūrinio silicio oksido pagrindu suformuotos aukšto atspindžio dangos pasižymėjo itin aukštu optiniu atsparumu. Tiriant vidinį dangos pažeidimo slenkstį, buvo nustatyta, kad jis siekia daugiau nei 60 J/cm<sup>2</sup>.

Išsamesni tyrimai taip pat atskleidė, kad tokių porėtų dangų spektras priklauso nuo aplinkos sąlygų. Tai lėmė kombinuotos metodikos tyrimų atsiradimą. Jų metu jonapluoščio dulkinimo technologija suformuoti veidrodžiai yra padengiami nuo kelių iki kelių dešimčių sluoksnių nanostruktūrinio SiO<sub>2</sub> pagrindu. Tokios hibridinės dangos pasižymi spektriniu stabilumu ir didesne LIPS verte.

Apibendrinant, dengimo slystančiu kampu technologija buvo suformuotos tiek skaidrinančios, tiek aukšto atspindžio optinės dangos, garinant vien SiO<sub>2</sub> medžiagą. Abiejų tipų dangos pasižymi ženkliai didesnėmis LIPS vertėmis lyginant su standartinėmis dangomis. Ši metodika leidžia formuoti naujos kartos optinius komponentus, naudojamus didelės galios lazerinėse sistemose.



1 pav. Nanostruktūrinio silicio oksido pagrindu suformuoto veidrodžio skerspjūvio SEM nuotrauka

Reikšminiai žodžiai: optinės dangos, dengimas slystančiu kampu, silicio dioksidas, lazeriu indukuotos pažaidos slenkstis.

- [1] A. Melninkaitis, T. Tolenis, L. Mažulė, et al. Apl. Opt. 50(9), C188 (2011).
- [2] T. Tolenis, L. Grinevičiūtė, R. Buzelis, et al. Opt. Mat. Exp. 7(4), 1249 (2017).

# Žodinė sesija 5B

Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika
### Elektronų dreifo greitis legiruotame ZnO

#### Electron drift velocity in doped ZnO

L. Ardaravičius, O. Kiprijanovič, M. Ramonas, E. Šermukšnis, J. Liberis, A. Matulionis Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius linas.ardaravicius@ftmc.lt

Plataus draustinio tarpo puslaidininkiai yra perspektyvūs daugelyje didelės galios elektronikos sričių. Tradicinių deimanto, silicio karbido ir nitridų lauko efekto tranzistorių (*FET*) panaudojimą aiškiai riboja aukšta savikaina. Alternatyvą siūlo oksidai, tarp jų ir cinko oksidas (ZnO). Tikėtina, kad ateityje ZnO epitaksnių darinių kokybė bus aukštesnė, ir ZnO prietaisai bus plačiai naudojami centimetrinių bei milimetrinių bangų elektronikoje [1].

Šiame darbe tirti epitaksiniai ZnO sluoksniai, užauginti molekulinio pluoštelio plazminės epitaksijos būdu ant safyro padėklų a-plokštumos. Galiu legiruoto ZnO epitaksinių sluoksnių plotis  $w = 250-300 \ \mu m$ , storis  $d = 170-380 \ nm$ . Elektronų judris ir trimatis tankis legiruotame kanale (1 lentelė) buvo įvertinti iš Holo matavimų. Koplanariniai Ti/Au (25 nm/50 nm) elektrodai buvo padaryti naudojant fotolitogafiją. Kontaktinė varža buvo įvertinta pamatavus bandinio varžos priklausomybę nuo kanalo ilgio.

1 lentelė. Legiruotų ZnO kanalų savybės kambario temperatūroje.

Kanalo storis	Elektronų tankis	Elektronų judris
<i>d</i> (nm)	$n ({\rm cm}^{-3})$	$\mu$ (cm <sup>2</sup> /Vs)
340	$1,4x10^{17}$	106
220	$2,0x10^{17}$	85
350	$5,5 \times 10^{17}$	73
300	$4,9x10^{18}$	23
200	$1 \times 10^{19}$	57
200	$1,1x10^{19}$	66
170	$1,7x10^{19}$	27
240	$1,1x10^{20}$	48
380	$5,7x10^{20}$	40

Nanosekundinių elektrinių impulsų tyrimų stendas, sukurtas nitridų protakoms tirti [2], buvo pritaikytas donorais legiruotų ZnO epitaksinių sluoksnių tyrimui. Voltamperinės charakteristikos buvo išmatuotos plačiame elektrinių laukų ruože (iki 240 kV/cm), naudojant 2 ns trukmės elektrinius impulsus. Elektronų dreifo greitis  $v_{dr}$  (1 pav.) buvo įvertintas gana plačiame elektronų tankio intervale: nuo 1,4x10<sup>17</sup> cm<sup>-3</sup> iki 5,7x10<sup>20</sup> cm<sup>-3</sup> manant, kad elektronų tankis *n* matavimo metu nekinta:  $v_{dr} = I/(enwd)$ , kur *I* yra per bandinį tekanti srovė ir *e* yra elektrono krūvis.

Šiame darbe didžiausias greitis  $v_{drmax} = 2,2x10^7$  cm/s pasiektas ZnO sudarant 210-240 kV/cm elektrinio lauko stiprį. Šis greitis beveik trigubai viršija publikuotą didžiausią eksperimentinę vertę, pasiektą nominaliai nelegiruotame ZnO (7.6x10<sup>6</sup> cm/s ties 95 kV/cm [3]) naudojant sąlyginai ilgesnius elektrinius impulsus (300ns). Eksperimentiškai įvertinta  $v_{drmax}$  vertė legiruotame ZnO yra palyginama su  $v_{drmax}$  InGaN/GaN protakose [2].

Mažuose elektronų tankiuose išmatuotos didelės dreifo greičio vertės ZnO yra sietinos su maža savaiminio pakaitimo (Džaulio šilumos) įtaka, stiprėjančia didėjant elektronų tankiui. Kita vertus, tankiui didėjant stiprėja priemaišinė sklaida.

Monte Karlo skaičiavimai rodo, kad priemaišinė sklaida būna stipriausia silpnuose elektriniuose laukuose ir silpnėja elektronams kaistant, tačiau išlieka svarbi visame elektrinių laukų ruože. Palyginti siaurame elektronų tankio ruože (1-1.1x10<sup>19</sup> cm<sup>-3</sup>) yra stebimas didesnis dreifo greitis [4], kuris yra siejamas su santykinai dideliu judriu tirtuose dariniuose (1 lentelė).



1 pav. Elektronų dreifo greičio priklausomybė nuo elektrinio lauko stiprio ZnO kambario temperatūroje esant skirtingiems elektronų tankiams:  $2,4x10^{16}$  cm<sup>-3</sup> ([3], trikampiai),  $1,4x10^{17}$  cm<sup>-3</sup> ([4], žvaigždės),  $2,0x10^{17}$  cm<sup>-3</sup> (kvadratai). Elektrinio impulso trukmė 300 ns [3], 2ns ([4], šis darbas).

Reikšminiai žodžiai: elektrinio lauko stipris, nanosekundiniai elektriniai impulsai, elektronų dreifo greitis, elektronų tankis, Monte Karlo skaičiavimai

- [1] H. Morkoç, U. Özgur, Zinc Oxide: Fundamentals, Materials and Device Technology (Wiley-VCH, Weinheim, 2009).
- [2] L. Ardaravičius, O. Kiprijanovič, J. Liberis, A. Matulionis, R. A. Ferreyra, V. Avrutin, Ü. Özgür, and H. Morkoç, *Semicond. Sci. Technol.*, **30**(10), 105016 (2015).
- [3] S. Sasa, T. Maitani, Y. Furuya, T. Amano, K. Koike, M. Yano, and M. Inoue, *Phys. Status Solidi A* 208, 449 (2011).
- [4] L. Ardaravičius, O. Kiprijanovič, J. Liberis, E. Šermukšnis, A. Matulionis, M. Toporkov, V. Avrutin, U. Özgur, and H. Morkoç, *Mater. Res. Express*, 4, 066301 (2017).

# Krūvinikų difuzijos ir rekombinacijos režimai iš garų fazės nusodintuose švino halogenidų perovskituose

# Regimes of carrier diffusion and recombination in vapor deposited lead-halide perovskites

<u>P. Ščajev</u><sup>1</sup>, R. Aleksiejunas<sup>1</sup>, S. Miasojedovas<sup>1</sup>, S. Nargelas<sup>1</sup>, M. Inoue<sup>2</sup>, C. Qin<sup>2,3</sup>, T. Matsushima<sup>2-4</sup>, C. Adachi<sup>2-4</sup>, and S. Juršėnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Taikomųju mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius

<sup>2</sup>Center for Organic Electronics and Photonics Research, Kyushu University 744, Motooka, Nishi-ku, Fukuoka 819-0395, Japan

<sup>1</sup>International Institute for Carbon Neutral Energy Research (WPI-I2CNER), Kyushu University, 744 Motooka, Nishi, Fukuoka 819-0395, Japan

<sup>1</sup>Japan Science and Technology Agency (JST), ERATO, Adachi Molecular Exciton Engineering Project, 744 Motooka, Nishi, Fukuoka 819-0395, Japan

patrik.scajev@ff.vu.lt

Metal halide perovskites are attractive materials for realization of cheap and effective solar cells, thin film transistors, and light emitters [1]. Carrier diffusion at high excitations, however, is poorly addressed in perovskites, even though it governs the diffusion length and determines the efficiency of a photonic device. To fully understand the diffusion length dependence on carrier density, we performed direct and independent measurements of carrier diffusivity and recombination rate in several metylamonium lead-halide perovskite layers by applying the light-induced transient grating technique. We demonstrate the existence of two distinct carrier diffusion regimes within the density range of  $10^{18} - 10^{20}$  cm<sup>-3</sup>.

The carrier diffusivity increased with photoexcitation in all samples at densities above 10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup> due to two different physical mechanisms. In iodide and bromide layers, where diffusion coefficient was high even at low densities  $(0.7 \text{ cm}^2/\text{s})$ , the increase in diffusivity was moderate and caused by carrier degeneracy. In contrast, the mixed and chloride layers with a small low-density diffusivity  $(0.01 - 0.04 \text{ cm}^2/\text{s})$  exhibited almost linear increase of D due to saturation of carrier traps and consequent carrier de-localization. On the other hand, the carrier lifetime decreased with excitation due to band-to-band radiative recombination and density-dependent nonradiative process. Assuming that latter is Auger recombination and accounting for the saturation of recombination coefficients due to state filling, we determined the non-degenerate values of bimolecular recombination coefficient  $(1-7) \times 10^{-10}$  cm<sup>3</sup>/s coefficient and Auger recombination  $(1.4-4.5) \times 10^{-28}$  cm<sup>6</sup>/s. Finally, we demonstrate that two scenarios are possible where diffusion length either increases or drops with excitation, which is determined by compositional and structural quality of material, point defect density, and character of carrier diffusion.

From the application point of view, these results show that different strategies have to be used for performance optimization of various perovskites. In the mixed and chloride perovskites, there is a room for improvement of diffusion length via optimization of crystalline and compositional quality. In particular, chlorine related point defects have to be eliminated in order to enhance the lifetime of carriers. On the other hand, the diffusion length in high quality iodide and bromide perovskites is limited by fundamental processes of nonlinear recombination at high carrier densities; therefore, operation at lower drive currents is preferable where maximum diffusion length is required.



Fig. 1. Diffusion coefficient D determined from the light-induced transient grating transients as a function of photoexcited carrier density  $\Delta N$  in different perovskite layers.

Keywords: lead-halide perovskites, carrier diffusion, light induced transient grating, time-resolved photoluminescence, carrier recombination.

#### References

[1] Z. Xiao, R.A. Kerner, L. Zhao, N.L. Tran, K.M. Lee, T.-W. Koh, G.D. Scholes, B.P. Rand, Efficient perovskite light-emitting diodes featuring nanometre-sized crystallites, Nat. Photonics. (2017).

#### Bismuto nanokristalitai atkaitintose GaAsBi/AlAs kvantinėse duobėse

#### Bismuth nanoparticles in thermally annealed GaAsBi/AlAs quantum wells

<u>E. Pozingytė</u>, R. Butkutė, B. Čechavičius, G. Niaura, M. Skapas, A. Selskis, V. Karpus, A. Krotkus Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

evelina.pozingyte@ftmc.lt

Kietieji GaAsBi lydiniai plačiai tiriami dėl jų perspektyvumo optoelektroninėje inžinerijoje [1, 2]. Siekiant į GaAs įterpti didesnį nei 5 % Bi kiekį, molekulių pluoštelio epitaksiniai (MBE) sluoksniai yra auginami žemose temperatūrose. Tai žemina bandinių struktūrinę kokybę, didina nespindulinės rekombinacijos centrų koncentraciją, mažina fotoliuminescencijos (PL) intensyvumą. Standartinis struktūrinių defektų eliminavimo būdas yra atkaitinimas aukštesnėje nei auginimo temperatūroje. Tačiau atkaitinimo efektas GaAsBi sluoksniams nėra trivialus [3, 4], esant atkatinimo temperatūrai  $T > 600^{\circ}$  C, jis sąlygoja bismuto nanoklasterizaciją.

Šiame darbe buvo tirtos dviejų tipų GaAsBi/AlAs multi-kvantinės duobės (QWs), kurios buvo užaugintos kombinuotu MBE ir migraciją skatinančios epitaksijos (*migration-enhanced epitaxy*, MEE) metodu ant pusiau izoliuojančių GaAs (100) padėklų. Pirmojo tipo bandinį (A) sudaro trys 10 nm ir viena 20 nm pločio kvantinės duobės, atskirtos 20 nm AlAs barjerais. Antrojo tipo bandinį (B) sudaro dvidešimt 10 nm pločio QWs su 5 nm AlAs barjerais. Abu bandiniai po MBE auginimo buvo 180 s atkaitinti 750° C temperatūroje. Bandiniai buvo tirti naudojant aukštos skyros peršviečiamąją elektroninę mikroskopiją (HRTEM), Ramano spektroskopiją ir fotoliuminescenciją. (PL matavimai buvo atlikti 3 – 300 K temperatūrų intervale.)

Elektroninė HRTEM mikroskopija akivaizdžiai atskleidė (žr. intarpą 1 pav.), kad bandinių atkaitinimas sąlygoja nanoklasterių formavimąsi. Klasterių diametrai koreliuoja su GaAsBi kvantinių duobių pločiais A- ir Bbandiniuose. TEM elementinės sudėties tyrimai ir Ramano spektroskopija parodė, kad nanoklasteriai, kvantiniai taškai (QDs), sudaryti iš gryno Bi.

Fotoliuminescencijos tyrimų rezultatus iliustruoja 1 pav., kuriame pateikiami B-bandinio kambario temperatūros PL spektrai prieš atkaitinimą ir po jo. Kaip matyti, atkaitinimas stipriai mažina defektų skaičių,– fotoliuminescencijos intensyvumas ženkliai didėja. Žemų fotono energijų srityje ( $1.3 - 1.7 \mu m$ ) atsiranda papildoma PL smailė, kuri, natūralu, gali būti siejama su emisija iš susiformavusių Bi kvantinių taškų.

Darbe atlikti fotoliuminescencijos temperatūrinės priklausomybės tyrimai atskleidė, kad papildomoji PL smailė turi savo vidinę struktūrą, – ji sudaryta iš trijų komponenčių, centruotų (3 K temperatūroje) ties 0.67, 0.88 ir 0.98 eV. A-tipo bandinyje smailės struktūra yra stipriau išreikšta, B-bandinyje dominuoja 0.85 eV komponentė, sietina su 10 nm Bi kvantiniais taškais.

Atlikti teoriniai Bi energijos spektro įvertinimai parodė, kad dėl dimensinio kvantavimo efektų mažų diametrų (d < 15 nm) Bi kvantiniai taškai tampa tiesioginiais puslaidininkiais. Efektinis draustinių energijų tarpas 10 nm kvantiniuose taškuose yra maždaug 0.76 eV, artimas eksperimentinei papildomos PL smailės padėčiai. Tai patvirtina prielaidą, kad papildomą PL smailę sąlygoja optiniai šuoliai bismuto kvantiniuose taškuose.

Reikšmingas eksperimentiškai atskleistas papildomosios PL smailės ypatumas yra tas, kad jos spektrinė padėtis (tirtame temperatūriniame 3 – 300 K intervale) labai silpnai priklauso nuo temperatūros (smailės Varshni parametrai yra kelis kartus žemesni lyginant su jų vertėmis įprastiniuose puslaidininkiuose). Tai svarbus nagrinėjamų struktūrų privalumas, turint omenyje jų projektavimą optoelektroniniams prietaisams telekomunikacinių bangos ilgių ruože.

Šis darbas buvo remiamas LMT (nr. MIP-71/2015, "Bismuto kvantiniai taškai GaAs matricoje" BiNano).



1 pav. GaAsBi/AlAs multi-QWs bandinio PL spektrai prieš atkaitinimą ir po jo. Intarpas – atkaitinto bandinio HRTEM mikrografija.

Reikšminiai žodžiai: GaAsBi, bismuto kvantiniai taškai, fotoliuminescencija

- K. Bertulis, A. Krotkus, G. Aleksejenko, V. Pačebutas, R. Adomavičius, G. Molis, S. Marcinkevičius, Appl. Phys. Lett. 88, 201112 (2006).
- [2] I. P. Marko, C. A. Broderick, S. Jin, P. Ludewig, W. Stolz, K. Volz, J. M. Rorison, E. P. O'Reilly, S. J. Sweeney, Sci. Rep. 6, 28863 (2016).
- [3] M. Wu, E. Luna, J. Puustinen, M. Guina, A. Trampert, Nanotechnology 25, 205605 (2014).
- [4] R. Butkutė, M. Skapas, A. Selskis, V. Bukauskas, S. Stanionytė, G. Niaura, Lith. J. Phys. 57 (2017).

# Hibridinių metalo-formiato perovskitų tyrimai elektronų paramagnetinio rezonanso spektroskopija

## Electron paramagnetic resonance spectroscopy of hybrid metal-formate perovskites

Mantas Šimėnas<sup>1</sup>, Monika Gusowska<sup>2</sup>, Miroslaw Maczka<sup>2</sup>, Georg Völkel<sup>3</sup>, Andreas Pöppl<sup>3</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania <sup>2</sup>Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences, P.O. Box 1410, PL-50-950

Wroclaw 2, Poland

<sup>3</sup>Faculty of Physics and Earth Sciences, Universität Leipzig, Linnestrasse 5, D-04103 Leipzig, Germany <u>mantas.simenas@ff.vu.lt</u>

Lately, novel hybrid materials called metal-organic frameworks (MOFs) emerged and immediately attracted attention of the scientific community. These crystalline compounds are unique due to the high degree of porosity which can be utilized for gas adsorption related applications. Additionally, many MOFs containing paramagnetic transition-metal ions exhibit peculiar magnetic properties. The organic part in several of such compounds consists of polar molecules which below a certain phase transition temperature order into a ferroelectric-type phase, making these materials single-phase hybrid multiferroics [1].

The most interesting class of MOFs that exhibit ferroelectric-like properties is metal-formate frameworks [A][Zn(HCOO)<sub>3</sub>], where  $A^+$  is a molecular cations such as dimethylammonium (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NH<sub>2</sub><sup>+</sup>. These compounds consists of metal-oxygen octahedra that are linked by the formate anions into cuboid cavities. Each cavity contains a single  $A^+$  cation which forms H-bonds with the framework (Fig. 1). Usually, these materials exhibit structural phase transitions that involve ordering of these cations.

We use EPR, ENDOR and dielectric spectroscopic techniques to investigate and characterize the ferroelectric-like phase transitions in manganese and copper doped [A][Zn(HCOO)<sub>3</sub>] metal-formates based on the perovskite architecture (Fig. 1). Here A<sup>+</sup> is NH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub><sup>+</sup> or (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NH<sub>2</sub><sup>+</sup> molecular cations. The temperature dependent continuous-wave EPR spectra reveal that the local paramagnetic ion-probes are indeed sensitive to the local structural changes occurring at the phase transitions. Spectral simulations are used to obtain the g, hyperfine A and fine structure D tensors at different temperatures. This allows us to probe the temperature dependence of the local order parameter and to characterize the observed phase transitions [2,3]. Pulse EPR and ENDOR measurements are performed to study structure of the framework, lattice dynamics and motion of the molecular cations in the low temperature phases. The magnetic resonance methods are complemented by the dielectric spectroscopy of MOF single crystal samples providing information about the nature of the phase transitions and dynamics of the molecular cations.



Fig. 1 Structural motifs of dimethylammonium and methylhydrazinium zinc-formate frameworks.

Reikšminiai žodžiai: elektronų paramagnetinis rezonansas, hibridiniai perovskitai, faziniai virsmai.

- [1] P. Jain, N.S. Dalal, B.H. Toby, H.W. Kroto, and A.K. Cheetham, J. Am. Chem. Soc. 130, 10450 (2008).
- [2] M. Šimėnas, A. Ciupa, M. Maczka, A. Poppl, and J. Banys, J. Phys. Chem. C 119, 24522 (2015).
- [3] M. Šimėnas, S. Balčiūnas, M. Trzebiatowska, M. Ptak, M. Maczka, G. Volkel, A. Poppl, and J. Banys, J. Mat. Chem. C 5, 4526 (2017).

# Žodinė sesija 6A

Biofizika ir medicinos fizika

#### Pavienių molekulių fluorescencinė ir FRET mikroskopija DNR ir baltymų sąveikos tyrimams

## Single-molecule fluorescence and FRET microscopy for DNA - protein interaction studies

Marijonas Tutkus<sup>1</sup>, Giedrė Karzaitė<sup>1</sup>, Šarūnė Ivanovaitė<sup>1</sup>, Tomas Marčiulionis<sup>1</sup>, Danielis Rutkauskas<sup>1</sup>, Mindaugas

Zaremba<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Biotechnologijos Institutas, Saulėtekio al. 7, 10257 Vilnius <sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

marijonas.tutkus@ftmc.lt

Per daugiau nei 20 metų, nuo pirmųjų pritaikymų biofizikiniuose tyrimuose, pavienių molekulių (PM) fluorescencijos metodai subrendo ir išsiplėtojo leisdami atsakyti į daugelį biologinių klausimų, į kuriuos atsakymų nebuvo rasta naudojant ansamblio tipo matavimo metodus. Šiuo metu PM fluorescencijos metodai naudojant Fiorsterio rezonansinę energijos pernašą (FRET) ir kitus principus leidžia stebėti dinamines nukleorūgščių ir baltymų sąveikas, tirti konformacinę baltymų dinamiką, sekti individualių biomolekulių ir kitų nanometrinių dydžių biologinių kompleksų judėjimą mikroniniais atstumais ir atskleisti sukamuosius kompleksinių sistemų judesius [1]. Šiuo metu vykstant perėjimui iš in vitro į in vivo ir in situ salygas, yra tikimasi kad PM fluorescencijos ir FRET metodai taps plačiai naudojamu įrankiu molekulinėje biologijoje [2]. Pranešimo metu aptarsiu PM fluorescencinės mikroskopijos metodus, reikalavimus keliamus šiems matavimams, bei technologinius proveržius ir iškylančias problemas.

Taip pat pranešimo metu pristatysiu mūsų laboratorijoje atliekamus PM fluorescencinės mikroskopijos tyrimus, kurie šiuo metu fokusuojasi į mechanistinį Restrikcijos endonukleazių (REazės) ir DNR sąveikų išaiškinimą. REazės saugo bakterijas nuo neigiamo virusinės DNR poveikio. Antrojo tipo REazės atpažįsta 4 - 8 bazių porų ilgio taikinius esančius virusinėje DNR ir juos perkerpa pusiau. Tokiu būdu virusinė DNR yra inaktyvuojama. Daugelis II-ojo tipo REazių vykdo efektyvų DNR karpymą tik prisijungusios prie dviejų DNR taikinių [4]. Vienu metu vykstanti tokio tipo edonukleazės sąveika su dviem DNR taikiniais galiausiai suformuoja DNR kilpą (1 pav.). Pristatysiu mūsų išvystytą PM FRET mikroskopijos metodika DNR ir baltymo saveikos tyrimams [5, 3]. Ji leido atlikti kiekybinius Ecl18kI REazės ir ant paviršiaus imobilizuotų DNR molekulių dinaminės sąveikos tyrimus. Taip pat pristatysiu naujus BfiI (BfiI K107A ir BfiI-SS) ir DNR sąveikos PM FRET mikroskopijos tyrimų rezultatus.

Pavienių molekulių FRET matavimams pritaikėme gerai veikiančią strategiją: biotinilintas ir FRET dažiklių pora pažymėtas DNR molekules imobilizavome ant silanizuoto ir metoksi-PEG bei biotin-PEG modifikuoto dengiamojo stiklelio per neutravidiną. Susiformavus DNR kilpai dažikliai esantys prie REazės taikinių suartėja ir donoro fluorescencijos energija rezonansiniu būdu yra pernešama į akceptorių (1 pav.). Pernašos efektyvumas priklauso nuo atstumo tarp šių dažiklių. Šis metodas leidžia matuoti atstumą tarp dažiklių nuo 2 iki 10 nanometrų. Mes parodėme, kad du ant DNR prisijungę Ecl18kI dimerai formuoja tetramerą ir kilpoja DNR tokiu greičiu, kuris yra keliomis eilėmis lėtesnis nei difuzijos greitis. Taip pat mūsų išvystyta matavimo metodika leido atskirti ir charakterizuoti dviejų tipų DNR kilpas. Mūsų atlikti BfiI tyrimai parodė, kad vienas dimeras prisijungia du taikinius esančius ant vienos DNR molekulės ir taip suformuoja vieno tipo DNR kilpą. BfiI aktyvaus centro mutantas (K107A) parodė skirtingą dinaminę sąveiką su DNR, nei užrakintas BfiI-SS baltymas.



1 pav. Tetramerinės REazės Ecl18kI indukuoto DNR kilpojimo tyrimų naudojant PM fluorescencinės mikroskopijos ir FRET schema. FRET dažiklių pora žymėtas, du Ecl18kI prisijungimo taikinius turintis biotinilintas DNR fragmentas per Neutravidiną yra prijungiamas prie metoxy-PEG ir Biotin-PEG mišiniu padengto stiklelio. Prie kiekvieno iš taikinių prisijungia po Ecl18kI dimerą, kurie tarpusavyje sąveikaudami suformuoja DNR kilpą. Ecl18kI atpažįsta palindrominę taikinio seką, todėl DNR kilpa gali susiformuoti dviejų tipų (U formos ir phi formos). Mūsų išvystytas PM fluorescencinės mikroskopijos tyrimo metodas leido realiu laiku stebėti kiekvienos iš šių kilpų dinamiką [5].

Reikšminiai žodžiai: FRET, pavienės molekulės, DNR baltymo sąveika, Restrikcijos endonukleazės

- C. Joo, H. Balci, Y. Ishitsuka, C. Buranachai, and T. Ha, Annu. Rev. Biochem 77: 51-76 (2008).
- [2] M. Sustarsic and A. N. Kapanidis, Curr Opin Struct Biol. 34: 52-9 (2015).
- [3] D. Rutkauskas, M. Petkelyte, P. Naujalis, G. Sasnauskas, G. Tamulaitis, M. Zaremba, and V. Siksnys, J Phys Chem B. 118(29): 8575-82 (2014).
- [4] M. Zaremba, and V. Siksnys, Biochemistry 54(34): 5340-7 (2015).
- [5] M. Tutkus, T. Marciulionis, G. Sasnauskas, and D. Rutkauskas, Biophys J. 112(5): 850-858 (2017).

#### Mezenchiminių ir vėžinių kamieninių ląstelių atsakas į nanodalelių poveikį

#### Mesenchymal stem cell and cancer stem-like cell response to nanoparticle treatment

Dominyka Dapkutė<sup>1,2</sup>, Simona Steponkienė<sup>1</sup>, Ričardas Rotomskis<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Biomedicininės Fizikos Laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas, P. Baublio g. 3b, LT-08406, Vilnius

<sup>2</sup>Biomokslų institutas, Gyvybės mokslų centras, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 7, LT-10257, Vilnius

<sup>3</sup>Biofotonikos grupė, Lazerinių tyrimų centras, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, III-tieji rūmai, LT-10222, Vilnius

dominyka.dapkute@nvi.lt

Neseniai buvo suprasta, kad vėžinis audinys, taip pat kaip ir sveiki organai, turi nedidelę dalį nespecializuotu ląstelių, kurios, dėl panašumo į kamienines lasteles, buvo pavadintos vėžinėmis kamieninėmis ląstelėmis (VKL). Šios nedidelę naviko subpopuliaciją sudarančios ląstelės geba atsinaujinti, diferencijuotis bei neribotai dalintis ir yra atsakingos už vėžio atsiradimą, jo vystymąsi, metastazes ir atsparumą gydymui. Todėl norint gerinti navikinių darinių diagnostiką ir terapiją, būtina vystyti kartos teranostiką, nukreiptą VKL. nauios į Nanomedicina dėl savo išskirtinių savybių buvo pasiūlyta kaip vienas sprendimų - nanodalelės nuo molekulių skiriasi unikaliomis fizikocheminėmis savybėmis bei dideliu ir lengvai modifikuojamu paviršiumi, prie kurio galima prijungti įvairias sinergiškai veikiančias biomolekules - antikūnus, chemoterapinius vaistus ar fotosensibilizatorius.

Savo ankstesniuose darbuose tyrėme lastelių atsaką į kvantinius taškus (KT) - puslaidininkines nanodaleles, pasižyminčias fotoliuminescencija. Nefunkcionalizuotoms nanodalelėms trūksta selektyvumo, tad patikrinome kvantinių taškų ir antikūnų prieš VKL antigeną CD44 konjugatų (KT-CD44) susikaupimo efektyvumą VKL. Gauti konfokalinės mikroskopijos rezultatai parodė, jog antikūnai lėmė nanodalelių selektyvesnį susikaupimą VKL palyginus su susikaupimu vėžinėse nekamieninėse ląstelėse (1 pav). KT-CD44 konjugatas ne tik specifiškai atpažino VKL, bet ir buvo įtrauktas į ląstelių vidų (1 pav.) [1].



1 pav. Antikūnų, konjuguotų su KT arba organiniu fluoroforu fluoresceino izotiocianatu (FITC), principinė schema (kairėje) ir konfokalinės mikroskopijos nuotraukos, rodančios konjugatų susikaupimą ir lokalizaciją vėžinėse nekamieninėse ir vėžinėse kamieninėse ląstelėse. Mėlyna spalva nudažyti ląstelių branduoliai.

Tačiau net konjugavus nanodaleles su VKL specifišku antikūnu susiduriama su problema, kad VKL antigenai randami ir ant sveikų ląstelių paviršiaus. Todėl kilo idėja panaudoti ląstelinius nanodalelių nešiklius, kurie turi įgimtą polinkį migruoti link uždegimų, žaizdų ir navikų. Vienos iš tokių ląstelių yra mezenchiminės kamieninės ląstelės (MKL), nedideliais kiekiais randamos beveik visuose organuose. Tolimesniuose darbuose tyrėme, ar iš odos išskirtos MKL gali būti panaudotos KT nugabenimui į navikus. Pirmiausiai nustatėme, kad KT ląstelėms netoksiški, jose kaupiasi greitai, efektyviai ir patenka į ląsteles endocitozės būdu (2 pav.).



2 pav. Konfokalinės mikroskopijos nuotraukos, rodančios KT susikaupimą ir lokalizaciją MKL. Mėlyna – ląstelių branduoliai, žalia – citoskeletas, raudona – KT. Skalė 15 μm.

Vėliau tyrėme *in vitro* ląstelių migraciją link vėžinių ląstelių ir link žmogaus krūties navikų modelių imunodeficitinėse pelėse *in vivo*. Gavome, kad MKL selektyviai nugabeno nanodaleles tik į VKL, bet ne sveikus audinius. Tokie rezultatai rodo, kad nanodalelėmis žymėtos MKL galėtų būti sėkmingai pritaikytos navikų vaizdinimui ir terapijai.

Reikšminiai žodžiai: nanomedicina, kvantiniai taškai, taikinių terapija, vėžinės kamieninės ląstelės, mezenchiminės kamieninės ląstelės.

#### Literatūra

 Steponkiene S, Dapkute D, Riekstina U, Rotomskis R. Accumulation and Distribution of Non-targeted and Anti-CD44-conjugated Quantum Dots in Distinct Phenotypes of Breast Cancer. J Nanomed Nanotechnol 6:341 (2015).

# Žodinė sesija 6B

Astrofizika, astronomija, kosmologija ir kt.

# Spektroskopinė ir fotometrinė šiaurinio dangaus apžvalga EKA PLATO kosminei misijai

# Spectroscopic and Photometric Survey of Northern Sky for the ESA PLATO Space Mission

<u>Šarūnas Mikolaitis</u><sup>1</sup>, Gražina Tautvaišienė<sup>1</sup>, Arnas Drazdauskas<sup>1</sup>, Renata Ženovienė<sup>1</sup>, Erika Pakštienė<sup>1</sup>, Rimvydas Janulis<sup>1</sup>, Vilius Bagdonas<sup>1</sup>, Lukas Klebonas<sup>1</sup> <sup>1</sup>Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius, Lietuva Sarunas.Mikolaitis@tfai.vu.lt

Europos kosmoso agentūros PLATO 2.0 misija [1] atliks išsamius plačių dangaus laukų tyrimus ieškant už Saulės sistemos ribų esančių į Žemę panašių planetų. Ruošiantis misijai reikia sudaryti perspektyviausių stebėjimo objektų katalogą, žinoti pagrindinius kiekvienos žvaigždės parametrus: efektinę temperatūra, gravitacijos pagreitį jos paviršiuje, metalingumą, cheminę sudėtį, kintamumo informaciją ir fotometrinius duomenis. PLATO objektai bus ryškios žvaigždės, bet informacijos vis tiek trūksta, net Gaia observatorija [2] negalės pateikti visų reikalingų duomenų.



1 pav. Vienas iš šiaurinių PLATO 2.0 laukų, kuriame atliekami tyrimai Molėtų AO.

Šiame kontekste VU TFAI Molėtų astronomijos observatorijos (MAO) turima stebėjimų įranga yra labai naudinga antžeminiam PLATO misijos parengimui šiauriniame danguje, todėl nuo 2016 m. čia vykdomas SPFOT-PLATO projektas. Pagrindiniams žvaigždžių atmosferų parametrams nustatyti pasirinktame PLATO lauke (1 pav.) tiriame ryškesnių nei 8 ryškio žvaigždžių spektrus su 1.65 m Casegreno tipo teleskopu ir didelės skiriamosios gebos VUES spektrografu, kuris apima 400–880 nm bangų ilgių intervalą su skiriamąja geba iki R=60 000 [4], (*http://mao.tfai.vu.lt*). Žvaigždžių kintamumo tyrimams naudojame CCD fotometerą ant 35/51 cm plataus lauko Maksutovo tipo teleskopo. Įdomiausioms žvaigždėms atliksime vienalaikius spektrinius ir fotometrinius stebėjimus.



2 pav. Su VUES spektrografu stebėto didelės skiriamosios gebos (R=60 000) spektro pavyzdys.

Mes jau stebėjome per 200 žvaigždžių spektrų. Naudodami Gaia-ESO apžvalgos metodologiją [3, 5] nustatėme pagrindinius atmosferų fizikinius parametrus ir detalią cheminę sudėtį visoms lėčiau nei  $v \sin i < 20 \text{ km s}^{-1}$  besisukančioms žvaigždėms. Pagal fotometrinius stebėjimus jau pavyko atrasti per 20 ilgo periodo kintamų žvaigždžių, kurios iki šiol nebuvo žinomos.

*Tyrimą finansuoja Lietuvos Mokslo Taryba* (sutarties Nr. LAT-08/2016).

Reikšminiai žodžiai: Žvaigždės:cheminė sudėtis, žvaigždės:osciliacijos

- Ricker, G. R., Winn, J. N., Vanderspek, R. et al. 2015, Journal of Astronomical Telescopes, Instruments, and Systems, 1, id. 014003
- [2] Gaia Collaboration, Prusti, T., de Bruijne, J. H. J., et al. 2016, A&A, 595, A1
- [3] Gilmore, G., Randich S., Asplund, M. et al. 2012, The Messenger, 147, 25
- [4] Jurgenson, C., Fischer, D., McCracken, T., Sawyer, D., Giguere, M., Szymkowiak, A., Santoro, F., Muller, G. 2016, *Journal* of Astronomical Instrumentation, 5, id. 1650003-239
- [5] Smiljanic, R., Korn, A. J., Bergemann, M. et al. 2014, A&A, 570, A122

#### Jauno geologinio aktyvumo požymiai Mėnulio paviršiuje

### New evidence for recent geologic activity on the surface of the Moon

Adomas Valantinas<sup>1</sup>, Kjartan Munster Kinch<sup>1</sup>, Audrius Bridžius<sup>2</sup> <sup>1</sup>University of Copenhagen, Niels Bohr Institute, Øster Voldgade 5-7, 1350 Copenhagen <sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius adomas.valantinas@gmail.com

The conventional understanding of the Moon states that it is a differentiated but currently a geologically 'dead' body. Most of the lunar mare volcanism took place ~4-3 Ga ago and basin related extensional tectonics ended 3.6 Ga ago with some degree of contractional tectonics up to 1.2 Ga [1,2]. However, with the help of high resolution images provided by NASA's Lunar Reconnaissance Orbiter (LRO) a number of geologically young structures have been recently identified by various workers. Evidence for basaltic volcanism in the past 100 Ma has been proposed from the observations of so called Irregular Mare Patches (IMPs) [3]. A number of surface tectonic expressions such as small graben and lobate scarps were found to be also <~100 Ma [4].



Figure 1. Analyzed wrinkle ridge locations on the nearside of the Moon. LRO Wide angle Camera image.

Using LRO Narrow Angle Camera (NAC) data set and LRO Diviner instrument rock abundance maps, we analyze several contractional lunar wrinkle ridge systems (locations marked in Fig. 1) which are thought to be manifestations of global stress fields along nearside maria edges [5]. Results from stratigraphic relationships and the lack of large superimposing craters suggests that all wrinkle ridges in our study regions are late Copernican (i.e. <100 Ma in age). We derive model ages from crater size frequency distributions (CSFD) which result in ages all below 30 Ma (see Fig. 2). Also analyzed lunar wrinkle ridges appear morphologically crisp and include various degrees of pristine rocky outcrops. One wrinkle ridge system exhibits particularly high boulder concentrations in northern Mare Humorum. The high reflective properties of these up <5 m boulders can be seen in Fig. 3.



Figure 2. Cumulative CSFD plot and its model age for wrinkle ridge count area in Mare Imbrium.

Our results suggest that there is a strong correlation between rocky terrains and low crater densities for wrinkle ridge areas analyzed in this work. Rock abundances also support the evidence that they are geologically young because estimates of lunar surface boulder obliteration rates imply that rock populations are fully destroyed via meteorite impacts in 300 Ma [6]. The process that could excavate such amounts of lunar regolith and reshape the top layer of lunar maria is unknown. However, past Apollo missions have recorded deep and shallow lunar quakes [7]. The findings presented in this work point to a more complex lunar thermal and late stage tectonic evolution.



Figure 3. Close up image of boulders observed on a wrinkle ridge in Mare Humorum. LRO NAC.

Keywords: Moon, tectonics, CSFD, wrinkle ridges

#### References

- [1] Schultz & Spudis, Nature, 302, (1983).
- [2] Watters & Johnson, Planetary Tectonics 121-182, (2010).
- [3] Braden et al., Nature Geosci., 7, (2014).
- [4] Watters, T.R. et al., Science, 936-940 (2010).
- [5] Yue, Z. et al., J. Geophys. Res. Planets, 120, 978-994 (2015).
- [6] Basilevsky, et al., Planet. Space Sci. 117, 312-328, (2015).
- [7] Nakamura, Y., Proc. Lunar Planet. Sci. Conf., 1847-1853(1980)

# Žodinė sesija 7A

Biofizika ir medicinos fizika

# Fotosintetinių anteninių kompleksų agregatų fluorescencijos temperatūrinė analizė ir nefotocheminio gesinimo prigimtis

# Temperature-dependent fluorescence from the aggregates of photosynthetic light-harvesting complexes and the origin of non-photochemical quenching

Jevgenij Chmeliov<sup>1,2</sup>, Andrius Gelžinis<sup>1,2</sup>, Egidijus Songaila<sup>2</sup>, Ramūnas Augulis<sup>2</sup>,

Leonas Valkūnas<sup>1,2</sup>, Alexander V. Ruban<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos katedra, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekulinių darnių fizikos skyrius, Saulėtekio al. 9, LT-10257 Vilnius <sup>3</sup>School of Biological and Chemical Sciences, Queen Mary University of London, Mile End Road, London E1 4NS, UK <u>jevgenij.chmeliov@ff.vu.lt</u>

Non-photochemical quenching (NPQ) is а self-regulatory mechanism utilized by green plants on a molecular level that allows them to operate under varying light conditions and to avoid dangerous over-excitation during intense sunlight. To get more insight into its physical origin, we performed high-resolution time-resolved fluorescence measurements of the major light-harvesting complexes (LHCII) and their aggregates across a wide temperature range (from the room temperature down to 15 K) [1]. The thorough analysis of the collected data indicated the co-existence of at least 3 distinct conformational states of the LHCII complexes: the dominating one, corresponding to the usual fluorescence around 680 nm; the red-emitting one, corresponding to the red-shifted fluorescence with spectral peak position around ~700 nm; and the third non-emitting state responsible for the excitation quenching (Fig. 1a). Based on simulations of the excitation energy transfer in the LHCII aggregate at various temperatures, we were able to associate the physical origin of these states with the underlying molecular mechanisms (Fig. 1b). Particularly, it was shown that the quenching state resembling NPQ is related to the incoherent excitation energy transfer from chlorophyll (Chl) to the short-lived carotenoid (Car) excited state, most probably the one of the lutein pigment [2]. On the other hand, the red-shifted fluorescence was shown to arise due to partial mixing of excitonic and chlorophyll-chlorophyll charge transfer (CT) states. Our results also demonstrate that the required level of photoprotection in vivo can be achieved by very subtle environmental-dependent variations in the number of LHCIIs switched to the quenched state.



Figure 1. (a) Model of the LHCII aggregate consisting of LHCII complexes being in 3 distinct conformational states—the dominating 680-nm-emitting one (green), the red-emitting one, having fluorescence maximum at ~700 nm (red), and the quenching one (grey). (b) The proposed molecular origin of the red-emitting and quenching states of LHCII.

Reikšminiai žodžiai: fotosintezė, pigmentai, nefotocheminis gesimas, fluorescencija, temperatūra.

- J. Chmeliov, A. Gelzinis, E. Songaila, R. Augulis, C. D. P. Duffy, A. V. Ruban, L. Valkunas, Nature Plants 2, 16045 (2016).
- [2] J. Chmeliov, W. P. Bricker, C. Lo, E. Jouin, L. Valkunas, A. V. Ruban, C. D. P. Duffy, Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 15857 (2015).

## Sonoporacijos dozimetrijos tyrimai

#### Sonoporation dosimetry study

Martynas Maciulevičius<sup>1</sup>, Mindaugas Tamošiūnas<sup>1</sup>, Mindaugas S. Venslauskas<sup>1</sup>, Saulius Šatkauskas<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vytauto Didžiojo universitetas, Gamtos mokslų fakultetas, Vileikos g. 8, LT-44404 Kaunas Martynas.Maciulevicius@vdu.lt

Siekiant kontroliuojamos ir lokalizuotos citotoksinių priešvėžinių vaistų pernašos į ląsteles ir audinius jau tyrinėjamas keleta dešimtmečiu yra lasteliu sonoporacijos (SP) metodas. Fizikiniu požiūriu pagrindinis faktorius, sąlygojantis ląstelės membranos SP, yra ultragarso (UG) sukelta kontrastinių agentų mikroburbulų (MB) kavitacija. SP destruktyvus poveikis ląstelėms pasireiškia dėl nekontroliuojamos MB kavitacijos. Todėl yra ypač svarbu sukurti universalią SP dozimetrijos sistemą.

SP dozimetrija yra tiesiogiai siejama su radimu įverčio – metrikos, kuri leistų prognozuoti kavitacijos mastą, tiesiogiai susijusį su jos sukeliamais biologiniais efektais. Kartu su SP eksperimentinių koreliacijos rezultatų pagalba pastaroji metrika turi leisti sukurti grįžtamojo ryšio SP efektyvumo bei ląstelių gyvybingumo kontrolę.

Nors SP yra laikoma saugiu metodu, tačiau be minėtų teigiamų SP savybių, SP pasižymi šalutiniais efektais, tiesiogiai ar netiesiogiai sukeliančiais ląstelių žūtį [1]. SP destruktyvus poveikis pasireiškia dėl nekontroliuojamos MB kavitacijos. Todėl yra ypač svarbu sukurti universalią SP dozimetrijos sistemą, t. y., yra reikalinga SP metrika, kuri nepriklausytų nuo skirtingų tyrėjų naudojamos aparatūros bei analizės metodų.

Siekiant dozuoti kavitaciją pagal išvesties parametrus didelis dėmesys yra skiriamas UG signalams, skleidžiamiems kavituojančių MB. MB sprogimo metu yra skleidžiamas UG laukas - "plačiajuostis triukšmas, turintis komponentes plačiame dažnių diapazone. MB skleidžiami signalai yra užrašomi naudojant pasyvius UG keitiklius ir naudojami tolesnei analizei siekiant susieti kavitacijos aktyvumą su biologiniais efektais [2].

SP tyrimų pradžioje eksperimentinės salygos efektyviai SP gauti buvo nustatomos empiriškai parenkant optimalius UG įvesties parametrus (centrinį dažnį, akustinį slėgį, veikimo ciklą ir poveikio UG trukmę). SP priklauso nuo daugelio įvesties parametrų (UG parametrai, MB parametrai, molekulių savybės, ir kt.), kuriuos visus sujungti į vieną rodiklį yra sunku [3, 4]. Be to, MB kavitacija terpėje sukuria sudėtingą burbulų svyravimų ir sprogimų aplinką. Todėl SP kontroliuoti neužtenka išmatuoti tik UG įvesties parametrų, nes pastarieji yra panaudojami tik MB kavitacijai sukelti, o tai reiškia, kad UG poveikis siejasi su biologiniu poveikiu tik netiesiogiai [5]. MB kavitacijos išvesties parametrai (MB koncentracijos dinamika, MB skleidžiami UG signalai) kur kas geriau siejasi su SP sukeliamais bioefektais nei UG įvesties parametrai.

Mūsų atliktų tyrimų metu buvo įvertinti keturi

pagrindiniai SP komponentai: 1) MB sukelta UG sklaida, 2) MB sukeltas UG silpimas, 3) "Sonovue" MB koncentracija ir 4) priešvėžinių vaistų, doksorubicino ir bleomicino, pernašos į kininio žiurkėno kiaušidžių ląsteles efektyvumas bei ląstelių gyvybingumas.

UG sklaida ir silpimas buvo matematiškai susieti su MB koncentracijos pokyčiais ir molekulių pernašos bei ląstelių gyvybingumo dinamika.

Ištyrus MB koncentracijos dinamikos ir UG sklaidos spektrus buvo pasiūlytos universalios laikinės metrikos, MB sonodestrukcijos greitis  $(1/\tau_{MB})$  ir UG sklaidos signalo maksimalios vidutinės kvadratinės vertės (RMS) atsiradimo greitis  $(1/t_{RMS})$ , tiksliai prognozuojančios vaistų pernašos efektyvumą.

Tyrimai parodė, kad UG sklaida, silpimas bei MB koncentracija gali būti lygiavertiškai panaudoti SP efektyvumui optimizuoti. SP efektyvumo optimizavimui poveikio trukmės skalėje buvo pasiūlytas kriterijus – UG sklaidos signalo vidutinės kvadratinės vertės nukritimas iki fono lygio. Taip pat buvo pristatyta metrika, silpimo kitimo greitis, kuri puikiai parodė BLM pernašos efektyvumą ir ląstelių gyvybingumą.

Atlikus tyrimus buvo nustatyta, kad inercinė kavitacija yra pagrindinis mechanizmas, sukeliantis efektyvia ląstelių SP.

Reikšminiai žodžiai: sonoporacija, mikroburbulai, ultragarsas, sonodestrukcija, kavitacija

- Tamosiunas M, Jurkonis R, Mir LM, Lukosevicius A, Venslauskas MS, Satkauskas S. Technol Cancer Res Treat. 2012; 11 (4): 375– 387.
- [2] Chen WS, Brayman AA, Matula TJ, Crum LA. Ultrasound Med Biol. 2003A; 29 (5): 725–737.
- [3] Rahim A, Taylor SL, Bush NL, ter Haar GR, Bamber JC, Porter CD. Ultrasound Med Biol. 2006; 32 (8): 1269–1279.
- [4] Karshafian R, Bevan PD, Williams R, Samac S, Burns PN. Ultrasound Med Biol. 2009; 35 (5): 847–860.
- [5] Hallow DM, Mahajan AD, McCutchen TE, Prausnitz MR. Ultrasound Med Biol. 2006; 32 (7): 1111–1122.

#### DNR sekos kirpimo mechanizmo aktyvaus centro modeliavimas restrikcijos endonukleazėje

#### Active center modeling for DNA sequence cleavage in restriction endonuclease

Laurynas Diska<sup>1</sup>, Leonas Valkūnas<sup>1,2</sup> Mindaugas Mačernis<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius <u>karolis.jasinevicius@ff.stud.vu.lt</u>

Genų redagavimo įrankiai biotechnologijos mokslų sritį iškėlė į populiarumo aukštumas. Vis dėlto pagrindiniai klausimai, tokie kaip tikslus veikimo mechanizmas bei iš kur visa tai atsirado, dar nėra atsakyti. Šiandien jau žymiai daugiau yra žinoma apie grupuotas, reguliariais tarpais pasikartojančias trumpas palindromines sekas – CRISPR [1] (angl. Clustered, Regularly Interspaced Short Palindromic Repeats), kurios yra aptinkamos deoksiribonukleino rūgštyje (DNR). DNR susideda iš deoksiribonukleotidų, kurie yra sudaryti iš heterociklinės azoto bazės ir angliavandenio deoksiribozės. Yra keturi pagrindiniai nukleotidai [1] : Adeninas(A), Timinas(T), Citozinas(C) ir Guaninas (G), ir jie tarpusavyje skiriasi azoto bazėmis. Adeninas sudaro porą kartu su Timinu, o Citozinas – su Guaninu.



1 pav. BcnI restrikcijos endonukleazės sąveikos su DNR nukleobazėmis (CG) aktyvusis centras

Kadangi DNR yra sukaupta visa informacija apie gyvybę, kartu su gyvybe vystėsi ir DNR apsaugos mechanizmai. Vienas iš šių apsaugos mechanizmų yra restrikcijos ir modifikacijos (RM) sistemos, kurias bakterijos ląstelė naudoja apsaugai nuo svetimos DNR ir bakteriofagų antpuolio. Paprastai, minėtos RM sistemos susideda iš dviejų fermentų: restrikcijos endonukleazės (REazės), kuri karpo tik "svetimą" DNR ir neliečia savos, bei metiltransferazės (MTazės), kuri pažymi "savo" DNR. Šie fermentai veikia kaip "molekulinės žirklės", kurios karpo DNR. Šiame moksliniame tiriamajame darbe buvo naudojami būtent restrikcijos endonukleazės fermentai BcnI [2]. Darbu siekiama plačiau ištirti kaip restrikcijos fermentai atpažista specifines sekas ir ar galima sukurti naujus restrikcijos fermentus, supratus ju sandarą ir veikimo principus. Darbo tikslas yra plačiau ištirti BcnI baltymo restrikcijos endonukleazės fermento ir jo mutantų reakcijų aktyviuosius centrus, naudojantis kvantinės chemijos metodais.

1 pav. pusėje pavaizduotas 5'-CC/GGG-3' sekos atpažinimo mechanizmas ir C:G poros atpažinimo reakcijos aktyvusis centras. Analogiškas vaizdas yra 5'-CC/CGG-3' sekos atpažinimo mechanizmui su C:G poros atpažinimo reakcijos aktyviuoju centru. Iš viso yra 4 aktyvieji centrai. Jie buvo modeliuojami.

Darbe buvo naudojama QM/MM metodika, kur QM daliai naudojama DFT hibridinis tankio funkcionalas B3LYP, su 6-311G(d,p) bazinių funkcijų rinkiniu, o MM - pusempiris PM6 metodas. Išorinio sluoksnio atomai yra užšaldomi, tuomet atliekama pagrindinio sluoksnio geometrijos optimizacija. Nustatyta, kad skirtinguose centruose yra skirtingos ryšio energijos.

Reikšminiai žodžiai: bakteriorodopsinas, retinalis, tankio funkcionalo teorija.

- [1] L. Heidi, CRISPR'S Mysteries. Nature. 280, 541.19 (2017)
- [2] M. Sokolowska, M. Kaus-Drobek, V, Siksnys, Monomeric restriction endonuclease BcnI in the apo form and in an asymmetric complex with target DNA, J. Mol. Biol. 369: 722-734 (2007)

# Žmogaus tarpslankstelinių diskų savitosios fluorescencijos spektrų sąsaja su Modic patologija

# A link between human intervertebral disc samples' autofluorescence spectra and Modic pathology

Aurelija Vaitkuvienė<sup>1</sup>, Ignas Čiplys<sup>1</sup>, Vilmantas Gėgžna<sup>1,2</sup>, Darius Varanius<sup>1,2</sup>, Gunaras Terbetas<sup>4</sup>, Vytautas Steponėnas<sup>5</sup>,

Jurgita Ušinskienė<sup>3</sup>, Laura Neverauskienė<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Gyvybės mokslų centras, Saulėtekio al. 7, LT-10223 Vilnius

<sup>3</sup>Nacionalinis vėžio institutas, Santariškių g. 1, LT-08660 Vilnius

<sup>4</sup>Vilniaus universiteto Medicinos fakultetas, M. K. Čiurlionio g. 21, LT-03101 Vilnius

<sup>5</sup>Vilniaus Gedimino technikos Universitetas Mechanikos fakultetas, Biomechanikos inžinerijos katedra J. Basanavičiaus

g. 28, LT- 03224 Vilnius

Aurelija.Vaitkuviene@tmi.vu.lt

Nugaros apatinės dalies skausmai yra dažni ir varginantys negalavimai, jų kilmė siejama su stuburo tarpslankstelinio disko ir prigludusių slankstelių pokyčiais, kurie nustatomi radiologiniais metodais. Tarpslankstelinio disko (TD) išvarža diagnozuojama rentgeno tyrimu, disko degeneracijos laipsnis bei gretimo slankstelio pamatinės plokštelės bei kaulų čiulpų pakitimai (Modic) vertinami naudojant branduoliu magnetinio rezonanso vaizdavimo metodika [1]. Optiniais metodais galima tiesiogiai įvertinti disko audinio degeneracijos laipsnį. Ankstesniuose tyrimuose buvo diferencijuojama lengva degeneracija nuo ryškios tarpslankstelinio disko audinio mėginiuose, analizuojant savitosios fluorescencijos spektrus, kurie buvo registruojami nešiojamu lazeriniu spektroskopu [2]. Šiame tyrime vykdoma degeneravusių diskų audinių savitosios fluorescencijos spektrų analizė, siekiant ivertinti degeneruotam diskui gretimo slankstelio Modic pokyčių įtaką, bei įvertinti galimą šių pokyčių diagnostika. ir ankstesniuose tvrimuose. Kaip spektriniai signalai buvo paruošiami vykdant duomenų pašalinamos skaitmenini apdorojama: spektrinės sritys, kurių amplitudė neviršija triukšmo lygio, spektrai kalibruojami ir taip pat normuojami ties 386 nm bangos ilgiu.

tyrimo Šio siekis yra išanalizuoti diskų fluorescencijos spektrus atsižvelgiant į slankstelių patologiją, vertinamą "Modic" tipais. Pirmasis analizės tiriamasis etapas - ROC (angl. receiver operating characteristic) analizė kreivės ties kiekvienu spektroskopinio signalo bangos ilgiu. Šios analizės metu siekiama įvertinti, kurie spektrinių signalų bangos ilgiai potencialiai prasmingi diagnostikai, kai siekiama atskirti skirtingus Modic tipus turinčius mėginių signalus. Kitas analizės etapas - koreliacinė analizė, kuomet siekiama ivertinti, kaip koreliuoja/siejasi spektrinių signalų intensyvumai su Modic patologijos kitimu.

Prieš vykdant analizę buvo taip pat atsižvelgta į tiriamojo asmens amžių – buvo pastebėtas spektrinių signalų intensyvumų kitimas priklausomai nuo pacientų amžiaus. 1 pav. galima pastebėti ryškią amplitudės ribą tarp 40 ir 45 metų amžiaus.



1 pav. Fluorescencijos spektrų 470 nm bangos ilgio intensyvumų vertės skirtingo amžiaus žmonėms.

Dėl per mažos vyrų TD mėginių imties analizė buvo atliekama tik moterų mėginiams. Gauti ROC kreivės ties kiekvienu bangos ilgiu analizės rezultatai parodė, kad kontroliniai spektrai geriausiai atsiskiria nuo Modic patologiją turinčių spektrų jaunesnėms nei 45 metai pacientėms ties 372 ir 495 nm bangos ilgiais (subalansuoto tikslumo vertė: BA = 0,86). Įvykdžius koreliacinę analizę buvo pastebėta, jog stipriausia Modic pakitimų progreso koreliacija (koeficientas 0,76) stebima jaunesnėms nei 40 metų pacientėms vertinant 390 nm fluorescencija. Tiek ROC kreivės ties kiekvienu spektrinio signalo bangos ilgiu analizė, tiek koreliacinės analizės rezultatai įrodo, kad vertinant disko būklę svarbu atsižvelgti ne tik i disko bet ir gretimo slankstelio pakitimus.

Fluorescencijos metodika tinkama šioms būklėms įvertinti tiesiogiai operacijos metu tiriant disko audinį per įvestą šviesolaidį, tačiau rezultatų patikimumui svarbu vykdyti tyrimą esant didesnei mėginių imčiai.

*Reikšminiai žodžiai: stuburas, analizė, fluorescencija, medicina.* 

<sup>[1]</sup> Jamaludin, A., Lootus, M., Kadir, T. et al. Eur Spine J (2017) 26: 1374. doi:10.1007/s00586-017-4956-3

<sup>[2]</sup> Varanius, D., Terbetas, G., Vaitkus, J. V., & Vaitkuviene, A. (2013). Spinal hernia tissue autofluorescence spectrum. Lasers in Medical Science, 28(2), 423–430. <u>http://doi.org/10.1007/s10103-012-1077-4</u>

# Žodinė sesija 7B

Elementariųjų dalelių, atomų ir branduolių fizika, materijos sandara

## Dvigubo ir trigubo Ožė procesų $C^+$ jone tyrimas

## Investigation of double and triple Auger processes in $C^+$ ion

<u>Valdas Jonauskas</u>, Šarūnas Masys, Jurgita Koncevičiūtė, Aušra Kynienė, Saulius Pakalka Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius valdas.jonauskas@tfai.vu.lt

Daugiaelektroniai jonizacijos procesai įdomūs tiek teoriniu, tiek eksperimentiniu požiūriu. Vykstant tokiam procesui iš sistemos išlekia keletas elektronų, kurių skaičius, pavyzdžiui, elementariųjų procesų kaskado metu gali siekti dešimtis [1]. Tokius procesus teoriniu požiūriu yra sudėtinga aprašyti, nes reikia nagrinėti daug įvairių šuolių, kuriuose svarbų vaidmenį vaidina koreliuotas elektronų judėjimas.

Viengubas, dvigubas ir trigubas Ožė procesai buvo stebėti vieną kartą jonizuotame anglies jone fotonu išmušus elektroną iš 1s sluoksnio [2]. Didžiausia tikimybė yra viengubo Ožė šuolio, kurio metu vidinė vakansija yra užpildoma išorinio sluoksnio elektronu, o susidares energijos perteklius perduodamas kitam išorinio sluoksnio elektronui, kuris išlekia iš sistemos, ir padidėja nagrinėjamo jono jonizacijos laipsnis. Dvigubo ir trigubo Ožė šuolių atveju iš sistemos išlekia atitinkamai du arba trys elektronai. Priimta manyti, kad šiu procesu metu elektronai iš sistemos išlekia vienu metu. Tokiu atveju tenka spręsti atitinkamai trijų ar keturių kūnų uždavinius. Deja, nėra žinomi tikslūs tokių uždavinių sprendimai, todėl proceso aprašymui reikia naudoti įvairius artinius. Pavyzdžiui, tiesioginės dvigubos jonizacijos elektronais atveju gera sutapima su eksperimentinėmis duoda vertėmis nuo laiko priklausantis artimo ryšio metodas, bet jis yra pritaikomas tik paprasčiausioms sistemoms su vienu arba dviem elektronais virš pilnai užpildyto elektronų sluoksnio.

Mūsų buvo parodyta, kad tiesioginės dvigubos jonizacijos elektronais atveju gerą sutapimą su eksperimentu duoda artinys, kuriame procesas nagrinėjamas kaip kelių vienas po kito einančių procesų visuma su lygmenų užpildų pernaša [3].

Šis artinys buvo pritaikytas tiriant dvigubą bei trigubą Ožė procesus, vykstančius susidarius 1*s* vidinei vakansijai  $C^{1+}$  jone. Naudotame artinyje nagrinėtas dvigubas Ožė šuolis, kai pradinis Ožė elektronas pakeliui iš sistemos dar išmuša vieną surištą elektroną. Turime du laisvus elektronus išlekiančius iš jono. Vadinasi, šiuo atveju nagrinėjame viengubą Ožė procesą, ir po jo einančią viengubą jonizaciją elektronu. Trigubo Ožė šuolio atveju vienas iš dviejų laisvų elektronų, susidariusių dvigubo Ožė proceso metu, gali papildomai išmušti dar vieną elektroną, todėl iš atominės sistemos išlekia trys elektronai. Šiuo atveju turime viengubą Ožė procesą, ir po jo sekančią dvigubą jonizaciją Ožė šuolio metu susidariusiu elektronu.

Skaičiavimo rezultatai pateikti 1 pav. Abu maksimumai atitinka sužadinimus į skirtingus termus  $C^{1+}(1s2s^22p^2 \ ^2D, \ ^2P)$ , kurie gali suirti tik vykstant

Ožė šuoliams. Iš paveiksliuko matosi, kad viengubas Ožė šuolis yra apie 100 kartų stipresnis už dvigubą Ožė šuolį, o dvigubas Ožė šuolį. Paklaidų ribose gauti skerspjūviai sutampa su eksperimentinėmis vertėmis. Tai rodo, kad idėja apie vienu metu sistemą paliekančius elektronus nėra teisinga. Elektronų išlėkimo eiliškumas priklauso nuo įvykusių procesų sekos ir perduoto energijos kiekio vykstant jonizacijai elektronu.



1 pav. Viengubos, dvigubos ir trigubos fotojonizacijos skerspjūviai, atitinkantys sužadinimus iš 1*s* sluoksnio.

Reikšminiai žodžiai: Ožė šuoliai, fotojonizacija, jonizacija elektronu.

- [1] B. Rudek, et. al., Nat. Photonics **6**, 858 (2012).
- [2] A. Müller, et. al., Phys. Rev. Lett. 114, 013002 (2015).
- [3] V. Jonauskas, A. Prancikevičius, Š. Masys ir A. Kyniene, Phys. Rev. A 89, 052714 (2014).

#### Matavimu grįsti Drell-Yan proceso triukšmo įvykių skaičiaus įvertinimo metodai

## Data-driven methods to estimate the number of the Drell-Yan process background events

Marijus Ambrozas<sup>1</sup>, Andrius Juodagalvis<sup>2</sup>

 <sup>1</sup> Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9 III-tieji rūmai, LT-10222 Vilnius
<sup>2</sup> Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius Marijus.Ambrozas@ff.stud.vu.lt

Dviems protonams susiduriant su didele energija, gali vykti sąveika tarp jo sudedamųjų dalių – vadinamųjų "partonų" (kvarkų ir gliuonų). Partonų sąveikos tikimybė bei galimos pasekmės priklauso nuo partonų rūšies bei jų turimos protono energijos dalies. Elementariųjų dalelių teoretikai protono sandarą aprašo partonų pasiskirstymo funkcijomis (angl. parton distribution functions, PDFs), nuo kurių tikslumo priklauso ir skaičiuojami retų įvykių tikėtinumo įverčiai.

Drell-Yan proceso (kvarko ir antikvarko anihiliacijos susidarant priešingo krūvio leptonams) eksperimentinis tyrimas padeda tikslinti partonų tikimybines funkcijas [1]. Teorinis šio proceso tikėtinumas skaičiuojamas antros eilės tikslumu. Proceso eksperimentinis tyrimas naudojamas ne tik partonu tikimybiniu funkciju tikslinimui, bet ir protonų susidūrimo proceso aprašymo (angl. underlying event), hadronizacijos modelių bei teoriškai numatomų pataisų (QCD, EW) tikslinimui. VU mokslininkai dalyvauja Drell-Yan diferencialinio reakcijos skerspjūvio matavime CERN Kompaktiškojo miuony solenoido eksperimente (angl. Compact muon solenoid, CMS). Matavimai atliekami esant skirtingai protonų susidūrimo pilnai energijai [1-3]. Siekiant sumažinti su matavimu tiesiogiai nesusijusius neapibrėžtumus (pvz., atskirų triukšmo procesų vyksmo tikimybes ar detektoriaus atsako modeliavimo netikslumus), triukšmo procesų įvykių skaičius yra įvertinamas matavimu grįstais metodais. Parametrais apibrėžtoje kontrolinėje srityje rastas triukšmo įvykių skaičius yra transformuojamas į triukšmo įvykių skaičių signalo strityje. Triukšmo procesai, kuriuose nepriklausomai gali susidaryti tiek tos pačios, tiek skirtingos rūšies leptonai, yra įvertinami "eu metodu". Kiti procesai, kuriuose yra galimybė susidaryti čiurkšlėms (dalelių srautams), įvertinami klaidingo atpažinimo (angl. fake rate) metodu. Pristatyme aptariami šie metodai ir jų įverčių tikslumas.

CMS eksperimente VU fizikai tiria Drell-Yan procesą susidarant elektronams. Projektą remia Lietuvos Mokslų Akademija.

Reikšminiai žodžiai: elementariųjų dalelių standartinis modelis, Didysis hadronų greitintuvas (LHC), Drell-Yan procesas, tikslumo matavimai.

- [1] CMS Collaboration, CMS PAS SMP-16-009 (2016).
- [2] CMS Collaboration, JHEP 12, 30 (2013).
- [3] CMS Collaboration, Eur.Phys.J. C 75, 147 (2015).



1 pav. Dviejų elektronų invariantinės masės spektras, kai protonų susidūrimo energija yra 8 TeV. Taškai žymi išmatuotų įvykių skaičių, spalvos nurodo skirtingų procesų indėlį. Geltona spalva žymi signalą – Drell-Yan proceso įvykius. EW reiškia dviejų bozonų ir W+čiurkšlės procesus. Taškų vertikalios linijos nurodo statistinį neapibrėžtumą [2].



2 pav. Detektoriumi išmatuotas dviejų miuonų invariantinės masės spektras, kai protonų susidūrimo energija yra 13 TeV [2]. Žymėjimai kaip pav. 1, tik  $DY \rightarrow \tau\tau$ procesas įtrauktas į EW indėlį.

## Aukšto dažnio analizė periodiškai sužadintoms kvantinėms sistemoms su papildoma lėta laikine priklausomybe

# High-frequency analysis of periodically driven quantum systems with additional slowly varying time-dependence

Viktor Novičenko<sup>1</sup>, Egidijus Anisimovas<sup>1,2</sup>, Gediminas Juzeliūnas<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, 10222 Vilnius <sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius viktor.novicenko@tfai.vu.lt

Pastaraisiais metais yra didelis susidomėjimas periodiškai žadinamomis kvantinėmis sistemomis. Periodinė perturbacija leidžia pakeisti natūralią sistemos dinamiką sukuriant papildomas sąveikas. Pavyzdžiui, neutralūs atomai periodiškai virpinamame potenciale juda tarsi įelektrintos dalelės esančios magnetiniame lauke. Tokioms sistemoms aprašyti naudojama Flokė teorija [1]. Tačiau Flokė formalizmas, griežtai tariant, tinka tik periodinėms sistemoms su fiksuota amplitude. Tuo tarpu eksperimentinėse realizacijose perturbacijos amplitudė dažniausiai yra lėtai didinama iki darbinės vertės, o po ilgos evoliucijos amplitudė vėl lėtai mažinama. Todėl yra natūralus poreikis išplėtoti Flokė teorijos taikymą kvantinėms sistemoms su papildoma lėta priklausomybe.

Mes nagrinėjome bendro pavidalo Šredinerio lygtį, kurios Hamiltonianas turi dvi laikines priklausomybes:

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

čia pirmas Hamiltoniano argumentas aprašo greitas sistemos osciliacijas  $H(\omega t + 2\pi, t) = H(\omega t, t)$ , o antras argumentas iliustruoją papildomą lėtą sistemos dinamiką. Dažnis  $\omega$  yra pakankamai didelis, t.y. energija  $\hbar\omega$  yra didesnė už kitas sistemos charakteringas energijas. Tokiu atveju galima žiūrėti į sistemos evoliuciją suvidurkintą per aukšto dažnio periodą. Mes pademonstravome [2] kaip kvantinę sistemą aprašomą (1) lygtimi galima suvesti į panašią lygtį:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H_{\text{eff}}(t) |\psi\rangle,$$
 (2)

kur efektinis Hamiltonianas  $H_{\text{eff}}(t)$  aprašo sistemos vidurkintą dinamiką, bei priklauso tik nuo lėto laiko. Išraiška dėl efektinio Hamiltoniano yra gaunama kaip skleidimas atvirkštinio dažnio laipsniais:

$$H_{\text{eff}}(t) = H_{\text{eff}(0)}(t) + H_{\text{eff}(1)}(t) + H_{\text{eff}(2)}(t) + \dots, \quad (3)$$

kur  $H_{\text{eff}(i)}(t)$  yra proporcingas  $1/(\hbar\omega)^i$ .

Reikšminiai žodžiai: Flokė teorija, aukšto dažnio skleidimas, topologinės būsenos

<sup>[1]</sup> N. Goldman and J. Dalibard, Phys. Rev. X 4, 031027 (2014).

<sup>[2]</sup> V. Novičenko, E. Anisimovas, G. Juzeliūnas, Phys. Rev. A 95, 023615 (2017).

# Žodinė sesija 8A

Biofizika ir medicinos fizika

#### Intraoperative detection of brain tumors with infrared spectroscopy and coherent antistokes Raman scattering

Gerald Steiner<sup>1,2</sup>, Roberta Galli<sup>1</sup>, Ortrud Uckermann<sup>3</sup>, Edmund Koch<sup>1</sup>, Gabriele Schackert<sup>3</sup>, Matthias Kirsch<sup>3</sup>.

<sup>1</sup> Klinisches Sensoring und Monitoring, Medizinische Fakultät Carl Gustav Carus,

Technische Universität Dresden, Dresden, Germany

<sup>2</sup>Vilnius university, Faculty of Physics, Saulėtekio av. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>3</sup>Klinik und Poliklinik für Neurochirurgie, Universitätsklinikum Carl Gustav Carus an der Technischen Universität

Dresden, Germany

Intra-operative histochemical assessment of tissue could significantly improve the prognosis of the patient by reducing the need for further surgeries. Such an assessment can be made with optical biopsies using infrared spectroscopy. Infrared spectroscopy is an analytical technique that yields unique molecular and biochemical information about tissues while being very fast and not requiring exogenous labels. As new portable instruments are available now this technique can be stationed in the operating room for quick evaluation of tissue.

Freshly resected tissue of glioblastoma of more than 200 patients and non-neoplastic control tissue from 19 epilepsy surgery resections were investigated with infrared spectroscopy. Tumor and control specimens were obtained from adult patients. Spectroscopic measurements were performed in the OR using a Bruker Alpha spectrometer. Very small samples of resected tissue (volume less than five mm<sup>3</sup>) were spectroscopic evaluated without any sample preparation. Spectra of GBM show, in comparison to normal tissue, stronger signals of phosphate groups of RNA. Furthermore, the spectra reveal a lower content of glycolipids for GBM. Several other variations can be observed in spectral regions, which are assigned to COO-C groups. The study revealed that three marker signals exist, which allow a classification of the tissue. In comparison to standard histological methods, the overall accuracy of the spectral classification was 92%. The spectroscopic based information about tissue could be obtained within few minutes which is faster than the instantaneous section histology.

Coherent anti-Stokes Raman scattering (CARS) microscopy reveals morphological and chemical information. It allows the delineation of brain tumors based on the contrast generated by the lower lipid content of neoplastic tissue. If analyzing tissue sections, a comparison with histological staining enables the precise matching between CARS images and pathological evaluation.

Together with CARS fluorescence and second harmonic generation can be excited by the same optical set up. We used the multimodal imaging to show that the identification of glioblastoma tumors and infiltrates is possible on living mouse brain tissue and on native human biopsies at single cell level [1]. For glioblastoma, both CARS signal intensity and cell morphology constitute objective parameters that allow discerning normal and neoplastic tissue structures.



Fig. 1. CARS image: cryosection of a gliobastoma multiforme specimen. The CARS image displays the solid tumor and an infiltrative region. The normal and neoplastic tissue can be distinguished on the basis on CARS signal intensity and the tumor boundaries identified. The CARS intensity value in tumor, infiltration and normal tissue calculated falls in separated ranges and constitutes a reliable parameter for delineation of infiltrative tumor borders.

The results of this study demonstrate the potential value of the molecular information obtained directly from tissue. Since infrared spectroscopy and CARS rely on the intrinsic biochemical differences between pathological and normal tissues, these techniques are poised to guide decision marking during surgery within an appropriate timeframe and to make intra-operative treatment decisions more accurate.

#### Literature

[1] O. Uckermann, R. Galli, S. Tamosaityte, E. Leipnitz, K.D. Geiger, G. Schackert, E. Koch, G. Steiner, M. Kirsch, PLOS One 9(9), e107115, (2014).

# Askorbato įtaka tetrapirolinių fotosensibilizatorių fotovirsmams: sugerties ir EPR spektroskopiniai tyrimai

# The influence of ascorbate on phototransformations of tetrapyrrolic photosensitizers studied by absorption and EPR spectroscopy

Saulius Bagdonas, Arūnas Maršalka Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius saulius.bagdonas@ff.vu.lt

Fotosensibilizuotos terapijos (FDT) antivėžinį efektyvumą lemia ne tik tinkamas fotosensibilizatoriaus ir šviesos šaltinio pasirinkimas; jis priklauso ir audinių įsotinimo deguonimi bei vėžinių ląstelių pajėgumo ištverti oksidacinį stresą. Tad neatsitiktinai siekiant geriausio rezultato FDT dažnai derinama su kitais gydymo metodais. Pastaraisiais metais atgimsta susidomėjimas antivėžiniu askorbo rūgšties aktyvumu, ypač daugėjant įrodymų, kad intraveninis suleidimas leidžia pasiekti žymiai didesnes vitamino koncentracijas kraujotakos sistemoje. Įvairiapusiška askorbato prigimtis igalina atsiskleisti tiek antioksidacinėms, tiek redukcinėms ir net pro-oksidacinėms savybėms, kurios buvo tyrinėtos in vitro ir in vivo [1]. Bendras tarpininkas, besiformuojantis tokių reakcijų metu yra askorbato laisvasis radikalas, galintis sąlygoti vandenilio peroksido susidarymą, taip sukeliant toksinį poveikį vėžiniam audiniui [2]. Tačiau tai, kuri iš daugybės persipinančių reakcijų sekų taps dominuojančia kiekvienu konkrečiu atveju, labai priklauso nuo aplinkinės terpės pH ir joje ištirpusio deguonies, bei nuo sensibilizuojančių medžiagų buvimo aplinkoje ir greta esančių molekulių oksidacinės būsenos.

L-askorbo rūgšties savybė formuoti askorbato radikala sukeltu fotocheminiu reakciju fone buvo tirta terpėse fotolabiliais vandeninėse buferinėse su tetrapiroliniais fotosensibilizatoriais hematoporfirino dariniu, chlorinu e6 bei santykinai fotostabiliu mezo-tetrasulfofenilporfinu (TPPS<sub>4</sub>). Askorbato radikalo juosta EPR spektruose registruota apšviečiant bandinius skirtingo intensyvumo žalios šviesos (532 nm) lazerio spinduliuote stikliniuose kapiliaruose pro šviesolaidžio antgali, patalpinama spektrometro Elexsys-E580 (Bruker) viduje. Fotosensibilizatorių tirpalų sugerties spektrai išmatuoti spektrometru AvaSpec2048 (Avantes).

Atliktais tyrimais buvo lyginami askorbato radikalo EPR juostos pokyčiai švitinimo metu ir švitinimo sukelti fotosensibilizatorių tirpalų sugerties spektriniai pokyčiai kiuvetėse, o taip pat vertinta kintančio terpės pH, jaučio serumo albumino ir H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> įtaka šiems pokyčiams. Apsauginis askorbo rūgšties poveikis, stebėtas silpnai šarminėse terpėse, palaipsniui keitėsi didinant terpės rūgštinguma, salygodamas padidinta nestabiliu. raudonojoje spektrinėje srityje sugerties juostas turinčiu fotoproduktu susidarvma. Švitinimas skirtingu intensyvumu, suteikiant fotosensibilizatorių bandiniams su askorbo rūgštimi tą pačią dozę, paveikė fotosensibilizatorių sugerties spektrinių juostų santykinius amplitudės pokyčius. Baltymo buvimas terpėje suaktyvino fotovirsmus nepriklausomai nuo askorbato įtakos. Nestabilių fotosensibilizatorių atveju stebėtas sąryšis tarp askorbato radikalo EPR signalo pokyčių ir susidarančių fotoproduktų spektrinių savybių, tuo tarpu stabilesnio TPPS<sub>4</sub> atveju lemiančiais EPR signalo savybės veiksniais buvo tirpalo savybės ir pasirinktas švitinimo intensyvumas.

Rezultatų interpretacijai pasiūlytas hipotetinis askorbato radikalo poveikio fotosensibilizatorių fotovirsmams mechanizmas.



1 pav. L-askorbo rūgšties (AR) EPR spektrai fosfatiniame buferyje (C = 50 mM, pH = 7) su H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> ir NaOH; C[AR]= C[H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>]=  $10^{-2}$  M, C[NaOH]= 4×10<sup>-2</sup> M

Reikšminiai žodžiai: hematoporfirinas, fotosensibilizatoriai, askobato radikalas, fotooksidacija.

- J. Du, J.J. Cullen, G.R. Buettner, Biochim. Biophys. Acta, 1826, 443 (2012).
- [2] C.M. Doskeya, V. Buranasudjaa, B.A. Wagnerb, ir kt., Redox Biology, 10, 274 (2016).

#### 3D sferoidinių ląstelių kultūrų pritaikymas priešvėžinių vaistų tyrimuose

### Application of 3D spheroid cell culture in anticancer drug discovery

<u>Greta Jarockytė</u><sup>1,2</sup>, Dominyka Dapkutė<sup>1,2</sup>, Vitalijus Karabanovas<sup>1,3</sup>, Justinas V. Daugmaudis<sup>4</sup>, Feliksas Ivanauskas<sup>4</sup>, Ričardas Rotomskis<sup>1,5</sup>

<sup>1</sup>Nacionalinis vėžio institutas, Biomedicininės fizikos laboratorija, Baublio 3B, LT-08406, Vilnius

<sup>2</sup>Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 7, LT-10257, Vilnius

<sup>3</sup>Chemijos ir bioinžinerijos fakultetas, Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius

<sup>4</sup>Matematikos ir informatikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Naugarduko g. 24, LT-0322, Vilnius

<sup>5</sup>Biofotonikos grupė, Lazerinių tyrimų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222, Vilnius greta.jarockyte@nvi.lt

Šiuo metu biomedicininiuose tyrimuose, kaip vėžinio audinio modelis, dažniausiai yra naudojami ląstelių monosluoksniai. Tačiau šis biologinis modelis yra per daug supaprastintas ir neatitinka sudėtingos vėžinio audinio struktūros bei naviko mikroaplinkos. Siekiant eksperimentines sistemas priartinti prie natūralių biologinių struktūrų, pradėtos auginti trimatės (3D) lastelių kultūros. Tokiose lastelių kultūrose dominuoja lastelė-lastelė saveika, taip pat formuojasi tarplastelinis užpildas ir susidaro difuzinis maisto medžiagu bei deguonies gradientas. Tokiomis pačiomis savybėmis pasižymi ir maži navikai, dar neturintys kraujagyslių tinklo. Visa tai suteikia pranašumą 3D ląstelių kultūroms onkologiniuose tyrimuose prieš šiuo metu įprastus lastelių monosluoksnius, todėl nenuostabu, kad pastaraisiais metais sparčiai daugėja tyrimų su 3D ląstelių kultūromis. Tačiau vis dar trūksta fundamentalių tyrimu, kurie parodytu kaip ivairios medžiagos, pvz. vaistų molekulės, nanodalelės, susikaupia ir pasiskirsto 3D lastelių kultūrose.

Šiame darbe 3D ląstelių kultūros buvo formuojamos kabančio lašo metodu, kuris leidžia užauginti sferoidines ląstelių kultūras. Ląstelių sferoidams formuoti buvo naudojamos žmogaus krūties vėžinės ląstelės MCF-7 ir į kamienines panašios krūties vėžinės lastelės MDA-MB-231, taip pat pelių embriono fibroblastai NIH3T3. Kaip nanodalelių modelis buvo pasirinkti kvantiniai taškai (KT), kurie yra inertiški ir pasižymi ryškia fotoliuminescencija raudonoje srityje  $(\lambda_{max}=625 \text{ nm})$ . Difuzijos proceso modeliavimui ląstelių sferoiduose buvo naudojamas fluorescencinis dažas rodaminas 6G (R6G) ( $\lambda_{max}$ =548 nm). KT ir R6G susikaupimas lastelių sferoiduose buvo tiriamas konfokaliniu mikroskopu Nikon Eclipse Te2000-S bei tėkmės citometru BD Accuri™ C6. Eksperimentų metu gauti rezultatai buvo naudojami matematinio modelio kūrimui.

Atliktų eksperimentų rezultatai parodė, kad KT susikaupia MCF-7 ir MDA-MB-231 3D ląstelių kultūros paviršiuje, tačiau nesikaupia ląstelių sferoido centrinėje dalyje. MCF-7 suformuoja ne tvirtus sferoidus, o laisvus agregatus, todėl KT gali giliau prasiskverbti į ląstelių kultūrą. NIH3T3 ląstelės formuoja tvirtus sferoidus, KT susikaupimas yra panašus į susikaupimą MDA-MB-231 ląstelių sferoide. Iš anksčiau atliktų tyrimų su ląstelių monosluoksniais, žinome, kad KT į ląsteles patenka endocitozės būdu [1], todėl stebėdami KT susikaupimą ląstelių sferoiduose galime modeliuoti, kaip kitos tokio dydžio nanodalelės elgsis 3D ląstelių kultūrose. Norint patvirtinti konfokaliniu mikroskopu gautus rezultatus, buvo atlikta tėkmės citometrijos analizė, kuri parodė, kad 60 % MCF-7 ir 70 % MDA-MB-231 ląstelių sukaupė kvantinius taškus.

R6G ląstelėse susikaupia difuzijos būdu, todėl mažuose sferoiduose (100-300 μm) po 24 h R6G stebimas visose ląstelėse. Tačiau didesniuose nei 300 μm sferoiduose R6G susikaupimas po 24 h inkubacijos matomas tik paviršinėse ląstelėse sferoido periferijoje, o vidiniuose jo sluoksniuose susikaupimas nestebimas. Vadinasi, net ir difuziškai į ląsteles patenkančių medžiagų susikaupimas ląstelių sferoiduose yra ribojamas. Pritaikius difuziją aprašančio modelio lygtis, buvo apskaičiuotas KT prasiskverbimo į sferoidus gylis, sumodeliuota kaip keičiasi KT susikaupimas priklausomai nuo inkubacijos laiko.



 pav. A) KT (raudona spalva) pasiskirstymas NIH3T3 ląstelių sferoido (apie 150 μm dydžio) vidiniame pjūvyje po 24 h inkubacijos. B) R6G (žalia spalva) pasiskirstymas NIH3T3 ląstelių sferoido (apie 100 μm dydžio) vidiniame pjūvyje po 24 h inkubacijos. Ląstelių branduoliai nudažyti su branduolių dažu Hoechst (mėlyna spalva). Skalė 50 μm.

Reikšminiai žodžiai: nanomedicina, 3D ląstelių kultūros, ląstelių sferoidai, nanodalelių kaupimasis, kvantiniai taškai.

#### Literatūra

 L. Damalakiene, V. Karabanovas, S. Bagdonas, M. Valius and R. Rotomskis, Int J Nanomedicine, 8, 555–568 (2013).

# Šviesos sukelti CdTe kvantinių taškų spektrinių savybių pokyčiai modelinėse ir biologinėse terpėse

# Photoinduced changes in the spectral properties of CdTe quantum dots in the model and biological systems

<u>Agnė Kalnaitytė</u><sup>1</sup>, Saulius Bagdonas<sup>1</sup>, Ričardas Rotomskis<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Nacionalinis vėžio institutas, Biomedicininės fizikos laboratorija, P. Baublio g 3b, LT-08406, Vilnius <u>agne.kalnaityte@gmail.com</u>

Kvantiniai taškai (KT) \_ puslaidininkinės nanodalelės – dėl plačios sugerties spektro srities, išspinduliuojamos šviesos spalvos priklausomybės nuo gamybos proceso metu kontroliuojamo dalelės dydžio, santykinai didelio paviršiaus ploto, kuris lengvai pritaikomas medžiagų analizėje, gali būti panaudojami medžiagų moksle, biologijoje bei medicinoje. KT spektroskopinės savybės gali būti paveiktos paviršiaus dangalo sandaros pokyčių ar išorinių veiksnių, pavyzdžiui, KT sugerties ir fotoliuminescencijos (FL) spektrų intensyvumą bei formą gali paveikti nanodalelę supanti aplinka ir sugertos spinduliuotės dozė. Sąveikos sukelti kvantiniu tašku FL intensyvumo ir spektrinės padėties pokyčiai gali būti panaudoti skirtingiems jonams ir biomolekulėms aptikti.

Spektroskopijos metodais buvo tirtas hidrofilinių neigiamo krūvio CdTe-COOH kvantinių taškų (550 ± 5 nm, PlasmaChem GmbH, Vokietija) optinio tankio ir fotoliuminescencijos parametry stabilumas bei fotostabilumas skirtingose vandeninėse modelinėse ir biologinėse terpėse. KT stabilumo ir fotostabilumo tyrimai dažniausiai atliekami vandeninėse terpėse (distiliuotame ar deionizuotame vandenvie), kurios savo jonine jėga smarkiai skiriasi nuo realiai gamtoje esančių ir gyviems organizmas augti tinkamų vandeninių terpių. Modeliuojant dumbliams augti tinkamas terpės salygas, eksperimentai buvo atliekami vandeniniame tirpale su ištirpintomis augalų trąšomis (Schultz All Purpose Water Soluble Plant Food 20-20-20, Schultz Company, JAV) modelinėje joninėje terpėje. Siekiant patikrinti kaip jonų sąveiką su KT paveikia kiti biologiniai veiksniai, į šiuos KT tirpalus joninėje terpėje buvo idedama jaučio serumo albumino (Albumin, V fraction, M = 69000 g/mol, Carl Roth GmbH, Germany) arba gelavandenių vienalasčių dumblių Scenedesmus ląstelių.

Pradinis KT sugerties ir fotoliuminescencijos intensyvumas bandinyje su ištirpusiomis augalų trąšomis bei su dumblių ląstelėmis yra mažesnis, ir paskutinė sugerties juosta bei FL spektras nežymiai pasislinkę į raudonąją spektro pusę, lyginant su KT spektrais distiliuotame vandenyje bei terpėje su jaučio serumo albuminu. Didesnės joninės jėgos tirpale, nepriklausomai nuo terpėje esančio baltymo ar dumblių ląstelių, registruojamas FL spektro uodegos atsiradimas ir didėjimas ilgabangėje spektro srityje, kuris gali būti susijęs su KT paviršiaus defektais.

Apšvitinus bandinius violetine diodo spinduliuote (30 mW/cm2,  $404 \pm 9$  nm (FWHM)) buvo tiriama KT

fotoliuminescencijos intensyvumo mažėjimo priklausomybė nuo švitinimo dozės skirtingos joninės jėgos tirpaluose, keičiant KT koncentraciją terpėje. Po švitinimo joninėje terpėje buvo nustatytas FL intensyvumo sumažėjimas ir laikinas uodegos raudonoje FL spektro srityje sumažėjimas.

Tyrimo metu distiliuotame vandenyje nustatytos trys kvantinių taškų FL mažėjimo stadijos (1 pav.).



1 pav. Normuoto CdTe-COOH kvantinių taškų FL intensyvumo mažėjimas išmatuotas ties FL juostos maksimumu (apie 550 nm) iš karto po bandinių švitinimo 3.6 - 108 J / cm<sup>2</sup> spinduliuotės dozėmis ir pateiktas eksperimento laiko skalėje. KT fotoliuminescencija registruota optine šviesolaidine sistema (žadinimo bangos ilgis - 405 nm).

Pradinėje stadijoje pasireiškė spartus FL intensyvumo mažėjimas, vidurinė - pereinamoji atspindėjo lėtesnį mažėjimą, o paskutinei stadijai buvo vėl būdingas spartesnis mažėjimas. Vidurinės stadijos trukmė priklausė nuo terpės joninės jėgos bei KT koncentracijos. Terpėje su jonais ši stadija buvo trumpesnė. Šios trys stadijos atsispindėjo ir KT FL spektro formos pokyčiuose bei FL intensyvumo gebėjime atsistatyti tamsos fazėse tarp švitinimo metu (1 pav.). Taigi, KT fotoliuminescencijos spektrinių savybių pokyčiai atspindi specifinius KT fotomodifikacijos vyksmus.

Reikšminiai žodžiai: kvantiniai taškai, fotostabilumas, baltymas, joninė vandeninė terpė.

# Žodinė sesija 8B

Fizikos istorija, terminija, edukologija ir mokslo politika

## Du įžymūs XX a. fizikai, susiję su Lietuva

## Two outstanding physicists of 20th century with Lithuanian background

Andrius Bernotas Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius andrius.bernotas@.tfai.vu.lt

"Lietuvos fizikų ir astronomų sąvado" [1] autoriai nebuvo užsibrėžę pateikti biografinių duomenų apie tuos fizikus ir astronomus, kurie nedirbo Lietuvoje – nors galbūt joje gimė, augo ar gavo išsilavinimą. Todėl jame nerasime Bruno Pontekorvo aspiranto Genacho Micelmacherio (Guenakh Mitselmakher), kurio su bendradarbiais kurta kompiuterinė programa *Coherent WaweBurst* 2016 m. padėjo aptikti gravitacines bangas, ir kitų išsibarsčiusių po pasaulį litvakų ir ne tik.

Nukritus "geležinei uždangai", daugiau sužinojome apie lietuvių emigrantų pasiekimus moksle. Nemažai jų lankėsi gimtinėje, įvairias būdais prisidėjo prie mokslo plėtros, sulaukė pripažinimo ženklų Lietuvoje: titulų, vardų ir apdovanojimų. Žinome ir naujuosius mūsų emigrantus – mobilius mokslininkus, pasiekusius aukštų įvertinimų, garsinančius Lietuvos vardą svetur.

Bet yra, atrodo, dar įdomių atvejų, kurie beveik negirdėti. Norėtųsi priminti porą tokių, susijusių su Europos branduolinių mokslinių tyrimų laboratorija CERN, kadangi 2017 m. birželio 27 d. Lietuva jau pasirašė asocijuotosios narystės šioje tarptautinėje organizacijoje sutartį.



1 pav. Iš kairės: Pierre Auger, Edoardo Amaldi, Lew Kowarski. 1952-02-16, diena po pirmojo provizorinės CERN tarybos posėdžio. Šaltinis: CERN

Levas Kovarskis (Leo Kowarski) – žmogus, kurio pavardė skamba kaip lietuviško miestelio pavadinimas. Branduolinės energetikos žinovas, specialistas, asmeniškai dalyvavęs kuriant šios energetikos pagrindus Prancūzijoje ir Kanadoje. Mokslinės karjeros pradžioje – Frederiko Žolio-Kiuri (Frédéric Joliot-Curie) padėjėjas. Vienas iš CERN "tėvų-kūrėjų", pradžioje buvęs laboratorijos eksperimentinės dalies vadovu. Iš Prancūzijos prieš pat gresiančią nacių okupaciją L. Kovarskiui su bendradarbiais pavyko į Angliją pergabenti tuo metu visas pasaulyje gautas sunkiojo vandens atsargas. Be šitų išteklių ir – pasirodo, kaip sužinota vos prieš dešimtmetį! – be jau turėtų eksperimentinių žinių apie grandinines branduolines reakcijas nacistinei Vokietijai greitas kelias į branduolinio ginklo sukūrimą buvo užkirstas.



2 pav. Alex Montwill. Šaltinis: www.iopireland,org

Aleksas Montvila (Alex Montwill) - Rygoje gimęs kilmingos Lietuvos giminės atžala, pasibaigus karui atsidūręs... Airijoje! Buvo vienas pirmųjų Airijos mokslininkų, pradėjusių dirbti CERN praėjusio amžiaus 6-ojo dešimtmečio pabaigoje. Dublino universiteto koledže vadovavo Fundamentinių dalelių tyrimų grupei, kuri, tapusi Europinio branduolinių emulsijų sambūrio dalimi, vykdė plačius smulkesnių už branduoli dalelių tyrimus ir pirmą kartą pastebėjo dalelės, turinčios žavųjį kvarką, atsiradimą ir išnykimą. Airijos karališkosios mokslų akademijos narys A. Montvila iki šiol prisimenamas ne tik fiziku kaip buvęs dėstytojas, bet ir plačiai žinomas visuomenei. Airijos transliuotojas RTE1 1984-1994 m. savo klausytojams pateikė bene 150 jo rengtų radijo pašnekesių apie fizikos mokslą ir jo istoriją. Parašė mokslo populiarinimo knygų, kurios galbūt sulauks savo skaitytojo pas mus.

Reikšminiai žodžiai: įžymūs fizikai, fizikos istorija, CERN

#### Literatūra

[1] E. Makariūnienė, L. Klimka, *Lietuvos fizikų ir astronomų sąvadas*, 2 leidimas (Vilnius, Fizikos institutas, 2001),

# Lyčių lygybė Europos Sąjungos mokslo politikos kontekste

# Gender Equality in the European Union Science Policy Context

Dalia Šatkovskienė

Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius dalia.satkovskiene@ff.vu.lt

Šiuolaikiniame pasaulyje mokslas tampa svarbiu ekonomikos augimo, socialinio gerbūvio ir politinio stabilumo užtikrinimo faktoriumi. Socialinių ir tiksliųjų mokslų integracija ir naujų mokslo šakų atsiradimas tampa šios epochos išskirtiniais bruožais. XXI amžiaus keliami iššūkiai reikalauja iš mokslininkų ne tik aukštos kompetencijos atskiroje mokslo šakoje, bet ir platesnio požiūrio į mokslą ir jo vaidmenį visuomenėje.

Pranešime pristatoma lyčių lygybės moksle problema ir jos svarba šalių ekonomikos konkurencingumo didinimo bei mokslo žmogiškųjų resursų plėtros aspektais.

Europos Sąjunga lyčių lygybės problemos sprendimui moksle skiria didelį dėmesį [1]. Ji yra vienu iš Europos Bendrosios Mokslinių Tyrimų Erdvės (ERA) vystymo bei Atsakingo Mokslo ir Inovacijų (RR&I) politikos prioritetų [2]. Problemos sprendimo būdų efektyvumo nagrinėjimui ir taikymams finansuoti yra skiriamos projektinės EK bendrosios programos Horizontas 2020 [3] lėšos. Atliekama situacijos stebėsena ir analizė ES mastu [4].

Šiuolaikinė lyčių lygybės moksle problemos sprendimo strategija tampriai siejama su visu suinteresuotų šalių (Europinio ir nacionalinio lygmens mokslo politikų ir mokslinę veiklą reguliuojančių ir finansuojančių institucijų, mokslo organizacijų vadovų ir mokslininkų visuomenės) glaudžiu bendradarbiavimu. Strategija siekiama institucializuoti problemą, tai yra nepalikti jos spendimo atskiriems individams, o modernizuoti mokslo institucijas taip, kad jos sutdarytų vienodas galimybes abiejų lyčių mokslininkams visapusiškai panaudoti savo talentus mokslo kūrimo procese bei mokslo administravime. Strategijos diegimas mokslo institucijose yra paremtas tiek šalyse narėse priimtais nacionaliniais lyčių lygybės igyvendinima užtikrinančiais istatymais, tiek reikiamu proceso Vienu iš svarbių lyčių finansavimu. lygybės įgyvendinimo Strategijos aspektų yra proceso eigos stebėsenos užtikrinimas ES mastu. Tuo tikslu rekomenduojama, kad institucijų strateginiuose planuose atsispindėtų lyčių lygybės problemos sprendimo gairės, lyčių lygybės aspektu būtu peržiūrimos, modernizuojamos ir tobulinamos mokslo vadybos ir mokslinio darbo kultūros sritys (pritaikant abiejų lyčių poreikiams bei skatinant moteru lyderyste moksle) bei užtikrinamas taip vadinamas "lyčių dimensijos" įtraukimas į mokslines ir mokymo programas.

Pranešime, remiantis FP7 ir Horizon 2020 projektų, skirtų lyčių lygybės įgyvendinimui mokslo organizacijose, patirtimi pateikiamos problemos, iškylančios siekiant įgyvendinti lyčių lygybę ES universitetuose ir mokslo tyrimų organizacijose, daugiausia sietinos su egzistuojančiu stereotipiniu požiūriu į lyčių skirtumus. Aptariamos pagrindinės priemonės, įgalinančios užtikrinti tvarų strategijos igyvendinima mokslo organizacijose. **Y**patingas dėmesys pranešime yra skiriamas organizacijoms, dirbančioms ekonomikos ypač svarbiose konkurencingumo užtikrinimui mokslo srityse tiksliuosiuose moksluose.

Remiantis bendrosios Europos Mokslinių tyrimų Erdvės vystymo 2016 m. ataskaita [5], nagrinėjama lyčių lygybės užtikrinimo moksle situacija Lietuvoje. Aptariamas lyčių lygybės įgyvendinimas mokslo institucijose ir jų padaliniuose, dirbančiuose fizikos mokslo srityje.

Pranešime taip trumpai pristatoma Lietuvos fizikių inicijuotos Baltijos šalių asociacijos BASNET Forumas veikla, siekiant paspartinti Europos Sąjungos lyčių lygybės politikos įgyvendinimą Lietuvoje ir Baltijos šalių regione. Pateikiami naujausi apklausų rezultatai, atskleidžiantys priežastis, kurios lemia Lietuvos atsilikimą šioje svarbioje Europos mokslo vystymui srityje. Pateikiamos problemos sprendimo perspektyvos, kurios siejamos su Lietuvos nacionalinės mokslo sistemos modernizacija, įsiliejimu į didžiųjų fizikos mokslo centrų tinklus bei nacinalinės mokslo politikos vaidmens didinimą, formuojant Europos mokslo politiką.

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

- [1] http://ec.europa.eu/ eu2020/pdf/ COMPLET%20EN%20BARROS O%20%20%20007%20-%20Europe%202020%20-%20EN%20v ersion.pdf
- [2] http://ec.europa.eu/research/swafs/pdf/pub\_public\_engagement/opt ions-for-strengthening\_en.pdf
- [3] http://ec.europa.eu/research/participants/data/ref/h2020/wp /2014\_2015/main/h2020-wp1415-swfs\_en.pdf
- [4] https://ec.europa.eu/research/swafs/ pdf/pub\_gender\_equality/she\_ figures\_2015-final.pdf
- [5] http://ec.europa.eu/research/era/ pdf/era\_progress\_report2016/era\_ progress\_report\_2016\_com.pdf

#### Tarptautinės fizikos olimpiados - iššūkiai dabartiniame Lietuvos kontekste

# International Physics Olympiads: Challanges in the Recent Context of Lithuania

Edmundas Kuokštis

Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, 10222 Vilnius

edmundas.kuokstis@ff.vu.lt

Pranešime apžvelgta nemaža Lietuvos fizikų patirtis dalyvaujant prestižiškiausiame pasaulio jaunuju fiziku renginyje - Tarptautinėse fizikos olimpiadose (IPhO). Šiose intelekto varžybose lietuviai kaip nepriklausomos valstybės atstovai kasmet dalyvauja jau nuo 1989 m. (Varšuva). Šiemet rengiama 48-oji tarptautinė fizikos olimpiada (pirmoji - 1967 m. Varšuvoje). Pažymėtina, kad Lietuvos fizikai turi gana gilias olimpiadų tradicijas - šiemet įvyko jau 65-oji Lietuvos fizikos olimpiada. Olimpiados - ne tik ptrauklus ir įdomus užsiėmimas gabiems mokslui mokiniams, bet tam tikras poligonas, kuriame galima patikrinti kai kurias švietimo idėjas, palyginti nacionalinius pasiekimus su pasaulio kontekstu, suvokti edukacijos tendencijas apskritai gamtos moksluose, pasitikrinti fizikos rengimo gaires Lietuvoje. IPhO paprastai dalyvaja apie 90 šalių (tai pasaulinis renginys), kurios gali deleguoti iki 5 mokinių ir 2 vadovų. Dalyvių – daugiau kaip 400. Trukmė – apie 10 dienų. Dalyviai - vidurinių mokyklų moksleiviai, bet ne vyresni kaip 20 m. Visiems užduotys vienodos. 1 diena skiriama teorinėms užduotims, kita eksperimentinėms.

Ypatinga vieta pranešime skiriama programų analizei – tiek IPhO ir jos evoliucijai [1], tiek palyginimui su Lietuvos vidurinių mokyklų programomis (bendrosiomis [2,3] ir brandos egzamino [4]), o taip pat Lietuvos moksleivių fizikos olimpiados programa [5]. Būtina atkreipti dėmesį į minėtų programų skirtingą paskirtį ir tikslus. Štai Lietuvos bendrosiose programose gana išsamiai ir detaliai nurodoma, kokias temas reikalinga studijuoti, apibrėžiamas žinių ir gebėjimų lygis, tuo tarpu brandos fizikos egzamino paskirtis – konkrečiau apibrėžti fizikos brandos kaip valstybinio egzamino tikslus, struktūrą ir turinį (beje, dauguma mokyklų ir vadovaujasi pastarosios programos nuostatomis, nes juk būtina išlaikyti egzaminą minimaliomis pastangomis).

Tarptautinės olimpiados programa gana stipriai skiriasi nuo minėtų mūsų nacionalinių. Nors joje ir nurodomas fizikos dalyko turinys, temos, tačiau labai lakoniškai ir apibendrintai. Iš esmės ši programa - tai gero lygio universiteto fizikos fakulteto bendrosios fizikos programa – nėra temos ar klausimo, kuris nebūtų paliestas IPhO programoje. Atskirai aptariamos papildomos (iš esmės ne fizikinės) žinios ir gebėjimai, reikalingi IPhO uždavinių sprendimui. Nors šioje programoje ir akcentuojama, kad fizikos olimpiadinėse užduotyse prioritetas yra fizikiniai reiškiniai, jų esmė, modeliavimas, o matematikos žinios - antraeilis dalykas, bet realybėje sėkmingam mokinių pasirodymui būtinas ir matematikos universiteto lygio žinojimas. Pvz., mokiniai turi laisvai diferencijuoti, integruoti, net sudaryti ir spresti paprastesnes diferencines lygtis, manipuliuoti vektoriais (pvz., skaliarine ir vektorine ju 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. Fizikos dalykui mokyklose skirta palyginti mažai valandų, todėl ruošiantis tarptautinėms fizikos olimpiadoms reikia daug papildomai mokytis, trūkumų turi vadovėliai (nors jų gana gausu), prastoka fizikos kabinetų įranga, tam skiriamas akivaizdžiai per mažas dėmesys. Aptariama, kaip šie iššūkiai sprendžiami Lietuvoje (pvz., ypatingai gabių mokinių mokyklos "Fizikos olimpas" veikla).

Toliau pateikiama mūsų mokinių pasiekimų tarptautinėse olimpiadose statistika, aptariama dalyvavimo ir rengimosi periodo reikšmė apskritai švietimo sistemoje, nurodomi šios veiklos iššūkiai.

Pateikiami keli tipiniai tarptautinių olimpiadų užduočių (tiek teorinių, tiek eksperimentinių) pavyzdžiai, jų sprendimo keliai, vertinimo instrukcijos ir apeliacijų tvarka.

Visos minėtos problemos ateinančių kelerių metų laikotarpiu Lietuvai tampa dar aktualesnės, nes 2020 m. Lietuva yra oficialiai įsipareigojusi surengti 51-ąją fizikos tarptautinę olimpiadą mūsų šalyje. Visos užduotys, pasirengimo darbai, vertinimas ir organizacija pagal tarptautinių olimpiadų statutą [1] tenka priimančiajai šaliai.

*Reikšminiai žodžiai: olimpiados, fizikos programos, mokinių pasiekimai.* 

- [1] http://ipho.org/
- [2] http://www.upc.smm.lt/suzinokime/bp/2011/Gamtamokslinis\_ugd ymas\_4\_priedas.pdf (2011 m.)
- [3] www.upc.smm.lt/veikime/turinys/failai/Fizikos\_VU\_2010-12-06.d oc
- [5] http://www.lmnsc.lt/supadmin/kiti/lmitkcedit/uploads/files/R1-1% 20%20Lietuvos%20mokini%C5%B3%20fizikos%20olimpiados %20dalykin%C4%97%20programa.pdf

## Edukacija ilgo termino laisvojo sprendimo bendrosios fizikos užduočių konkursuose

# **Education by Long-Term Free-Solution General Physics Tasks Competitions**

Petras Jonušas<sup>1</sup>, Stasys Tamošiūnas<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>VšĮ papildomo ugdymo mokykla "Fizikos olimpas" (kodas 191743413), Saulėtekio al. 9-200, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup> Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

olimpas@ff.vu.lt

42-osios Lietuvos nacionalinės fizikos konferencijos rengimo metais sukanka 10 metų nuo "Fizikos turnyro" edukacinio konkurso rengimo pradžios; turnyro rengėjas viešoji įstaiga papildomo ugdymo mokykla "Fizikos olimpas" (kodas 191743413), įsteigta 1994 m. papildomai ugdyti itin gabius vidurinių mokyklų ir gimnazijų mokinius. Per 10 m. "Fizikos turnyre" buvo pateikta spręsti iš viso 147 užduotys: pirmaisiais metais 12, visais kitais metais po 15 užduočių kasmet.

#### Edukacinio konkurso tikslai ir rengimo sąlygos

1. Atvirasis neakivaizdinis bendrosios fizikos užduočių ilgo termino laisvojo sprendimo edukacinis konkursas Fizikos turnyras yra unikalus autorinis projektas, kurio rengimo tikslas yra sudaryti sąlygas kūrybiškumui ir intelektui ugdyti bei realizuoti, objektyviai įvertinti ir palyginti tarpusavyje bet kurių konkurso dalyvių fizikos dalyko ir kitų dalykų, reikalingų Fizikos turnyro užduotims spręsti, žinias ir gebėjimus, suteikti galimybę visiems niekaip neapribotai tarpusavyje lygiomis sąlygomis pasivaržyti. Fizikos turnyras yra kasmetinis konkursas, rengiamas nuo 2007 metų.

2. Fizikos turnyre gali dalyvauti visi norintieji, nėra jokių apribojimų nei pagal amžių, nei pagal kilmę, nei pagal išsilavinimą. Fizikos turnyre negali dalyvauti tik jo užduočių rengėjai ir užduočių sprendimų vertintojai.

3. Metinį Fizikos turnyrą sudaro 15 skirtingų užduočių (13 teorinių, 2 eksperimentinės), viešai skelbiamų "Fizikos olimpo" mokyklos interneto svetainėje <u>www.olimpas.lt</u>. Naujos užduotys skelbiamos kas 3 kalendorines savaites.

4. Pirmasis užduoties sprendimo atsiuntimas automatiškai reiškia jo siuntėjo registravimąsi dalyvauti fizikos turnyre. Pradėti dalyvauti fizikos turnyre galima bet kuriuo metu, pradedant spręsti užduotis, kurių sprendimų atsiuntimo terminai dar nesibaige.

5. Fizikos turnyro užduočių sprendimus dalyviai gali pasirašyti savo tikruoju vardu ir pavarde arba slapyvardžiu (pseudonimu).

6. Vienos Fizikos turnyro užduoties sprendimo terminas yra 4 kalendorinė savaitės (28 dienos) nuo užduoties paskelbimo dienos. Užduočių sprendimas yra jokiomis sąlygomis neapribotas ir laisvas: sprendžiant užduotis dalyviams galima neribotai konsultuotis bei naudotis visomis priemonėmis ir informacijos šaltiniais. 7. Fizikos turnyro užduočių aiškinamieji sprendimai, pasibaigus dalyvių sprendimų siuntimo terminui, paskelbiami viešai, o dalyvių užduočių sprendimų vertinimai skelbiami "Fizikos olimpo" mokyklos interneto svetainėje, nenurodant dalyvių tikrų vardų, pavardžių ar pseudonimų: kiekvienam dalyviui suteikiamas skaitmeninis kodas.

8. Fizikos turnvro nugalėtojai skelbiami bei apdovanojami birželio mėnesi. "Fizikos olimpo" mokyklos mokslo metų baigimo renginio metu. Apdovanojamas absoliutus turnyro nugalėtojas, taip pat įvairų atskirų dalyvių grupių nugalėtojai: visų "Fizikos olimpo" mokyklos moksleivių bei atskirų mokyklos kursų nugalėtojai, "Fizikos olimpo" absolventų grupės nugalėtojai, visų mokinių, fizikos studentų grupės nugalėtojai, fizikos mokytojų grupės nugalėtojai, fizikos dėstytojų ir mokslininkų grupės nugalėtojai, fizikos mėgėjų grupės nugalėtojai, pavėlavusių į Fizikos turnyro pradžią dalyvių grupės nugalėtojai, geriausiai eksperimentines užduotis atlikę dalyviai, kitų grupių nugalėtojai, taip pat kiti apdovanojimai.

9. Pagrindinis Fizikos turnyro prizas, įteikiamas dalyviui, tų metų fizikos turnyre geriausiai iš visų dalyvių atlikusiam skelbtas užduotis ir surinkusiam bendrą didžiausią sprendimų vertinimų balų sumą, yra asmeninis nešiojamasis kompiuteris. Nugalėtojui taip pat suteikiamas "Metų geriausio fizikos žinovo" titulas.

Žemiau pateikiame "Fizikos turnyro" 2007–2017 m. užduočių pasiskirstymo pagal fizikos sritis ir užduočių autorių lentelę.

				-		-	
Fizikos sritys ir	Μ	Т	E	0	Κ	В	Iš
užduočių							viso
autoriai							
E. Anisimovas	3		3				6
A.R.Bandzaitis	42	13		2	5		62
A. Gruodis	3	1		1		1	6
P. Jonušas						1	1
E. Kuokštis	2	1	1		1	3	8
S.Tamošiūnas	22	13	23	1	2	3	64
Iš viso	72	28	27	4	8	8	147

Lentelėje vartojami tokie sutrumpinimai: M – mechanikos; T – termodinamikos; E – elektros; O – optikos; K – kompleksinės (kelių fizikos sričių); B – eksperimentinės (bandymų) užduotys.

# Stendinė sesija S1

Teorinė ir skaičiuojamoji fizika Cheminė fizika Kvantinė optika ir kvantinė informacija Statistinė fizika Astrofizika, astronomija ir kosmologija Elementariųjų dalelių, atomų ir branduolių fizika, materijos sandara

#### Atvirkštiniai multivektoriai šešių dimensijų geometrinėse algebrose

## Inverse multivectors in a six dimensional geometric algebras

Artūras Acus<sup>1</sup>, Adolfas Dargys<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>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 reliatyvistiame erdvėlaikyje. Svarbus geometrinės algebros elementas yra atvirkštinis multivektorius  $A^{-1}$ , kurio sandauga iš multivektoriaus A duoda vienetą.

Bendros formos multivektoriaus atvirkštinio radimas geometrinėje algebroje tebėra iki galo neišspręsta ir labai aktuali problema tiek matematikoje, tiek fizikoje. Kadangi geometrinės algebros elementus visada galima pavaizduoti matricomis, tai iš principo atvirkštinį multivektorių įmanoma rasti perėjus į matricinį vaizdavimą. Tačiau toks kelias nėra natūralus, nes neišnaudoja geometrinei algebrai būdingos rangų struktūros, kuri yra prarandama perėjus į matricinį vaizdavimą. Bendras atvirkštinių multivektorių formules galima būtų užrašyti išskaidžius multivektorių ortogonalioje bazėje. Toks metodas [1] turi keletą didelių trūkumų: 1) išraiškos priklauso nuo pasirinktos bazės, 2) jų sudėtingumas, didėjant algebros dimensijai, auga eksponentiškai, 3) tos pačios dimensijos n = p + q, bet skirtingų signatūrų (p,q) geometrinėms algebroms  $Cl_{p,q}$  formulės skiriasi.

Tik gerokai vėliau buvo pastebėta [2], kad algebroms, kurių dimensija neviršija penkių,  $p+q \leq 5$ , atvirkštinius multivektorius galima elegantiškai užrašyti bekordinatėje formoje kaip pradinio mutivektoriaus A ir įvairių jo rango inversijų  $A_{\bar{r}}$  (brūkšnelis virš indekso žymi, kad koeficiento prie ranko r bazinių elementų ženklas yra pakeičiamas į priešingą), tam tikrą sandaugą. Pavyzdžiui, algebroms kurių n = 3, ši formulė atrodo taip:  $A^{-1} = \frac{C(AC)_3}{AC(AC)_3}$ , kur  $C = A_{\bar{1},\bar{2}}$ . Deja, n = 6 algebroms tokio pavidalo formulės iki šiol niekam nepavyko rasti.

Pranešime mes parodome, kad atvirkštinių multivektorių formules visgi galima užrašyti ir didesnės dimensijos algebroms, jei paprastą multivektorių sandaugą pakeisime multivektorių multitiesine kombinacija. Tokią kombinaciją mes išreikštai apskaičiavome n = 6 geometrinei algebrai [3]. Kadangi į gautą formulę įeina tik geometrinė sandauga ir rangų inversija (involiucijos operacija), tai ta pati formulė tinka bet kokios signatūros algebroms. Panašiai kaip ir n = 4 atveju tokių formulių galima surasti ne vieną. Nors visos jos leidžia apskaičiuoti atvirkštinius, tačiau skaičiavimo efektyvumo požiūriu gerokai skiriasi. Mažiau rango inversijų turinti formulė nebūtinai yra pati efektyviausia. Daugiau involiucijų turinti formulė gali būti spartesnė, nes kiekviename sumos naryje sumažėja galutiniame rezultate išsiprastinančių narių.

Atvirkštinių multivektorių išvedimas yra gan sudėtingas, todėl sunkiai įsivaizduojamas be simbolinės kompiuterinės algebros. Savo darbui mes sukūrėme specialiai tam skirtą *Mathematica* sistemos paketą [4], kuris leidžia greitai ir patogiai sudauginti bet kurios geometrinės algebros multivektorius, o taip pat rasti jų matricinius vaizdavimus. Gautos formulės, kurios yra pateikiamos 1 lentelėje, buvo patikrintos simboliškai ir skaitiškai, apskaičiuojant įvairių algebrų atvirkštinius multivektorius. Išreikštinės formulės taip pat yra labai naudingos nustatant atvirkštinio multivektoriaus egzistavimo sąlygas.

1 lentelė. Bendriausios formos multivektorių atvirkštinių formulių išraiškos geometrinėse algebrose, kurių dimensija  $p + q \le 6$ . Kai p + q = 6 antroji, daugiau involiucijų turinti formulė, yra spartesnė.

$Cl_{p,q}$	$A^{-1}$
r / 1	

p + q = 0	$\frac{B}{AB}$ , $B = 1$
p+q=1	$\frac{B(AB)_{\bar{1}}}{AB(AB)_{\bar{1}}}, \qquad B=1$
p+q=2	$\frac{C}{AC},  C = A_{\bar{1},\bar{2}}$
p+q=3	$\frac{C(AC)_{\bar{3}}}{AC(AC)_{\bar{3}}},  C = A_{\bar{1},\bar{2}}$
p+q=4	$\frac{D}{AD}, \qquad D = A_{\overline{2},\overline{3}}(AA_{\overline{2},\overline{3}})_{\overline{1},\overline{4}}$
	arba $D = A_{\bar{1},\bar{2}} (AA_{\bar{1},\bar{2}})_{\bar{3},\bar{4}}$
p+q=5	$\frac{D(AD)_{5}}{AD(AD)_{5}}, \qquad D = A_{\bar{2},\bar{3}}(AA_{\bar{2},\bar{3}})_{\bar{1},\bar{4}}$
p+q=6	$\frac{G}{AG}$ ,
	$G = \frac{1}{2} A_{\bar{2}}_{\bar{3}}_{\bar{6}} \left( H(HH)_{\bar{1}}_{\bar{4}}_{\bar{5}} + 2 \left( H_{\bar{4}}(H_{\bar{4}}H_{\bar{4}})_{\bar{1}}_{\bar{4}}_{\bar{5}} \right)_{\bar{4}} \right)$
	arba
	$G = \frac{1}{3} A_{\bar{2},\bar{3},\bar{6}} \Big( (H(HH_{\bar{1},\bar{5}})_{\bar{4}})_{\bar{1},\bar{5}} \Big)$
	$+2(H_{\bar{4},\bar{5}}(H_{\bar{4},\bar{5}}H_{\bar{1},\bar{4}})_{\bar{4}})_{\bar{1},\bar{4}})$
	$\operatorname{kur}  H = AA_{\overline{2},\overline{3},\overline{6}}$

Reikšminiai žodžiai: Geometrinė (Cliffordo) algebra, atvirkštinis multivektorius, kompiuterinės algebros sistema

- J. P. Fletcher, Clifford numbers and their inverses calculated using the matrix representation, in *Applications of Geometric Algebra in Computer Science and Engineering*, edited by L. Dorst, C. Doran, and J. Lasenby, pages 169–178, Birkhäuser Boston, 2002.
- [2] P. Dadbeh, Inverse and determinant in 0 to 5 dimensional Clifford algebra, arXiv: 1104.0067 (Mar. 2011).
- [3] A. Acus and A. Dargys, submitted to Advances in Applied Clifford algebras
- [4] A. Acus and A. Dargys, *Mathematica* package, 2017, https://github.com/ArturasAcus/GeometricAlgebra.

# Skleidimo harmoninio osciliatoriaus bazėje su skirtingais variaciniais parametrais kiekvienai vidinei Jakobi koordinatei konvergavimo greičio tyrimas skaičiuojant kuloninės trijų netapatingų dalelių sistemos nereliatyvistinę pagrindinės būsenos energiją

# Investigation of the rate of convergence of the harmonic oscillator expansion method with different sizes in the Jacobi coordinates for calculation of non-relativistic ground state energy of Coulomb non-identical three-particle systems

<u>Algirdas Deveikis</u> Vytauto Didžiojo universitetas, Informatikos fakultetas, Vileikos 8, LT-44404 Kaunas <u>algirdas.deveikis@vdu.lt</u>

Harmoninio osciliatoriaus (HO) bazė pasižymi daugeliu labai svarbių ir unikalių savybių labai daugiadalelių kvantinių sistemų supaprastinančių skaičiavimus [1]. Deja, konvergavimo greitis trimatėje HO bazėje realistiniams sąveikos potencialams yra ganėtinai žemas. Darbe [2] pasiūlytas naujas tridalelės sudarymo ir taikymo HO bazės variaciniuose skaičiavimuose metodas, kuriame pasiūlyta įvesti kiekvienai vidinei Jakobi koordinatei atskirą variacinį parametrą. Pritaikytas kuloninių trijų netapatingų dalelių sistemų nereliatyvistinės pagrindinės būsenos energijos skaičiavimams, metodas pademonstravo žymų naujos HO bazės pranašumą lyginant su tradicine HO baze taikančia tik vieną netiesinį variacinį parametrą.

Šiame darbe atliktas metodo [2] konvergavimo greičio tyrimas skaičiuojant kuloninės trijų netapatingų dalelių sistemos nereliatyvistinę pagrindinės būsenos energiją. Atlikta trijų netapatingų dalelių sistemų pagrindinės būsenos energijų apskaičiuotų dviejų ir vieno netiesinio parametro atveju priklausomybės iki 28 HO sužadinimo kvantų skaičiaus ekstrapoliacija. Gauti rezultatai leidžia įvertinti ir palyginti HO sužadinimo kvantų skaičius reikiamus norimam skaičiavimo tikslumui pasiekti, kaip dviejų netiesinių parametrų, taip ir tradiciniu metodu. 1 lentelėje pateikti rezultatai iliustruoja žymų naujo metodo (rezultatai pažymėti 2) pranašumą lyginant su tradiciniu metodu (rezultatai pažymėti 1).

1 lentelė. Kuloninių trijų netapatingų dalelių sistemų nereliatyvistinės pagrindinės būsenos energijos skaičiavimo tikslumo vertės, esant skirtingiems harmoninio osciliatoriaus sužadinimo kvantu skaičiams.

				4
Tiksl.	<i>Kdt</i> (1)	<i>Kdt</i> (2)	µdt (1)	µdt (2)
10-2	53	29	130	24
10-3	83	55	189	47
10-4	114	81	249	70
10-5	145	107	308	93
10-6	176	134	367	116
10-7	207	160	426	139
10-8	237	186	486	162

Variacinių skaičiavimų rezultatų bazėse su vienu ir dviem parametrais konvergavimo greičių palyginimas nagrinėtų trijų dalelių sistemų atvejams pateiktas 1 pav. Iš gautų rezultatų matome, kad kuo didesnė dalelių masių asimetrija, tuo didesnis dviejų parametrų įvedimo efektas: išauga rezultatų tikslumas ir padidėja variacinių skaičiavimų konvergavimo greitis, kaip tai matome Kdt ir  $\mu dt$  atvejais.



1 pav. Kuloninių trijų netapatingų dalelių sistemų nereliatyvistinės pagrindinės būsenos energijos variacinio skaičiavimo konvergavimo greičiai

Mažėjant masių skirtumui tarp lengvesniosios ir sunkesniųjų dalelių, energijos skaičiavimo rezultatų tikslumas ir konvergavimo greitis abiem metodais artėja, kaip iliustruota  $\mu dt$  ir  $\mu Kp$  atvejais. Labai asimetrinėms masių atžvilgiu sistemoms, kaip edt, variaciniai skaičiavimai su vienu netiesiniu parametru nagrinėtoms sužadinimo energijoms net neduoda neigiamų energijų. Priešingai, variaciniai skaičiavimai su dviem netiesiniais parametrais tokioms sistemoms pasižymi didžiausiu skaičiavimų tikslumu ir aukščiausiu konvergavimo greičiu.

*Reikšminiai žodžiai: harmoninio osciliatoriaus bazė, variacinis metodas, kuloninės trijų dalelių sistemos.* 

#### Literatūra

[1] G.P. Kamuntavičius, J. Math. Phys. 55, 042103 (2014).

[2] A. Deveikis, Lith. J. Phys. 57, (2017, priimta spaudai).

#### 1,3,4-Oksadiazolio chromoforų struktūros ir elektroninio spektro modeliavimas

# Simulation of Structure and Electronic Spectra of 1,3,4-Oxadiazole Chromophores

Ignas Gaižiūnas<sup>1</sup>, Juozas Šulskus<sup>1</sup>, Vidmantas Gulbinas<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius ignas.gaiziunas@gmail.com

Oksadiazolio chromoforomis (1 pav.) modifikuotų PPI dendrimerų ir PEI polimerų sugerties ir fluorescencijos spektrų eksperimentinių matavimų metu buvo pastebėtas fluorescencijos spektro poslinkis plèvelèse ir lyginant spektru chloroformo tirpale [1]. Chloroformo (CHCl<sub>3</sub>) tirpale sugerties maksimumo spektras yra 300-320 nm srityje ir fluorescencijos spektras - 370-390 nm srityje. Plonų plėvelių fluorescencijos spektro maksimumas yra pasislinkęs į 390-450 nm sritį. Taip pat eksperimentiškai užfiksuotas papildomas oksadiazoliu modifikuotų PEI polimerų plėvelių fluorescencijos maksimumas 550 nm bangos ilgių srityje [2].



1 pav. Modeliuojamas oksadiazolio monomeras

Darbo tikslas yra naudojantis kvantinės chemijos tankio funkcionalo ir nuo laiko priklausančio tankio funkcionalo (TDDFT) metodais paaiškinti 1,3,4-oksadiazolio chromoforos grupėmis modifikuotų dendrimerų bei polimerų chloroformo tirpalų ir plėvelių eksperimentinį sugerties ir flourescencijos spektra.

Darbe naudojantis tankio funkcionalo teorija yra modeliuojama oksadiazolio monomerų, dimerų ir didesnių kompleksų struktūra ir elektroniniai spektrai. Darbo metu buvo nustatytas tinkamiausias tankio funkcionalas skaitmeniškai modeliuoti oksadiazolį yra PBE1PBE. Atlikus skaičiavimus paaiškinti eksperimentiniai oksadiazolio monomerais modifikuotu PPI dendrimerų ir PEI polimerų chloroformo tirpalo sugerties ir fluorescencijos spektrai. Darbo metu apskaičiuoti oksadiazolio monomero geometrijos pokyčiai vykstant pirmosios sužadintos būsenos reklaksacijai. Nustatyta labiausiai tikėtina monomerų tarpusavio orientacija oksadiazolio dimere. Skaičiuojant

šio dimero spektrus buvo gauti draustiniai šuoliai, kurie gali būti laikomi krūvio pernašos šuoliais. Nustatyta, kad sugerties spektrai tiek tirpaluose, tiek plėvelėse iš esmės yra atskirų monomerų sugerties spektras. Fluorescencijos spektras 390-450 nm srityje taip pat gali būti aiškinamas spinduliavimu iš monomeru relaksavusios sužadintos būsenos. Kvantinės chemijos metodais gavome, kad monomerų sąveika dimeruose fluorescencijos spektrą keičia labai mažai. Darbo metu nustatyta, kad naudojantis tik kvantinės chemijos TDDFT metodais nepavyksta nustatyti fluorescencijos spektro maksimumo atsiradimo 550 nm srityje modifikuotų PEI polimerų plėvelėse. Šio maksimumo atsiradimas gali būti aiškinamas didesnių agregatų fluorescencija ir tolimesniam aprašymui turėtų būti naudojama eksitoninė teorija.

Kompiuteriniai skaičiavimai buvo atliekami naudojant VU atviros prieigos centro "HPC Saulėtekis" superkompiuterį.

Reikšminiai žodžiai: chromoforai, oksadiazolis, elektroniniai spektrai, modeliavimas.

- S. Hernández-Ainsa, J. Barberá, M. Marcos, J. L. Serrano, Macromolecules 45, 1006, (2012).
- [2] V.Gulbinas, (Fizinių ir technologijos mokslų centras, Vilnius), private commun.

#### Pradinių bakteriorodopsino fotociklo būsenų retinalio molekulės modeliavimas

#### Modeling retinal molecule structure for the primary photocycle of bacteriorhodopsin

Karolis Jasinevičius<sup>1</sup>, Leonas Valkūnas<sup>1,2</sup>, Mindaugas Mačernis<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius karolis.jasinevicius@ff.stud.vu.lt

Rodopsino baltymų optinėmis ir elektrinėmis savybėmis remiasi modernūs biotechnologiniai prietaisai, tokie kaip spalvai jautrūs jutikliai, dirbtiniai tinklainės implantai, šviesos baterijos. Fotoaktyvių rodopsinų veikimui tirti yra naudojama modelinė sistema - bakteriorodopsino baltymas [1]. Jį sudaro septynios transmembraninės spiralės, tarp kurių yra chromoforas retinalio molekulė, kovalentiškai susijungusi su lizino aminorūgštimi per protonuotą Šifo bazę (1 pav.). Sugėrus regimosios šviesos fotoną įvyksta retinalio izomerizacija, kuri inicijuoja bakteriorodopsino fotocikla, apimantį kelias tarpines būsenas, žymimas raidėmis J, K, L, M, N ir O, po kurių bakteriorodopsinas grįžta į pradinę būseną, žymimą BR. Šio fotociklo rezultatas yra protono pernaša iš citoplazminės į išorinę membranos pusę [2,3].



1 pav. all-trans retinalio molekulės cheminė struktūra

Bakteriorodopsino pagrindinės ir tarpinių fotociklo būsenų struktūros, nustatytos rentgeno spindulių difrakcijos bei kitais metodais, leido gerai suprasti grubaus modelio protono pernašos mechanizmo savybes[2,3]. Tačiau detalesnį vaizdą susidaryti yra sudėtinga dėl ankstyvujų fotociklo būsenu kristalografinėse struktūrose esančių reikšmingu skirtumų. Tuo tarpu pradinis protono atsiskyrimas nuo Šifo bazės remiasi skirtingais keliais įvairiais modeliais. Šio darbo tikslas yra naudojantis tankio funkcionalo teorijos (DFT) metodika sumodeliuoti retinalio molekulės pagrindinės ir sužadintos būsenų struktūras pradiniame bakteriorodopsino fotocikle, nustatyti baltymo aplinkos įtaką šioms struktūroms ir suskaičiuoti jų energijos paviršius.

Pradinės Šifo bazės izomerizacija yra matoma tarp BR ir L būsenų, todėl skaičiavimai buvo atliekami su BR ir L būsenų struktūromis. Visi skaičiavimai buvo atliekami Gaussian09 programiniu paketu. Buvo skaičiuojama dviem atvejais – su protonuota ir neprotonuota Šifo baze. Retinalio struktūros geometrijos optimizacija buvo atlikta naudojant B3LYP/cc-pVTZ. Struktūrų geometrijos optimizacija baltymo aplinkoje buvo atlikta pasinaudojant QM/MM metodika: ONIOM. Baltymo aplinkos struktūriniai elementai buvo modeliuojami pusempire PM6 metodika.

Atlikus BR būsenos retinalio geometrijos optimizaciją pirmo sluoksnio baltymo aplinkoje protonuotos Šifo bazės atveju gauta, kad optimizuota struktūra yra artima neoptimizuotai kristalografinių duomenų struktūrai. Palaipsniui mažinant baltymo aplinkos struktūrų skaičių, buvo nustatyta 10 struktūrinių grupių, su kuriomis dar gaunamos BR būsenai būdingos retinalio deformacijos.

Atlikus L būsenos retinalio geometrijos optimizaciją su protonuota Šifo baze, buvo gauta, kad optimizuota struktūra taip pat yra artima BR būsenos retinalio struktūrai. Protonuoto retinalio atveju iš kristalografinių duomenų turima L būsenos retinalio struktūra minimumo neturi.

Atlikus retinalio geometrijos optimizacijas neprotonuotos Šifo bazės atveju gautas minimumas, kur optimizuotos struktūros buvo artimos L būsenos retinalio struktūrai iš kristalografinių duomenų. Toks rezultatas buvo gautas nepriklausomai nuo to, ar pradinė struktūra buvo BR, ar L būsenos. Taip pat nustatyta, kad šiai struktūrai gauti yra reikalingos tos pačios 10 aplinkos struktūrinių grupių, kaip ir protonuotos BR būsenos atveju.

Paskaičiuoti BR ir L būsenų retinalių energijos paviršiai. Su protonuota Šifo baze gaunamas tik vienas minimumas, atitinkantis BR būseną, tuo tarpu neprotonuotos Šifo bazės atveju gaunamos dvi stabilios struktūros, atitinkančios BR ir L būsenas.

BR ir L būsenų su protonuota ir neprotonuota Šifo baze optimizacijos rezultatai leidžia įtarti, kad L būsenoje jau yra įvykusi protono pernaša į Asp85 grupę ir, kad Šifo bazė yra deprotonuojama netrukus po retinalio sužadinimo šviesa.

Reikšminiai žodžiai: bakteriorodopsinas, retinalis, tankio funkcionalo teorija.

- C. Wickstrand, R. Dods, A. Royant, R. Neutze, *Bacteriorhodopsin:* Would the real structural intermediates please stand up?, Biochimica et Biophysica Acta, Volume 1850, 536-553, (2015).
- [2] J.K. Lanyi, *Bacteriorhodopsin*, Annual Review of Physiology, Volume 66, 665-688, (2004).
- [3] B.P. Kietis, M. Macernis, J. Sulskus, L. Valkunas, *Estimation of the permanent dipole moment of Bacteriorhodopsin*, Lith. J. Phys. 50, 451–462, (2010).

#### Aukščių variacijos dideliais atstumais ir šiurkštumo kinetika augančiuose paviršiuose

#### Long-range height variations and kinetics of roughness in surface growth

Vaidas Juknevičius, Jogundas Armaitis, Julius Ruseckas

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

vaidas.juknevicius@tfai.vu.lt

Gamtoje besiformuojantys ir mokslinių tyrimų ar technologinių procesų metu sukuriami paviršiai yra svarbūs bei įdomūs tiek dėl savo praktinių taikymų, tiek ir teoriniu požiūriu.

Paviršių geometrinė struktūra didele dalimi nulemia jų savybes, todėl svarbu turėti kiekybinę teoriją tai struktūrai aprašyti. Netvarkiems paviršiams charakterizuoti pasitelkiami statistiniai dydžiai, tokie kaip paviršiaus šiurkštumas bei kiti iš aukščio skirstinių ir koreliacijos funkcijų išvedami dydžiai [1, 2]. Kadangi nemažai daliai nagrinėjamų netvarkių paviršių būdingos skirtingose skalėse atsikartojančios panašios struktūros, svarbios yra ne tik minėtų dydžių globalios vertės, bet ir jų kitimo pobūdis keičiant stebėjimo mastelį, t.y., savybės skalės kitimo atžvilgiu (angl. *scaling*). Remiantis šiomis savybėmis, galima didelę dalį labai skirtingais būdais susiformavusių paviršių suskirstyti į vos kelias universalumo klases, nusakančias bendras jų savybes.

Svarbų vaidmenį paviršių tyrimuose atlieka modeliavimas, nes supaprastinti modeliai, gebantys sugeneruoti stebimiems ekvivalenčius paviršius, leidžia geriau suprasti realiai veikiančius formavimosi procesus.



1 pav. Paviršių šiurkštumo w(t) dinamika įvairiems sistemos dydžiams N ir atitinkami galios spektrai W(f). Brūkšninės yra linijos pritaikytos (2) pavidalo funkcijos.

Šiame darbe nagrinėjamas vienas iš paviršių formavimosi modelių, išreikštas apibendrintąja *Kuramoto-Sivashinsky* (KS) lygtimi,

$$\partial_t h = -\nabla^2 h - \nabla^4 h - \alpha \nabla^2 (\nabla h)^2 + (\nabla h)^2, \qquad (1)$$

aprašančia aukščio profilio  $h(\mathbf{r}, t)$  laikinę evoliuciją. Tokio pavidalo lygtys gana tiksliai atkartoja plonų amorfinių sluoksnių augimo eksperimentinius rezultatus [3]. Bedimensėje formoje lygtis (1) teturi vieną nepriklausomą parametrą  $\alpha$ , lemiantį augančio paviršiaus savybes. Net paprastoji KS lygtis (kai  $\alpha = 0$ ) dvimačiu atveju yra sukėlusi nemažai diskusijų, ir kol kas nėra iki galo išsiaiškinta, kuriai universalumo klasei ją galima priskirti.

Šiame darbe pristatomi skaitmeninio modeliavimo rezultatai praplečia diskusiją bendresniam atvejui  $(-0.12 \le \alpha \le 5)$  ir parodo, kad baigtinio dydžio sistemose gautų paviršių savybės skalės kitimo atžvilgiu stipriai priklauso nuo parametro  $\alpha$  vertės, o pernormavimo grupės (angl. *renormalization group*) numatomas asimptotinis elgesys, neturintis priklausyti nuo  $\alpha$ , gali būti nepasiekiamas net ir labai didelėms sistemoms.

Po pereinamųjų (šiurkštėjimo ir grubėjimo) procesų, pagal (1) besivystančių paviršių kinetika tampa stacionari – jų statistiniai parametrai (chaotiškai) svyruoja apie savo vidutines vertes. Stacionarų režimą pasiekusių paviršių sandara pasižymi aiškiai atsiskiriančiomis smulkiąja struktūra (netvarkiai išsidėsčiusiais panašaus dydžio kalniukais) ir lėtomis aukščio variacijomis, kurioms būdingas skalės invariantiškumas. Tik pastarosios gali būti nagrinėjamos universalumo atžvilgiu.

Nagrinėjant globalaus paviršiaus šiurkštumo  $w(t) = \sqrt{\langle (h(\mathbf{r}, t) - \bar{h}(t))^2 \rangle_{\mathbf{r}}}$  kinetikos (žr. 1 pav.) ir vidutinių verčių  $w_{\text{sat}}^2 = \langle [w(t)]^2 \rangle_t$  priklausomybes nuo sistemos dydžio N, gaunami laipsninės formos paviršiaus spektrai mažiems bangos skaičiams, liudijantys apie skalės invariantiškumą dideliais atstumais, bei dinaminiai rodikliai (angl. *dynamic exponents*). Šie dydžiai, charakterizuojantys erdvinį-laikinį sistemos elgesį, stipriai priklauso nuo parametro  $\alpha$  nagrinėjamame sistemų dydžių ruože.

Gauti paviršiaus šiurkštumo fliuktuacijų spektrai turi apibendrintąją Lorenco formą, kur parametras  $\beta$  gali būti tiek didesnis, tiek mažesnis už  $\beta = 2$  (paprastąją Lorenco formą, atitinkančią eksponentinę kinetiką):

$$W(f) = A \frac{f_0}{(f_0^2 + f^2)^{\beta/2}} + B.$$
 (2)

Reikšminiai žodžiai: paviršiai, skalės invariantiškumas

- [1] A.-L. Barabasi, H. E. Stanley, *Fractals Concepts in Surface Growth* (Cambridge, 1995).
- [2] P. Meakin, Fractals, Scaling and Growth Far from Equilibrium (Cambridge, 1998).
- [3] M. Raible, S. J. Linz, P. Hänggi, Phys. Rev. E 64(3), 031506 (2001).
- [4] V. Juknevicius, Eur. Phys. J. B 89(2), 1-8 (2016).
- [5] V. Juknevicius, J. Ruseckas, J. Armaitis, arXiv:1609.09316 (2016), priimta publikacija.

#### Radiacinių šuolių parametrai volframo jonuose su atviru 4d sluoksniu

#### Spectroscopic parameters of emission transitions in tungsten ions with open 4d shell

Rasa Karpuškienė, Romualdas Kisielius, Pavelas Bogdanovičius

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

rasa.karpuskiene@tfai.vu.lt

Keletą pastarųjų metų išsamiai tiriame volframo 4d jonus SU atviru sluoksniu pagrindinėje konfigūracijoje, taikydami kvazireliatyvistinį artinį reliatyvistiniams efektams (QR)iskaityti, 0 koreliacinius efektus įskaitome taikydami konfigūracijų sąveikos (CI) metodą transformuotujų radialiųjų orbitalių bazėje.

Naujausiame mūsų darbe išsamiai išnagrinėtos  $W^{34+}$ pagrindinės konfigūracijos  $4p^64d^4$  ir sužadintų konfigūracijų komplekso  $4p^54d^5 + 4p^64d^34f$  lygmenų energijos, pateikti įvairių tipų emisijos šuolių spektroskopiniai parametrai [1]. Be to, remiantis palyginimu su eksperimentiniais ir kitų autorių teoriniais duomenimis, buvo nuosekliai įvertinti kvazireliatyvistiniu artiniu gaunamų šuolių tikimybių ir bangų ilgių neapibrėžtumai. Šiuo metu atliekamas analogiškas tyrimas  $W^{33+}$  jono pagrindinei konfigūracijai  $4p^64d^5$  ir sužadintoms konfigūracijoms  $4p^54d^6$  $+ 4p^64d^44f$ .

Šiame darbe pateiksime jonų W<sup>34+</sup> ir W<sup>33+</sup> stipriausių elektrinių dipolinių šuolių (E1) tikimybių analizę ir palyginimą su eksperimentiniais [2] bei kitų autorių teoriniais duomenimis [3,4].

Jonai W<sup>34+</sup> ir W<sup>33+</sup> yra sudėtingos sistemos. Kiekvieno iš jų pagrindinėje konfigūracijoje yra virš 30 lygmenų, o sužadintose, turinčiose atvirus 4p, 4d ir 4f sluoksnius, lygmenų skaičius jonui W<sup>34+</sup> yra 420 ir 525 jonui W<sup>33+</sup>. Iš daugumos sužadintų lygmenų yra leistini E1 šuoliai. Kadangi šuolių yra labai daug, detaliai išanalizuoti kiekvieno šuolio charakteristikas yra praktiškai neįmanoma. Gautus teorinius skaičiavimų rezultatus optimaliausia yra vaizduoti grafiškai.

Palyginimui pateikiame savo gautus rezultatus (1 pav.) ir dalį duomenų iš [4] (2 pav.). Šiuose brėžiniuose kiekvienas E1 šuolis pavaizduotas vertikaliu brūkšniu ties savo bangos ilgiu  $\lambda$ , o brūkšnio aukštis gA atitinka šuolio tikimybę A, padaugintą iš pradinio lygmens statistinio svorio g.

Kvazireliatyvistiniu artiniu gautus spektroskopinius parametrus palyginome su darbe [3] pateiktais rezultatais, naudodami vidurkių skaičiavimo metodus, pateiktus tame pačiame darbe. Gauti vidutiniai dydžiai leidžia palyginti ne tik skirtingais būdais gautus teorinius rezultatus tarpusavyje, bet ir įvertinti jų neapibrėžtumus bei tikslumą. Vėliau šiuos įvertinimus naudojame konkrečių šuolių tikimybių ir bangos ilgių, gautų kvazireliatyvistiniu artiniu, neapibrėžtumams nustatyti.



1 pav. Teorinės emisijos šuolių charakteristikos gautos QR artiniu.



2 pav. Teorinės šuolių charakteristikos iš [4] su instrumentine Gauso tipo gaubiamąja.

Pilnus tiriamų jonų spektroskopinių parametrų, įskaitant sužadinimo elektronais parametrus, rinkinius galima rasti Vilniaus universitete veikiančioje atviros prieigos sudėtingų atomų ir daugiakrūvių jonų duomenų bazėje ADAMANT (www.adamant.tfai.vu.lt/database)

*Reikšminiai žodžiai: volframas, radiaciniai šuoliai, kvazireliatyvistinis artinys.* 

#### Literatūra

[1] R. Karpuškienė, P. Bogdanovich and R. Kisielius, ADNDT **115-116** 385 (2017).

[2] R. Radtke, C. Biedermann, G. Fussmann, J.L. Schwob, P. Mandelbaum and R. Doron, Atomic and Plasma-Material Interaction Data for Fusion, vol. 13 (International Atomic Energy Agency, Vienna, 2007)

[3] R. Radtke, C. Biedermann, J.L. Schwob, P. Mandelbaum and R. Doron, Phys. Rev. A **64** 012720 (2001).

[4] C. S. Harte, C. Suzuki, T. Kato, H. A. Sakaue, D. Kato, K. Sato, N. Tamura, S. Sudo, R. D'Arcy, E. Sokell, J. White, G. O'Sullivan, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43 205004 (2010).
## Išorinės jėgos potencialų poveikis heterogeninės difuzijos procesams

## Influence of External Potentials on Heterogeneous Diffusion Processes

Rytis Kazakevičius, Julius Ruseckas

Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, 10222 Vilnius

rytis.kazakevicius@tfai.vu.lt

Brauno judėjimo vidutiniam kvadratiniam nuokrypiui būdinga tiesinė priklausomybė nuo laiko. Tačiau daugelyje sudėtingų sistemų galime stebėti procesus pasižyminčius vidutinio kvadratinio nuokrypio netiesiniu augimu laikui bėgant [1]. Tuomet sakoma, kad sistemoje stebima anomalioji difuzija. Anomalioji difuzija charakterizuojama netiesine vidutinio kvadratinio nuokrypio priklausomybe nuo laiko  $< \Delta x > t^{\theta}$ . Jeigu laipsnio rodiklis  $\theta$  (dar kitaip vadinamas anomaliosios difuzijos eksponente) kinta tarp 1 ir 2 turime taip vadinamą superdifuziją. Pirmą kartą superdifuzija eksperimentiškai buvo stebėta tiriant plastikinių mikrosferų difuziją ant besisukančios plokštelės [2]. Jeigu laipsnio rodiklis  $\theta$  yra mažesnis už vienetą ( $\theta < 1$ ) tai sakome jog turime subdifuziją. Atlikus matematinį modeliavimą buvo pasiūlyta, kad subdifuzija galėtų pasireikšti stebint polimerų difuziją pro nonoporas [3].

Neseniai buvo pasiūlyta, kad abu anomaliosios difuzijas atvejai gali būti modeliuojami kaip heterogeninės difuzijos procesas [4]. Herogeninės difuzijos procesui būdinga, kad difuzijos koeficientas priklauso nuo difunduojančios dalelės pozicijos. Heterogeninės difuzijos procesas buvo panaudomas modeliuoti polimerų subdifuziją ląstelės citoplazmoje [4, 6].

Heterogenimės difuzijos procesas su difuzijos koeficiento netiesine priklausomybe nuo dalelės koordinatės yra aprašomas Lanževeno lygtimi:

$$dx = \sigma |x|^{\eta} \circ dW_t \,. \tag{1}$$

x yra dalelės koordinatė,  $\eta$  - triukšmo multiplikatyvumo laipsnio rodiklis, parametras  $\sigma$  - triukšmo intensyvumas ir  $W_t$  - standartinis Vynerio (Wiener) procesas. Stochastinė diferencialinė lygtis (1) buvo interpretuojama pasinaudojant Stratonovičiaus (Stratonovich) interpretacija. Kad supraprastini skaitmeninį integravimą nuodosime Ito (Itô) interpretaciją:

$$dx = \frac{1}{2}\sigma^2 \eta |x|^{2(\eta-1)} x dt + \sigma |x|^{\eta} dW_t .$$
 (2)

Pirmasis narys lygties (2) dešinėje pusėje aprašo triukšmo indukuotą dreifą. Pastarasis dreifo narys atsiranda Laževeno lygtyje, aprašančioje Brauno judėjimą nehomogeninėje aplinkoje didelės trinties riboje, atlikus adiabatinę aproksimaciją [7]. Buvo parodyta, kad lygtis (1) generuoja signalus pasižyminčius netiesine vidutinio kvadratinio nuokrypio priklausomybe nuo laiko [8].

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \sim (\sigma^2 t)^{\frac{1}{1 - \eta}}$$
 (3)

Mes apibendrinome prieš tai aptartą modelį įvesdami pa-

pildomą išorinę jėgą

$$dx = \sigma^2 \left( \eta - \frac{\nu}{2} \right) x^{2\eta - 1} dt + \sigma x^\eta dW_t .$$
 (4)

 $\nu$  aprašo išorinės jėgos poveikį difunduojančiai dalelei. Parametras  $\nu$  taip pat yra stacionaraus galimų signalo verčių skirstinio eksponentė,  $P_0(x) \sim x^{-\nu}$ , jeigu dalelės difuzija yra apribota intervale  $x \in [x_{min}, x_{max}]$ . Čia  $x_{min}, x_{max}$  yra atspindinčios kraštinės sąlygos atitinkamai ties mažomis ir didelėmis x vertėmis

Nustatyta, kad anomaliosios difuzijos vidutinio kvadratinio nuokrypio eksponentė nepriklauso nuo išorinės jėgos poveikio. Išorinės jėgos įvedimas tik pakeičia anomaliosios difuzijos koeficiento vertę. Anomalioji difuzija pasireiškia tik parinkus atitinkamas parametrų vertes. Turi būti tenkinamos nelygybės  $\nu < 3$  ir  $\eta < 1$  (ar  $\nu < 1$  ir  $\eta < 1$ ). Įvedimas dar vienos išorinės jėgos neproporcingos triukšmo indukuotam triukšmui nulemia sutrumpėjusį laiko intervalą kur galime stebėti anomaliąją difuziją.

Reikšminiai žodžiai: anomalioji difuzija, heterogeninės difuzijos procesas, Brauno judėjimas

- [1] R. Metzler and J. Klafter, Phys. Rep. 339, 1 (2000)
- [2] T. H. Solomonm, E. R. Weeks and H. L. Swinne, Phys. Rev. Lett. 71, 3975 (1993)
- [3] J. L. A. Dubbeldam A. Milchev1, V. G. Rostiashvili1 and T. A. Vilgis, EPL, 79, 18002 (2007)
- [4] A. G. Cherstvy, A. V. Chechkin and R. Metzler, New J. Phys. 15, 083039, (2013)
- [5] A. G. Cherstvy, A. V. Chechkin and R. Metzler, Soft Matter 10, 1591 (2014)
- [6] T. Kühn, T. O. Ihalainen, J. Hyväluoma, N. Dross, S. F. Willman, J. Langowski, M.. Vihinen-Ranta and J. Timonen, PLoS One 6, e22962 (2011)
- [7] J. M. Sancho, M. San Miguel, and D. Dürr, J. Stat. Phys. 28, 291 (1982).
- [8] M. Heidernätsch, On the diffusion in inhomogeneous systems, Ph.D. thesis, Technische Universität Chemnitz, Faculty of Sciences, Institute of Physics, Complex Systems and Nonlinear Dynamics (2015).

# Fe<sup>8+</sup> jonizacija elektronais

# Electron impact ionization of $Fe^{8+}$

<u>Aušra Kynienė</u>, Saulius Pakalka, Valdas Jonauskas, Šarūnas Masys Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius ausra.kyniene@tfai.vu.lt

Elektronų smūgiais jonizuota plazma stebima žvaigždėse, sprogusiu supernovu vietoje susidariusiuose ūkuose, galaktikose ir jų spiečiuose. Ši plazma taip pat milžiniškuose susidaro ir eksperimentiniuose termobranduoliniuose reaktoriuose. Modeliuojant ir interpretuojant tokią plazmą reikia žinoti tikslias įvairių jonų ir atomų nuo vandenilio iki cinko atomines charakteristikas: bangos ilgius ir šuolių tikimybes, energijos lygmenis, sužadinimo ir jonizacijos elektronais skerspjūvius bei spartos koeficientus, rekombinacijos skerspjūvius bei spartos koeficientus [1].

 $Fe^{8+}$  jonas ypatingai svarbus Saulės ir žvaigždžių fizikai. Didelis šio jono kiekis yra stebimas prie  $7x10^5$  K elektronų energijos. Šio jono emisijos spektrai registruojami santykinai šaltame Saulės vainike, jos fiksuotos ir EUV spektrometru esančiu *Hinode* palydove [2]. Geležies jonų atominiai duomenys sudaro galimybes nustatyti stebimos plazmos temperatūrą ir tankį.

Iki šiol, geležies jono jonizacijos elektronais skerspjūvių tikslaus eksperimentinio tyrimo nebuvo atlikta. Tai susiję su  $Fe^{8+}$  metastabilių būsenų gausa eksperimente. Sužadinto jono  $3p^5$  3d  $^3F_4$  lygmens apytikslė gyvavimo trukmė yra apie 970 s. TSR sunkiųjų jonų žiede, kuris yra Max-Plack institute Vokietijoje, yra įleidžiami 82,1 MeV  $^{56}Fe^{8+}$  jonai. Žiede, šie jonai iki eksperimento būna apie 15 s ir per šį laiką suyra didžioji dalis sužadintose būsenose esančių jonų, išskyrus metastabilioje būsenoje esančius  $^3F_4$ jonus. Eksperimento metu yra registruoti pagrindinės ir sužadintos būsenų jonizacijos elektronais skerspjūviai [2].

Išmatuoti skerspjūviai buvo palyginti su prieš tai atliktais skaičiavimais, gautais suvidurkintų konfigūracijų, iškraipytųjų bangų artinyje (CADW) [3], ir nustatyta, kad eksperimento metu apie 30 - 42% jonų yra metastabilioje sužadintoje būsenoje. Deja šiuose skaičiavimuose nebuvo atsižvelgta į radiacinį gesinimą. Taip pat reikalingi tikslesni tyrimai, nagrinėjant šuolius tarp lygmenų.

Šiame darbe buvo tirti jonizacijos elektronais skerspjūvai  $Fe^{8+}$  jonui. Buvo atliktas tiesioginės jonizacijos ir sužadinimo-autojonizacijos procesų tyrimas pagrindinės  $3s^2 3p^6$  konfigūracijos ir pirmos sužadintos  $3s^2 3p^5 3d$  konfigūracijos lygmenims. Įvertinti nagrinėtų sužadintų konfigūracijų lygmenų suirimai vykstant elektriniams dipoliniams šuoliams. Skaičiuojant sužadinimo-autojonizacijos skerspjūvius, buvo atsižvelgta į vienelektronius sužadinimus iš 2s, 2p, 3s, 3p sluoksnių į aukštesnius sluoksnius iki  $n \leq 20$ .

Energijos lygmenys, elektrinių dipolinių šuolių ir Ožė šuolių tikimybės, kaip ir sužadinimo bei jonizacijos elektronais skerspjūviai buvo apskaičiuoti FAC paketu, kuriame realizuotas Dirako-Foko-Sleiterio artinys [4]. Tiesioginės jonizacijos bei sužadinimo elektronais skerspjūviai buvo tirti iškraipytųjų bangų artinyje. Energijos lygmenys, sužadinimai ir tiesioginė jonizacija elektronais, radiaciniai dipoliniai ir Ožė šuoliai buvo skaičiuoti konfigūracijoms ir lygmenims.

Nustatyta, kad metastabilių būsenų užpilda eksperimento metu buvo lygi ≈20%. 1 pav. pateiktos jonizacijos elektronais skerspjūvių eksperimentinės vertės, kurios palygintos su mūsų gautais skerspjūviais. Eksperimento metu modeliavimui naudoti CADW tiesioginės jonizacijos skerspjūviai yra didesni nei suskaičiuoti Dirako-Foko-Sleiterio artinyje jonizacijos skerspjūviai bei modeliuojant užpildas [2] nebuvo atsižvelgta į radiacinį suirimą, dėl kurio netiesioginės jonizacijos elektronais skerspjūvių vetės taip pat sumažėja.



1 pav. Metastabilių būsenų įvertinimo modeliavimas. Ryškūs juodi taškai - eksperimentas [2], blankūs juodi taškeliai – eksperimento paklaidos. CADW duomenys [2]: ištisinė juoda linija – 30% metastabilios būsenos, punktyrinė- 100%. Mūsų skaičiavimai: mėlyna – 0%, raudona – 20%, žalia – 30% metastabilios būsenos.

Reikšminiai žodžiai: jonizacijos skerspjūviai, geležis, jonizacija, sužadinimai

- [1] M. Hahn, J. Phys: Conf. S. 488, 012050 (2014).
- [2] M. Hahn ir kiti, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 49, 084006 (2016).
- [3] M.S. Pindzola ir kiti, Nucl. Fusion Spec. Suppl. 27, 21 (1987).
- [4] M. F. Gu, Can. J. Phys. 86, 675 (2008).

# Teorinė Si<sup>+</sup> ir Ti<sup>+</sup> jonų energijos spektro priklausomybė nuo smulkiosios struktūros konstantos

# Theoretical Studies of Si<sup>+</sup> and Ti<sup>+</sup> Ions Energy Spectra Dependence on Fine-Structure Constant

Donatas Liupševičius<sup>1</sup>, Pavel Rynkun<sup>1</sup>, Laima Radžiūtė<sup>1</sup>, Gediminas Gaigalas<sup>1</sup>, Jacek Bieroń<sup>2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius, Lithuania <sup>2</sup>Instytut Fizyki imienia Mariana Smoluchowskiego, Uniwersytet Jagielloń, Kraków, Poland donatas.liupsevicius@ff.stud.vu.lt

Contemporary atomic theory, using numerical methods, allows to calculate energy spectra, transition energies and probabilities, interactions with external fields, hyperfine interaction shifts, and other effects in multielectron atoms and ions. In some cases these methods and appropriate computational strategies allow to reach accuracies of 1% or better, compared to experimental results.

Paul Dirac was the first to mention a possible variability of fundamental constants in expanding universe [1]. Such a change may manifest itself in spectra of distant quasars, due to the dependence of atomic energy levels on the fine-structure constant  $\alpha$ , which is responsible for the strength of electromagnetic interaction between electric charges. So far the researches on the time and space variability of  $\alpha$  yield inconclusive results — there are indications of directional dependence [2], but no definite time variation of  $\alpha$  has been confirmed yet. One of the methods relies on comparing the transitions frequencies in quasar spectra with present laboratory values.

In this work Si<sup>+</sup> and Ti<sup>+</sup> ions energy spectra and their  $\alpha$ -dependence are calculated using Grasp2k [3] relativistic atomic structure package. In order to calculate energy spectra, multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) approach and relativistic configuration interaction (RCI) method, which includes Breit and quantum electrodynamic (QED) corrections (vacuum polarization (VP) and self-energy (SE)), are used [4]. Then, calculated energy spectra values are compared to values recommended by the National Institute of Standards and Technology. Subsequently, energy spectra are calculated using the same method with different  $\alpha$  constant value. A particular transition frequency  $\omega$  dependence on  $\alpha$  constant may be approximately expressed by linear function:

$$\omega = \omega_0 + qx,\tag{1}$$

where

$$x = \left[ \left( \frac{\alpha_0}{\alpha} \right)^2 - 1 \right]. \tag{2}$$

 $\omega_0$  is the laboratory value of the transition energy (i.e. with contemporary  $\alpha$  value  $\alpha = \alpha_0$ ).

The *q* coefficient, which is basically an inclination coefficient, represents the transition energy sensitivity to  $\alpha$  variation. Calculations of *q* coefficients make it possible to compare laboratory spectra with quasar absorption spectra. This in turn yields an estimate of  $\alpha$  variation. Also, calculations show the dependence of *q* coefficient on relativistic effects.

The first column of the Table 1 presents the calculated q coefficients for several energy levels of Si II and Ti II ions, together with Breit and QED corrections. Final qcoefficients with all calculated corrections are presented in the last column.

Table 1. Si II and Ti II q parameter values including different corrections.

Energy levels	<i>q<sub>MCDHF</sub></i>	$\Delta q_{Breit}$	$\Delta q_{VP}$	$\Delta q_{SE}$	q
	Si II				
$3s^2 3p  {}^2P^o_{1/2}$	0	0	0	0	0
$3s  {}^{2}S  3p^{2} ({}^{3}_{2}P)  {}^{4}P_{1/2}$	472	-1	0	-32	439
$3s  {}^{2}S  3p^{2} ({}^{3}_{2}P)  {}^{4}P_{3/2}$	588	-7	0	-32	549
$3s  {}^{2}S  3p^{2}(\frac{1}{2}D)  {}^{2}D_{3/2}$	531	-17	1	-22	493
$3s^2  4s  {}^2S_{1/2}$	40	-21	0	5	24
	Ti II				
$3d^2(^3_2F)  {}^3F  4s  {}^4F_{3/2}$	0	0	0	0	0
$3d^2(\frac{3}{2}F) {}^3F 4p {}^4G^o_{5/2}$	400	5	1	-28	378
$3d^2({}^3_2F) {}^3F 4p {}^4F^{o'}_{3/2}$	592	-8	0	-29	555
$3d^2({}^3_2F)  {}^3F  4p  {}^4F^{o'}_{5/2}$	735	-23	0	-28	684
$3d^2({}^3_2F) {}^3F 4p {}^4D^o_{1/2}$	770	-9	0	-28	733
$3d^2({}^3_2F)  {}^3F  4p  {}^2D^{o'}_{3/2}$	922	-37	0	-28	857

Acknowledgment: The supercomputer ("HPC Saulėtekis") of the Center for Physical Sciences and Technology (FTMC) of Vilnius University Faculty of Physics was used in this work.

Keywords: Grasp2K,  $\alpha$  constant, multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock method, relativistic configuration interaction method, variation.

- [1] P. A. M. Dirac, Nature, **139**, 323 (1937).
- [2] J. K. Webb, J. A. King, M. T. Murphy, V. V. Flambaum, R. F. Carswell, M. B. Bainbridge, Phys. Rev. Lett., **107**, 191101 (2011).
- [3] P. Jönsson, G. Gaigalas, J. Bieroń, C. F. Fischer, I. P. Grant, Comp. Phys. Comm., 184, 2197 (2013).
- [4] C. Froese Fischer, M.R. Godefroid, T. Brage, P. Jönsson, and G. Gaigalas, J. Phys. B, 49, 182004 (2016).

## Jonų judrio ir tankio skaičiavimas popieriuje pagal potencialo išelektrėjimo kinetikas

# Calculation of ion mobility and density in the paper based on the potential discharge kinetics

Robertas Maldžius<sup>1</sup>, Tadeuš Lozovski<sup>1</sup>, Jonas Sidaravičius<sup>1</sup>, Kaj Backfolk<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup> Lappeenranta University of Technology, Packaging Technology P.O. Box 20, FI-53851 Lappeenranta, Finland

robertas.maldzius@ff.vu.lt

Popieriaus elektrinio laidumo mechanizmas nėra aiškus dėl jo struktūros sudėtingumo [1]. Dažna problema yra jonų judrio ir jų koncentracijos nustatymas. Naudojantis [2] metodika šiuos parametrus galima rasti iš dielektrinės skvarbos spektro analizės. Šiame darbe minėti parametrai apskaičiuojami iš popieriaus potencialo išelektrėjimo kinetikos.

Lygtį potencialo kinetikai U(t) skaičiuoti gauname iš pilnos elektros srovės išraiškos. Potencialas matuojamas bekontaktiniu metodu, o tokioje grandinėje pilnoji elektros srovė yra lygi nuliui:

$$j(x,t) = \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial E(x,t)}{\partial t} + \sigma(t) E(x,t) = 0.$$
 (1)

Integruojant (1) lygtį pagal koordinatę visu popieriaus storiu *d* ir atskyrus kintamuosius bei atsižvelgus į pradines sąlygas, kai  $U(0) = U_0$ , lygties sprendinys užrašomas taip:

$$U(t) = U_0 \exp\left\{-\frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon} \int_0^t \sigma(\xi) \mathrm{d}\xi\right\}$$
(2)

Eksperimente matuojamos potencialo kinetikos nepavyksta aprašyti viena eksponentine funkcija su vienu laiko parametru, o tai matyti, rezultatus išreiškus  $\left|\frac{\mathrm{d}U(t)}{\mathrm{d}t}\right| / U(t) = \sigma(t) / \varepsilon_0 \varepsilon \neq \text{Const}$  pavidalu (1 pav.).



1 pav. Popieriaus laidumo kitimas, išreikštas eksperimente stebima potencialo kinetika U(t).

Išelektrėjimo pradiniu laiko momentu vyksta popieriaus depoliarizacija ir turime greitąją laidumo relaksacijos dalį. Vėliau, dominuoja jonų pernaša ir tada laidumo vertė nusistovi. Laidumo kinetiką reiškiame

$$\sigma(t) = \Delta \sigma_{\rm MW} \exp(-t/\tau_{\rm MW}) + \sigma_{\rm DC}, \qquad (3)$$

čia  $\Delta \sigma_{\rm MW}$  – "greitųjų" jonų laidumas, o  $\tau_{\rm MW}$  – šio laidumo nulemtos depoliarizacijos laiko pastovioji.

Toliau, (3) išraišką įrašę į (2) išraišką, integruojame ir, pažymėję  $\Delta \sigma_{\rm MW} / \sigma_{\rm DC} = K_{\sigma}$ , gauname formulę potencialo kinetikai skaičiuoti:

$$U(t) = U_0 \exp\left\{-\left(\frac{t}{\tau_{\rm DC}} + K_{\sigma} \cdot \frac{\tau_{\rm MW}}{\tau_{\rm DC}} \left(1 - e^{-t/\tau_{\rm MW}}\right)\right)\right\}.$$
 (4)

Iš (4) išraiškos matyti, kad laiko intervale  $0 < t < \tau_{MW}$  (juda ir "greitieji", ir "lėtieji" jonai) potencialas  $\approx U_0 \exp\{-t/\tau_{MW}\}$ , o vėliau, kai  $t > \tau_{MW} - U(t) = (U_0/e) \exp\{-t/\tau_{DC}\}$  ir čia juda tik "lėtieji" jonai.



2 pav. Popieriaus potencialo ir jo pirmos eilės išvestinės kinetikų aproksimavimas pagal (4) formulę.

Jonų judrį apskaičiuojame pagal dreifinio modelio formulę: jonas per dreifo trukmę  $\approx \tau_{MW}$  pralekia visu sluoksnio storiu *d*, o elektrinis laukas apskaičiuojamas pagal vidutinį potencialo dydį tame laiko intervale, t.y.:

 $E_{\rm vid} = (U_0 + U(\tau_{\rm MW}))/2d, \quad \mu = d/\{\tau_{\rm MW} \cdot E_{\rm vid}\}. \quad (5)$ Galiausiai, jonų tankis apskaičiuojamas pagal klasikinę laidumo formulę  $\Delta \sigma_{\rm MW} = ne\mu.$ 

Reikšminiai žodžiai: popierius, potencialo kinetika, jonų judris, jonų tankis.

- [1] K. Niskannen (Editor), *Paper Physics* (Finish Paper Engineering Assoc. 2008).
- [2] M. Paluch (Editor), *Dielectric Properties of Ionic Liquids* (Springer International Publishing 2016).

# Deformuotų SrRuO<sub>3</sub> plonųjų plėvelių modeliavimas taikant tankio funkcionalo teoriją

# Modelling of strained SrRuO<sub>3</sub> thin films within density functional theory framework

<u>Šarūnas Masys</u>, Valdas Jonauskas

Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius sarunas.masys@tfai.vu.lt

Nors per pastaruosius 50 metų pasaulinėje literatūroje pasirodė daugiau nei 1000 darbų, skirtų įvairiems SrRuO<sub>3</sub> tyrimams, šis perovskitinės struktūros oksidas nepaliauja dominęs tyrėjų [1]. Susidomėjimas dar labiau išaugo, kuomet pavyko eksperimentiškai stabilizuoti SrRuO<sub>3</sub> tetragoninę ir/arba monoklininę fazes kambario temperatūroje taikant deformacijų inžinerijos metodus [2-5].

A. Vailiono ir kt. darbe [3] tyrinėjamas SrRuO<sub>3</sub> gardelės atsakas į gniuždymo ir tempimo deformacijas, kurias sukelia auginimas ant padėklų, pasižyminčių skirtingomis gardelės konstantomis. Esant gniuždymo deformacijai (SrTiO<sub>3</sub> padėklas), SrRuO<sub>3</sub> gardelė įgyja  $P2_1/m$  simetriją, tačiau tempimo deformacijos atveju (DyScO<sub>3</sub> padėklas) nustatyti tikslią sistemos simetriją nėra paprasta, nes skirtumai tarp galimų kandidatų (1 pav.) – *Cmcm* ir *I4/mmm* – yra pernelyg menki, kad juos būtų galima įvertinti eksperimentiškai. Tikslios SrRuO<sub>3</sub> gardelės simetrijos nustatymas (tuo pačiu ir priskyrimas RuO<sub>6</sub> oktaedrų pasisukimo sistemai) yra svarbus, nes ji gali smarkiai įtakoti medžiagos elektroninę ir magnetinę sandarą.

Laimei, šią problemą galima išspręsti teoriniu lygmeniu – atlikus abiejų SrRuO<sub>3</sub> simetrijų *ab initio* modeliavimą tankio funkcionalo teorijos rėmuose. Tuo tikslu buvo atlikti atitinkami teoriniai skaičiavimai CRYSTAL14 [6] kvantinės chemijos paketu. Pakaitinei-koreliacinei sąveikai aprašyti pasirinktas PBEsol funkcionalas [7] su 10% Hartrio-Foko pakaitinės energijos dalimi, nes mūsų kristalinės sandaros įvertinimas rodo [8], jog tokia kombinacija itin tiksliai atkuria SrRuO<sub>3</sub> struktūrą. Gauti modeliavimo rezultatai yra pateikti 1 lentelėje.

1 lentelė. Pagal eksperimentinius matavimus [3] fiksuotos *Cmcm* ir *14/mmm* simetrijų (1 pav.) gardelės konstantos ir atlikus dalinę optimizaciją apskaičiuoti jų pilnųjų energijų nuostoliai visiškai relaksuotos ortorombinės (pagrindinės būsenos) SrRuO<sub>3</sub> fazės atžvilgiu.

	Cmcm	I4/mmm
a (Å)	7,897	7,897
b (Å)	7,829	7,897
c (Å)	7,903	7,903
$\Delta E (meV/f.v.)$	36,1	76,2

Iš čia matyti, kad esant tempimo deformacijai SrRuO<sub>3</sub> gardelei kur kas energetiškai naudingiau pasirinkti *Cmcm* nei *I4/mmm* simetriją, nes pastarosios energijos nuostolis apie 40 meV fomulės vienetui (f.v.) didesnis. Tokie rezultatai vienareikšmiškai išsklaido eksperimentinių matavimų metu kilusias abejones.



1 pav. Kristalinė (a) *Cmcm* ir (b) *14/mmm* simetrijos SrRuO<sub>3</sub> sandara.

Reikšminiai žodžiai: tankio funkcionalo teorija, perovskitiniai kristalai, plonųjų plėvelių įtempis.

- [1] G. Koster et al., Rev. Mod. Phys. 84, 253 (2012).
- [2] K. J. Choi et al., Adv. Mater. 22, 759 (2010).
- [3] A. Vailionis et al., Phys. Rev. B 83, 064101 (2011).
- [4] A. Herklotz *et al.*, Phys. Rev. B **88**, 144412 (2013).
- [5] W. Lu *et al.*, Sci. Rep. **5**, 10245 (2015).
- [6] R. Dovesi et al., Int. J. Quantum Chem. 114, 1287 (2014).
- [7] J. P. Perdew et al., Phys. Rev. Lett. 100, 136406 (2008).
- [8] Š. Masys & V. Jonauskas, Lith. J. Phys. 57, 78 (2017).

# Se<sup>3+</sup> viengubos jonizacijos elektronais tyrimas

# Investigation of single ionization by electron impact for Se<sup>3+</sup>

<u>Saulius Pakalka</u>, Sigitas Kučas, Šarūnas Masys, Aušra Kynienė, Valdas Jonauskas Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius <u>saulius.pakalka@tfai.vu.lt</u>

Selenas (Se) yra svarbūs astrofizikiniuose tyrimuose, nes šis cheminis elementas buvo aptiktas kosminiuose ūkuose ir mažo metalingumo žvaigždėse. Taip pat, pastaruoju metu susidomėjimas selenu yra išaugęs dėl nepaprastos savybės – elektrinio laidumo padidėjimo jį apšvietus ir sėkmingo jo taikymo didinant saulės fotovoltinių elementų našumą.

Darbo tikslas yra ištirti seleno jono pagrindinės konfigūracijos [*Ar*]  $3d^{10}$   $4s^2$  4p viengubą jonizaciją elektronų smūgiais, nagrinėjant šuolius tarp lygmenų. Vienguba elektrono smūginė jonizacija yra tas procesas, kuris dominuoja jonizacijos procesuose.

Pilnas viengubos jonizacijos skerspjūvis  $\sigma_{ik}(\varepsilon)$  prie energijos  $\varepsilon$  išreiškiamas per tiesioginę ir netiesioginę dalis:

$$\sigma_{ik}(\varepsilon) = \sum_{k} \sigma_{ik}^{DI}(\varepsilon) + \sum_{jk} \sigma_{ij}^{EA}(\varepsilon) B_{jk}$$
(1)

čia  $\sigma_{ik}^{DI}(\varepsilon)$  yra tiesioginės viengubos smūginės jonizacijos elektronu skerspjūvis.  $\sigma_{ik}^{DI}(\varepsilon)$ sužadinimo elektronais skerspjūvis.  $\sigma_{ij}^{EA}(\varepsilon)$ , padaugintas iš šakojimosi koeficiento  $B_{jk}$ . Indeksas *i* žymi lygmenį iš kurio vyksta jonizacijos procesas, indeksas *k* atitinka jonizuoto jono lygmenį, o indeksas *j* – pradinio jono sužadinto lygmens, iš kurio vyksta autojonizacijos šuolis, indeksą.

Skaičiavimai buvo atlikti naudojant FAC (Flexible Atomic Code) programą [1], kurioje realizuotas Dirako - Foko - Sleiterio metodas. Iškraipytųjų bangų metodas naudotas gaunant sužadinimų ir jonizacijos elektronais skerspjūvius. Netiesioginio proceso tyrime atsižvelgta į radiacinio gesinimo įtaką. Ankstesnių tyrimų metu nagrinėjant volframo jonus su atviru 4f sluoksniu pagrindinėje konfigūracijoje buvo nustatytas didelis sužadinimu aukštesnius sluoksnius indėlis į netiesioginiam jonizacijos elektronais procesui [2]. Šiame tyrime taip pat pasirinkti sužadinimai į sluoksnius su pagrindiniu kvantiniu skaičiumi *n* <= 25 ir skaičiumi l <= 6.orbitiniu Išorinio sluoksnio sužadinimai elektronu nebuvo nagrinėti, nes susidariusios konfigūracijos negali suirti vykstant Ožė šuoliams.

Iš 1 pav. matosi, kad netiesioginės jonizacijos indėlis yra didesnis nei tiesioginio proceso ties skerspjūvių maksimumu. Didėjant elektrono energijai netiesioginio proceso įtaka mažėja. Netiesioginės jonizacijos procesui didžiausią indėlį duoda  $3 d \rightarrow 4 p$  ir  $3 d \rightarrow 4 d$ sužadinimai. Jų indėlis sudaro apie pusę netiesioginio proceso skerspjūvio, kurio maksimumas susidaro ties 100 eV.

Didžiausią indėlį tiesioginės jonizacijos procesui duoda jonizacija iš *3d* sluoksnio. Reikia pastebėti, kad *4p* sluoksnio jonizacijos slenkstis yra mažesnis nei *4s*  sluoksnio. *3d* sluoksnio jonizacijos slenkstis yra apytiksliai ties 100 eV energija, kaip ir *4p* ir *4s* sluoksnių jonizacijos skerspjūvių maksimumai. Bendras tiesioginio jonizacijos proceso maksimumas yra ties 300 eV.

Didžiausias pilnas jonizacijos skerspjūvis (1 pav. geltona linija) yra gautas, kuomet šakojimosi koeficientas  $B_{jk} = 1$ . Žemiau esanti raudona linija yra mūsų gautas pilnas sužadinimo jonizacijos skerspjūvis su įvertinta radiacinio gesinimo proceso įtaka. Matome, kad radiacinio gesinimo indėlis nėra didelis.

Gautos jonizacijos skerspjūvių vertės gerai sutampa su eksperimento rezultatais [3]. Tai leidžia daryti išvadą, kad atliekant  $Se^{3+}$  jono viengubos jonizacijos procesų tyrimus būtina atsižvelgti į sužadinimus į aukštesnius sluoksnius  $n \le 25$ , o radiacinio gesinimo įtaka yra nežymi. Tuo tarpu, ankstesniame tyrime [4], nagrinėjant šuolius tarp konfigūracijų pseudoreliatyvistiniame artinyje, gautos skerspjūvių vertės viršija eksperimentines vertes elektrono energijos didesnėms už 200 eV.



1 pav. Jonizacijos skerspjūviai: EA (B=1) (geltona) – pilnas jonizacijos skerspjūvis, kai šakojimosi koeficientas lygus 1; EA (raudona) – pilnas jonizacijos skerspjūvis su radiaciniu gesinimu. Tiesioginės jonizacijos indėlis iš 3d, 4s ir 4p sluoksnių pažymėtas prie atitinkamų kreivių.

Reikšminiai žodžiai: jonizacija, selenas, plazma, jonizacijos skerspjūvis.

- [1] M. F. Gu, Can. J. Phys. 86, 675 (2008).
- [2] A. Kyniene, Š. Masys and V. Jonauskas, Phys. Rev. A91, 062707 (2015).
- [3] G. A. Alnawashi, K. K. Baral, N. B. Aryal, C. M. Thomas ir R. A. Phaneuf, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 47, 105201 (2014).
- [4] M.S. Pindzola and S.D. Loch, J. Phys, B: At. Mol. Opt. Phys. 49, 125202 (2016).

# Pusiau sintetinė zigzago optinė gardelė

## Semi-synthetic zigzag optical lattice for ultracold atoms

Mantas Račiūnas<sup>1</sup>, Egidijus Anisimovas<sup>1</sup>, Christoph Sträter<sup>2</sup>, André Eckardt<sup>2</sup>, Ian B. Spielman<sup>3</sup>, Gediminas Juzeliūnas<sup>1</sup> <sup>1</sup>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio 3, LT-10222 Vilnius, Lithuania <sup>2</sup>Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Nöthnitzer Straße 38, D-01187 Dresden, Germany <sup>3</sup>Joint Quantum Institute, University of Maryland, College Park, Maryland 20742-4111, USA mantas.raciunas@gmail.com

Optical lattices provide a unique tool for simulating quantum condensed matter physics using ultracold atoms [1]. These lattices can be enriched by introducing laser-coupled internal atomic states that can play the role of an extra "synthetic" dimension. For example, a semi-synthetic square lattice results from the combination of the interlayer tunneling among the sites of a onedimensional optical lattice and laser-assisted transitions between the onsite atomic levels. If the laser coupling is accompanied by a recoil in the lattice direction, the semisynthetic lattice acquires a uniform magnetic flux traversing the square plaquettes [2]. This leads to the formation of chiral edge states in the resulting quantum Hall ribbon [3]. A characteristic feature of the square geometry is that the atom-atom interaction is long-ranged in the synthetic dimension but short-ranged in the real dimension.

In this work, we depart from the square geometry and find the ground states of a semi-synthetic optical *zigzag* lattice which can be created combining a spin-dependent one-dimensional optical lattice with laserinduced transitions between the atomic internal states. Lattice geometry and experimental layout is shown below:



The lattice is affected by a tunable homogeneous magnetic flux, and furthermore features nonlocal interactions along the semi-synthetic directions that connect different internal states situated at different spatial locations. Generation of magnetic fluxes in an effectively onedimensional setting is intriguing. Nonlocal interactions are also an important goal in recent experiments, and such interactions have been engineered via superexchange dipole-dipole coupling or Rydberg dressing.

We investigate the ground-state properties of the proposed system for the case of bosonic atoms with strong interactions using the density-matrix renormalization group calculations. We found that the interplay between the frustration induced by the magnetic flux and the interactions gives rise to an interesting gapped phase at fractional per-site filling fractions corresponding to one particle per magnetic unit cell.

*Keywords: optical lattice, zigzag lattice, semi-synthetic lattice, ultracold atoms* 

- I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger, Many-body physics with ultracold gases, Rev. Mod. Phys. 80, 885 (2008).
- [2] A. Celi, P. Massignan, J. Ruseckas, N. Goldman, I. B. Spielman, G. Juzeliūnas, and M. Lewenstein, Synthetic Gauge Fields in Synthetic Dimensions, Phys. Rev. Lett. 112, 043001 (2014).
- [3] M. Mancini, G. Pagano, G. Cappellini, L. Livi, M. Rider, J. Catani, C. Sias, P. Zoller, M. Inguscio, M. Dalmonte, and L. Fallani, Observation of chiral edge states with neutral fermions in synthetic Hall ribbons, Science 349, 1510 (2015).

# <sup>129</sup>Xe elektrinio dipolinio momento tyrimai atlikti daugiakonfigūracinio Dirako, Hartrio ir Foko artinyje

# Multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock calculations of atomic electric dipole moments for $^{129}{\rm Xe}$

Laima Radžiūtė<sup>1</sup>, Gediminas Gaigalas<sup>1</sup>, Jacek Bieroń<sup>2</sup>, Per Jönsson<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio av. 3, LT-10222 Vilnius, Lithuania <sup>2</sup>Instytut Fizyki imienia Mariana Smoluchowskiego, Uniwersytet Jagielloński, Kraków, Poland

<sup>3</sup>Group for Materials Science and Applied Mathematics, Malmö University, S-20506, Malmö, Sweden

laima.radziute@tfai.vu.lt

The existence of a non-zero permanent electric dipole moment (EDM) of an elementary particle or a composite system of particles would violate time reversal symmetry (T), as well as the combined charge conjugation and parity symmetry (CP), due to the CPT theorem [1]. One of the principal motivations behind the experimental searches of EDMs is to shed light on the observed matterantimatter asymmetry in the Universe. The standard model cannot explain the matter-antimatter asymmetry in the Universe, as it predicts sources of CP violation (and of EDMs) several orders of magnitude weaker than those necessary to account for the observed baryon numbers. This leads to proliferation of the extensions to the Standard Model. Some of these extensions predict larger EDMs, sometimes within the reach of current experiments.

In the present work we computed the EDMs in the ground states of diamagnetic atom  $^{129}$ Xe and compare our results with those of other authors. Our results were obtained within the multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) method, using the relativistic atomic structure package GRASP2K [2], which has been employed in the calculations of matrix elements of (*P*,*T*)-odd e-N tensor-pseudotensor (TPT) and pseudoscalar-scalar (PSS) interactions, nuclear Schiff moment (SM), and interaction of electron electric dipole (eEDM) moment with nuclear magnetic moments.



FIG. 1. Excitation energies of states  $5p^5 ns^{1,3}P_1$  from strategies SD {5s}(5pns) and SDh {5s}(5pns) compared with NIST data base recommended values.

Calculations were performed for the ground state  $(5p^{6} {}^{1}S_{0})$  and for all excited states  $(5p^{5} ns {}^{1,3}P_{1})$  sepa-

rately. Active space  $(AS_L, L = 0 - 3)$  of virtual orbitals for the ground and excited states was generated by single and double substitutions (SD) from 5*s*, 5*p* and *ns* shells, respectively. Sets of virtual orbitals (Layers *L*) included angular symmetries up to l = s, p, d, f, g and listed below:  $L_0 = \{ns, np, nd, nf\};$ 

 $L_1 = \{(n+1)s, (n+1)p, (n+1)d, (n+1)f, (n+1)g\}...$ Active space  $(AS_L, L = 0 - 3)$  of virtual orbitals constructed in the following way:

$$AS_0 = L_0; AS_1 = L_0 + L_1...$$

At each stage only the outermost layer is optimized and the remaining orbitals (spectroscopic as well as other virtual layers) are kept frozen, this strategy was called SD {5s}(5pns). Later *h* symmetry was included in layers of orbitals (this strategy was called SDh {5s}(5pns)). Energies of levels  $5p^5 ns^{1,3}P_1$  were computed up to n = 16, using these strategies. Computed energy levels are compared with NIST database in the Figure 1. The average energy difference is  $0.021 \pm 0.005$ , and  $0.018 \pm 0.006$ , for the first and the second strategy, respectively.

Using the wave functions obtained with these methods the contributions from four interactions were computed and are presented in the Table 1.

Table 1. TPT, PSS, SM, and eEDM contributions to atomic EDM of states  $5p^5 ns^{1,3}P_1$  for Xe computed in strategies SD {5s}(5pns) and SDh {5s}(5pns).

Strategy	TPT	PSS	SM	eEDM		
SD {5s}(5pns)	0.22	0.63	0.15	0.23		
SDh {5s}(5pns)	0.23	0.66	0.16	0.24		
[3](DHF)	0.45	1.3	0.29	0.85		
[3](RPA)	0.57	1.6	0.38	1.0		

More details about the computations and strategies will be provided during the conference.

Acknowledgment: LR thanks for the HPC resources provided by the ITOAC of Vilnius University.

Keywords: tensor-pseudotensor interactions, pseudoscalar-scalar interactions, nuclear Schiff moment, electron electric dipole moment.

- I. B. Khriplovich and S. K. Lamoreaux, CP Violation Without Strangeness (Springer, Berlin, 1997).
- [2] P. Jönsson, G. Gaigalas, J. Bieroń, C. Froese Fischer, and I.P. Grant, Computer Physics Communications 184, 2197 (2013).
- [3] V. A. Dzuba, V. V. Flambaum and S. G. Porsev, Phys. Rev. A 80, 032120 (2009).

# Virpesinės izoliuotų taškinių defektų savybės

# Vibrational properties of isolated point defects in semiconductors

Lukas Razinkovas, Audrius Alkauskas Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

lukas.razinkovas@ftmc.lt

Taškiniai defektai stipriai keičia puslaidininkinių medžiagų savybes. Šie pokyčiai praktiniams pritaikymams kartais būna žalingi, o kartais naudingi. Kalbant apie jų naudingumą, neseniai buvo atrasta, kad tam tikri plačiajuosčių puslaidininkių taškiniai defektai kambario temperatūroje išlaiko stabilias koherentines sukinines būsenas. Jas galima sukurti, nuskaityti ir keisti, veikiant optiniais ir mikrobanginiais sužadinimais [1]. Su šiomis savybėmis atsiveria labai daug įdomių praktinio taikymo galimybių. Viena iš jų yra defektų pritaikymas kvantinės informacijos apdorojimui defekto sukinį naudojant kaip kvantinį bitą. Kita – šiuos defektus panaudoti kaip pavienių fotonų emiterius. Geriausiai žinomas tokio tipo defektas yra deimanto NV<sup>-1</sup> centras [2].

Siekiant pritaikyti šiuos defektus kaip sukininius kubitus, labai svarbu yra suprasti virpesinę defekto struktūrą. Ši struktūra lemia tokias savybes kaip optinis sukinio inicializavimas ir kvantinis našumas pavienių fotonų emiteriuose. Naudojant modernius tankio funkcionalo teorijos skaičiavimus galima teoriškai apskaičiuoti šią virpesinę struktūrą. Deja, tiesioginiai virpesinės struktūros skaičiavimai nėra patikimi dėl nedidelių sistemų dydžių, neatitinkančių realios fizikinės situacijos.

Šiame darbe yra pristatoma nauja skaičiavimo metodologija, kurios dėka galima suskaičiuoti iš esmės izoliuotų defektų virpesinę struktūrą [3]. Ši metodologija yra pagrįsta prielaida, jog kristaluose tarpatominės sąveikos yra trumpasiekės. To rezultate tarpatomines sąveikos konstantas, suskaičiuotas mažos sistemos modelyje, galima panaudoti didelės vieno defekto virpesinės struktūros skaičiavimams. Remiantis šia metodologija gauti rezultatai buvo pritaikyti skaičiuojant liuminescensinę NV<sup>-1</sup> centro deimante liniją (1 pav.). Gauta linija labai gerai sutampa su eksperimentiniais rezultatais ir patvirtina šios metodologijos patikimumą.



1 pav. Liuminescensinė NV<sup>-1</sup> centro deimante liniją.

Reikšminiai žodžiai: taškiniai defektai, tankio funkcionalo teorija

- [1] J. R. Weber *et al.*, "Quantum computing with defects", Proc. Nat. Acad. Sci.**107**, 8513 (2010)
- [2] M. W. Doherty *et al.*, "The nitrogen-vacancy colour centre in diamond", Phys. Rep. **528**, 1 (2013)
- [3] A. Alkauskas *et al*, "First-principles theory of the luminescence lineshape for the triplet transition in diamond NV centres", New J. of Phys. 16, 073026 (2014)

## Atvirų kvantinių sistemų skaičiavimai: pernašos tenzorių metodo pritaikomumas

# Open quantum systems calculations: applicability of transfer tensor method

Edvardas Rybakovas<sup>1,2</sup>, Andrius Gelžinis<sup>1,2</sup>, Leonas Valkūnas<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius <sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius edvardas.rybakovas@ff.stud.vu.lt

Kvantinės sistemos, kurios sąveikauja su aplinka vadinamos atviromis. Tokių sistemų dinamika aprašoma pasitelkiant tankio matricos formalizmą. Yra išvesta nemažai metodų, leidžiančių skaičiuoti atvirų kvantinių sistemų dinamiką [1], tačiau visi jie turi trūkumų: vieni lėti, kiti kelia apribojimus parametrams.

Neseniai (2014 metais) J. Cerrilo ir J. Cao pasiūlė dar vieną metodą - pernašos tenzorius [2]. Tai tikslus, greitas ir nesudėtingas metodas, tačiau jis, kaip ir visi kiti, vis tiek nėra idealus - metodas reikalauja nemažai pradinių duomenų, suskaičiuotų kitu metodu.



1 pav. Pernašos tenzorių metodo veikimo principas.

Pernašos tenzorių metodas veikia taip (žr. 1 pav.): pasirinktu kitu metodu suskaičiuojamas sistemos evoliucijos superoperatorius (skaičiuojant sistemos tankio matricos  $\rho$  evoliucijas iki tam tikro laiko esant skirtingoms pradinėms sąlygoms), iš šių duomenų sukonstruojami pernašos tenzoriai (matricos)  $\hat{T}$ , o tolesnė sistemos tankio matricos evoliucija skaičiuojama pagal lygtį:

$$\rho(t_n) = \sum_{m=1}^{K} \hat{T}_m \rho(t_{n-m})$$
(1)

Iš (1) lygties nesunku suprasti pernašos tenzorių fizikinę prasmę. Jie rodo, kokią įtaką praeiti laiko momentai daro būsimam laiko momentui (žr. 2 pav.).



2 pav. Pernašos tenzorių fizikinė prasmė.

Laiką, iki kurio suskaičiuoti pradiniai duomenys, galima vadinti **mokymosi laiku.** Geras mokymosi laikas yra mažiausias mokymosi laikas, su kuriuo tolesnė evoliucija skaičiuojama pakankamai tiksliai. Pernašos tenzorių metodu išlošiama daugiausiai, kai gero mokymosi laiko ir evoliucijos trukmės (laiko, kurio reikia, kad būtų pasiekta pusiausvyra) santykis mažiausias.

Šiame darbe pateikiamas šių laikų palyginimas dimere. 3 pav. ir 4 pav. pavaizduotos gero mokymosi laiko ir sistemos evoliucijos laiko priklausomybės nuo reorganizacijos energijos  $\lambda$  (sąveikos su aplinka stiprumo) ir rezonansinės sąveikos (sąveikos tarp sistemos lygmenų stiprumo) J atitinkamai. Iš šių rezultatų galima teigti, jog metodą prasmingiausia naudoti esant didelėms (palyginus su kitais parametrais)  $\lambda$  arba J vertėms.



3 pav. Gero mokymosi laiko ir sistemos evoliucijos laiko priklausomybės nuo reorganizacijos energijos λ.



4 pav. Gero mokymosi laiko ir sistemos evoliucijos laiko priklausomybės nuo rezonansinės sąveikos *J*.

Reikšminiai žodžiai: atviros kvantinės sistemos, dinamika, pernašos tenzoriai

- L. Valkunas, D. Abramavicius, and T. Mančal, *Molecular Excita*tion Dynamics and Relaxation (Wiley-VCH, Berlin, 2013).
- [2] J. Cerillo and J. Cao, Phys. Rev. Lett. 112, 110401 (2014).

# Metilamonio švino jodidas – struktūrinių fazinių virsmų sekos pavyzdys

# Methylammonium lead iodide – a model for a sequence of structural phase transitions

Mantas Šimėnas<sup>1</sup>, Sergejus Balčiūnas<sup>1</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup>, Evaldas E. Tornau<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Puslaidininkių Fizikos Institutas, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

mantas.simenas@ff.vu.lt

Metilamonio švino halogenidai CH3NH3PbX<sub>3</sub> (X = Cl, Br, I) (MAPbX<sub>3</sub>) yra perovskito struktūros kristalai žinomi jau bemaž šimta metų. Prieš tris dešimtmečius buvo plačiai tyrinėjami dėl potencialiai feroelektrinių savybiu. Pastaruoju metu susidomėjimas šiomis medžiagomis itin išaugo paaiškėjus, kad jie gali būti naudojami kaip plonasluoksnių saulės baterijų elementai. Jie yra ypatingai vertinami dėl pigios gamybos technologijos, ilgų nešėjų gyvavimo trukmių bei optimalaus juostos pločio, o jų fotovoltinės galios konversijos efektyvumas šiuo metu viršija 20%. kad ferolektriniai domenai MAPbX<sub>3</sub> Manoma, junginiuose sukuria vidines jungtis, kurios padeda atskirti fotosužadintu elektronu ir skyliu poras ir susilpnina ju rekombinacija.

Pastarasis aspektas privertė iš naujo peržiūrėti šių medžiagų ferolelektrines savybes, taikant naujus tyrimo metodus ir modernią eksperimentinę įrangą. Atliekant neutronų sklaidos tyrimus [1], pavyko patikslinti kai kuriuos struktūrinius šių medžiagų parametrus, feroelektrinių fazinių virsmų temperatūras bei MA<sup>+</sup> katijono orientacijas įvairiose struktūrinėse fazėse (kubinėje, tetragoninėje ir ortorombinėje). Reikia pažymėti, kad šio katijono orientacija (C-N jungties kryptis) ir gardelės įtempimai lemia poliarizacijos vektoriaus vertes ir, apskritai, feroelektrines medžiagų savybes.

Nauji tyrimai sukėlė daug diskusijų: dalis mokslininkų palaiko seniai žinomą nuomonę, kad faziniai virsmai šiose medžiagose yra feroelektriniai. Tačiau naujausi tyrimai [2] rodo, kad kristalų poliarizacija yra labai maža, o poliarizacija arba egzistuoja plokštumose ir išilgai tam tikrų ašių, bet kompensuojasi tūryje.

Šiame darbe atliekame teorini MAPbI<sub>3</sub> kristalo feroelektriniu savybių modeliavima plačiame ruože, atsižvelgiant į naujausius temperatūru struktūrinius tyrimus ir laikantis nuomonės, kad sistema antiferoelektrikas. Teorinius skaičiavimus, yra atliekamus Monte Karlo metodu, papildome eksperimentiniais piroelektrinės srovės priklausomybės nuo temperatūros matavimais giminingoje MAPbCl<sub>3</sub> medžiagoje, rodo. šiu kurie kad medžiagu poliarizacija žemose temperatūrose yra labai maža.

MAPbI<sub>3</sub> junginyje MA<sup>+</sup> katijonas yra kubo sudaryto iš PbI<sub>6</sub> oktaedrų centre, o poliarizacijos vektorių lemia C-N ryšio kryptis. Teorinis modelis konstruojamas laikant, kad poliarizacijos vektorius P yra statmenas kubo sienoms, o virsmas iš kubinės į tetragoninę fazę vyksta, išnykstant P komponentėms išilgai *c*-ašies (iš

šešių būsenų lieka keturios). Tokiu būdu, tetragoninėje fazėje kiekvienoje a-b plokštumoje yra liekamoji poliarizacija (nors plokštumos nėra pilnai feroelektriškai susitvarkiusios), o suvidurkinus pagal plokštumas poliarizacijos nebelieka. Šį virsmą lemiantis veiksnys yra gardelės deformacijų bei susidarančių H-I vandenilinių ryšių sąlygota artimiausių poliarizacijos vektorių sąveika. Modeliuojant paaiškėjo, kad tokios, iš esmės virsmo tašką koreguojančios, sąveikos yra dvi. Be šių sąveikų sistemoje egzistuoja silpnesnė toliveikė dipolių sąveika, kuri sąlygoja žemos temperatūros virsma iš tetragoninės į ortorombinę fazę ir plokštumu susitvarkymą. Ortorombinėje fazėje a-b plokštumos yra susitvarkiusios savo poliarizacijos vektorius i "šachmatine" " $\uparrow \rightarrow \uparrow \rightarrow \dots$ " arba " $\downarrow \leftarrow \downarrow \leftarrow \dots$ " struktūrą. Idomu pažymėti, kad dėl dipolinių sąveikų išilgai c-ašies susiformuoja antiferoelektrinės poliarizacijos vektoriaus juostos (" $\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow$ ...").

Savo darbe mes skaičiavome šiluminės talpos bei poliarizacijos vektoriaus temperatūrines priklausomybes. Iš jų nustatėme fazinių virsmų (kubinė-tetragoninė ir tetragoninė-ortorombinė) taškus. Reguliuojant dipolinių sąveikų ir deformacijos sąlygotų sąveikų santykį, gavome eksperimentą atitinkančias fazinių virsmų temperatūrų vertes, įvertinome pagrindinių modelio sąveikų dydžius bei nustatėme virsmų rūšį.

Reikšminiai žodžiai: metilamonio švino halogenidai, feroelektrikai, fazinių virsmų modeliai, Monte Karlo metodas.

- M. T. Weller, O. J. Weber, P. F. Henry, A. M. Di Pumpo, and T. C. Hansen, Chem. Comm. 51, 4180 (2015).
- [2] I. Anusca, S. Balčiūnas, P. Gemeiner, Š. Svirskas, M. Sanlialp, G. Lackner, C. Fettkenhauer, J. Belovickis, V. Samulionis, M. Ivanov, B. Dkhil, J. Banys, V. V. Shvartsman, and D. C. Lupascu, Adv. Energ. Mat. (2017).

# Kvazivienmatės kintamo magnetinio srauto optinės gardelės

# **Optical Ladder Lattices With Tunable Flux**

Giedrius Žlabys, Egidijus Anisimovas

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

Optinės gardelės – erdvėje periodiški interferuojančių lazerių pluoštų intensyvumo skirstiniai. Jose sugauti šaltieji atomai gali sukurti švarias, įvairios kristalinės geometrijos sistemas, tiksliai kontroliuojamas laboratorijoje [1].

Skirtingai negu kietuosiuose kūnuose, tirti išorinio magnetinio lauko poveikį šaltųjų atomų sistemose yra sudėtinga - neutralios dalelės neveikiamos Lorentz jėgos. Norint įgyvendinti magnetinius efektus, tenka įvesti ekvivalentų dirbtinį kalibruotės potencialą [2]. Dėl jo, dalelė apėjusi gardelės elementarų narvelį sukaupia nenulinę fazę, atitinkančią lauko kuriamą dirbtinį magnetinį srautą. Toks srautas gali būti realizuojamas keliais būdais: periodiškai virpinant gardelę [3], lazeriu indukuojant kompleksinius šuolius tarp skirtingų jos mazgų [4] arba naudojant dažnio standarto šuolius [5]. Iš vienos pusės, eksperimento schema komplikuojasi, iš kitos - turime daugiau valdomų parametrų. Šiuos laisvės laipsnius galima išnaudoti įvairių stiprių bei erdvinių konfigūracijų dirbtinio magnetinio srauto kūrimui. Iki šiol eksperimentai apsiribodavo pastoviu arba alternuojančiu vienodo dydžio srautu, todėl šiame darbe siūloma nehomogeninio srauto sukūrimo schema. Ji remiasi kiekvieno mazgo virpinimo fazės kontroliavimu. Jos taikymui pasirenkamos kvazivienmatės gardelės, dėl lengvai valdomų šuolių parametrų bei įdomių energijos juostų. Sukūrus norimą srautą, tiriama į tokią sistemą patalpinto banginio paketo dinamika ir jo valdymo galimybės.

Dirbtinio magnetinio srauto valdymas įgyvendinamas periodiškai virpinant gardelę ir įvedant jos mazgų energijų poslinkius. Bendriausiu atveju, tokios optinės gardelės aprašomos hamiltonianu

$$\hat{H}(t) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_i^{\dagger} \hat{c}_j + \sum_i w_i(t) \hat{c}_i^{\dagger} \hat{c}_i + \sum_i \nu_i \hbar \omega \hat{c}_i^{\dagger} \hat{c}_i,$$
(1)

čia  $\hat{c}_i^{(\dagger)}$  yra dalelės sunaikinimo (sukūrimo) *i*-tajame mazge operatorius, o  $\langle i, j \rangle$  žymi sumavimą per artimiausius kaimyninius mazgus. Pirmasis narys įskaito įprastus tarpkaimyninius šuolius, su tuneliavimo stipriu *J*, antrasis moduliuoja kiekvieno mazgo energiją funkcija

$$w_i(t) = K\sin(\omega t - \varphi_i), \qquad (2)$$

atitinkančia periodinį virpinimą K amplitudės išorine jėga ir dažniu  $\omega$ . Laikoma, kad fazę  $\varphi_i$  įmanoma parinkti kiekvienam mazgui individualiai. Trečiasis narys įveda pastovios išorinės jėgos sukurtą Wannier-Stark tipo energijos poslinkį per  $v_i$  energijos kvantų, reikalingą magnetinį srautą sąlygojančių kompleksinių šuolių atsiradimui. Pritaikius Floquet teorijos formalizmą gaunamas ilgalaikę šios sistemos dinamiką aprašantis efektinis hamiltonianas

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i\nu_{ij} \left(\frac{\varphi_i + \varphi_j}{2}\right)} \mathcal{J}_{\nu_{ij}} \left(\frac{2K}{\hbar\omega} \sin\left(\frac{\varphi_i - \varphi_j}{2}\right)\right) \hat{c}_i^{\dagger} \hat{c}_j,$$
(3)

kai  $\mathcal{J}_{v_{ij}}$  yra pirmos rūšies Bessel funkcija ir  $v_{ij} \equiv v_i - v_j$ . Juo pasinaudojant sudaroma lygčių sistema, kurią išsprendus randamos fazių vertės, reikalingos norimai magnetinių srautų konfigūracijai gauti.

Mokant valdyti srautus, skaitmeniškai tiriama banginio paketo dinamika (pavyzdys 1 pav.) ir jo kontrolės galimybės, esant skirtingoms srauto realizacijoms.



1 pav. Banginio paketo dinamika  $x_c(t)$  kvazivienmatėje kvadratinėje gardelėje esant homogeniniam magnetiniam srautui  $\pi$ . Skirtingos spalvos vaizduoja banginio paketo judėjimą skirtingose gardelės šakose,  $\varepsilon(k)$  – dispersijos sąryšis.

Reikšminiai žodžiai: optinės gardelės, dirbtinis magnetinis srautas, banginio paketo dinamika

- P. Windpassinger, K. Sengstock, Rep. Prog. Phys. 76, 086401 (2013).
- [2] J. Dalibard, F. Gerbier, G. Juzeliūnas, P. Öhberg, Rev. Mod. Phys. 83, 1523–1543 (2011).
- [3] A. Eckardt, Rev. Mod. Phys. 89, 011004 (2017).
- [4] M. Aidelsburger, M. Atala, S. Nascimbène, S. Trotzky, Y.-A. Chen, I. Bloch, Phys. Rev. Lett. 107, 255301 (2011).
- [5] L. F. Livi, G. Cappellini, M. Diem, L. Franchi, C. Clivati, M. Frittelli, F. Levi, D. Calonico, J. Catani, M. Inguscio, L. Fallani, Phys. Rev. Lett. 117, 220401 (2016).

## Lėti optiniai solitonai atomams apibūdinamiems Lamba ir tripodo lygmenų sandara

# Slow optical solitons for atoms characterized by combined Lambda and tripod level structure

Hamid Reza Hamedi, Julius Ruseckas, Gediminas Juzeliūnas

Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

hamid.r.hamedi@gmail.com

We consider nonlinear propagation of a probe pulse [1, 2] in an atomic medium characterized by a combined tripod and Lambda ( $\Lambda$ ) closed loop atom-light coupling scheme [3, 4] shown in Fig. 1. The scheme involves three atomic ground states  $|a\rangle$ ,  $|c\rangle$  and  $|d\rangle$  coupled to two excited states  $|b\rangle$  and  $|e\rangle$  by five light fields  $\Omega_1$ ,  $\Omega_2$ ,  $\Omega_3$ ,  $\Omega_4$  and  $\Omega_p$ .

Our goal is to demonstrate shape-preserving optical pulses which can propagate in the medium under consideration without significant distortion and loss. The idea is to include the optical Kerr nonlinearity of the probe laser field into the light propagation, and show that the Kerr nonlinear effect can compensate the dispersion effects and result in shape-preserving optical pulses. To balance the dispersion effects and optical nonlinearity, a theoretical model was employed for the nonlinear pulse propagation based on a coupled set of the Maxwell-Bloch equations

$$\dot{\rho}_{ba}^{(1)} = d_1 \rho_{ba}^{(1)} + i \,\Omega_1 \rho_{ca}^{(1)} + i \,\Omega_2 \rho_{da}^{(1)} + i \,\Omega_p \,, \tag{1a}$$

$$\dot{\rho}_{ca}^{(1)} = d_2 \rho_{ca}^{(1)} + i \,\Omega_1^* \rho_{ba}^{(1)} + i \,\Omega_3^* \rho_{ea}^{(1)}, \tag{1b}$$

$$\dot{\rho}_{da}^{(1)} = d_2 \rho_{da}^{(1)} + i \,\Omega_2^* \rho_{ba}^{(1)} + i \,\Omega_4^* \rho_{ea}^{(1)}, \tag{1c}$$

$$\dot{\rho}_{ea}^{(1)} = d_3 \rho_{ea}^{(1)} + i \,\Omega_3 \rho_{ca}^{(1)} + i \,\Omega_4 \rho_{da}^{(1)}, \tag{1d}$$

and

$$\frac{\partial \Omega_p}{\partial z} + c^{-1} \frac{\partial \Omega_p}{\partial t} = i \eta \rho_{ba}^{(1)}, \qquad (1e)$$

with  $\eta = \frac{2N \omega_p |\mu_{ba}|^2}{\hbar c}$ ,  $d_1 = -\Gamma_b / 2 + i \Delta_p$ ,  $d_2 = i (\Delta_p - \Delta_2)$  and  $d_3 = -\Gamma_e / 2 + i (\Delta_p + \Delta_3 - \Delta_2)$ , where  $\Gamma_i (i = e, b)$  and  $\Delta_j (j = 2, 3, p)$  denote the decay rates and the corresponding detunings, respectively.

The Kerr nonlinearity coefficient is obtained by solving Eqs. (1a)-(1d). Substituting it into the wave equation (1e), we arrive at the nonlinear wave equation for the slowly varying envelope  $\Omega_p$ 

$$i\frac{\partial}{\partial\zeta}\Omega_p - \kappa_{2r}\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\Omega_p = \Theta_r |\Omega_p|^2 \Omega_p.$$
(2)

where  $\kappa_{2r}$  and  $\Theta_r$  represent the group velocity dispersion and Kerr nonlinearity, respectively.

Equation (2) represents the conventional nonlinear Schrodinger (NLS) equation which describes the nonlinear evolution of the probe pulse and allows bright and dark soliton solutions. Therefore by properly choosing the parameters of the system, the propagation of slow optical dark solitons is possible in our model due to the balance between dispersion effects and the Kerr nonlinearity of the medium.



Fig. 1. Schematic diagram of the five-level Lambda-tripod quantum system.

Reikšminiai žodžiai: lėta šviesa, optiniai solitonai, elektomagnetiškai sukeltas praskaidrėjimas, atomų terpė.

- [1] Y. Wu and L. Deng, Phys. Rev. Lett. 93, 143904 (2004)
- [2] Y. Wu and L. Deng, Optics Letters Vol. 29, Issue 17, pp. 2064-2066 (2004)
- [3] H. R. Hamedi and G. Juzeliūnas, Phys. Rev. A 91, 053823 (2015)
- [4] H. R. Hamedi, J. Ruseckas, G. Juzeliūnas. Submitted to J. Phys. B.
- [5] M. Fleischhauer and M. D. Lukin, Phys. Rev. Lett. 84, 5094 (2000)

## Elektromagnetiškai sukeltas praskaidrėjimas Lamba ir tripodo lygmenų atomams

# Electromagnetically induced transparency using combined Lambda and tripod level structure

<u>Hamid Reza Hamedi</u>, Julius Ruseckas, Gediminas Juzeliūnas Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius hamid.r.hamedi@gmail.com

Electromagnetically induced transparency (EIT) [1] plays an important role in controlling the propagation of light pulses in resonant atomic media. Due to the EIT a weak probe beam of light tuned to an atomic resonance can propagate slowly and with almost no dissipation when the medium is driven by one or several control beams of light with a higher intensity [2]. The EIT is formed because the control and probe beams drive the atoms to their dark states representing a special superposition of the atomic ground states immune to the atom-light coupling.

There has been a considerable amount of activities on single- [3] and two-component (spinor) [4] slow light in atomic media induced by the EIT. The single-component slow light involves a probe beam of light and one or several control beams resonantly interacting with atomic media characterized by three level Lambda type or four level tripod type atom-light coupling schemes. The spinor slow light can be formed using a double-tripod (DT) atom-light coupling scheme that supports a simultaneous propagation of two probe beams in such an atomic medium.

In this work, we consider propagation of a probe pulse in a resonant atomic medium affected by four control laser fields of larger intensities. The probe and control fields are assumed to co-propagate along the z direction. We shall analyze the light propagation in an ensemble of atoms using a five-level Lambda-tripod atom-light coupling scheme shown in Fig. 1. The atoms are characterized by three ground levels  $|a\rangle$ ,  $|c\rangle$  and  $|d\rangle$ , as well as two excited states  $|b\rangle$  and  $|e\rangle$ . The probe beam described by a Rabi frequency  $\Omega_p$  induces a resonant transition between the initially populated ground state  $|a\rangle$  and the excited state  $|b\rangle$ . Four coherent control fields with the Rabi frequencies  $\Omega_1$ ,  $\Omega_2$ ,  $\Omega_3$ , and  $\Omega_4$  drive resonant dipole-allowed transitions  $|b\rangle \leftrightarrow |c\rangle$ ,  $|b\rangle \leftrightarrow |d\rangle$ ,  $|e\rangle \leftrightarrow |c\rangle$ , and  $|e\rangle \leftrightarrow |d\rangle$ , respectively. As a result, the control fields couple two excited states  $|b\rangle$  and  $|e\rangle$  via two different

pathways  $b\rangle \rightarrow |c\rangle \rightarrow |e\rangle$  and  $|b\rangle \rightarrow |d\rangle \rightarrow |e\rangle$  making the four level closed-loop coupling scheme. The Hamiltonian for such a four level sub-system reads ( $\hbar = 1$ ):

$$H_{4\text{Levels}} = -\Omega_1^* |c\rangle \langle b| - \Omega_2^* |d\rangle \langle b|$$
  
$$-\Omega_3^* |c\rangle \langle e| - \Omega_4^* |d\rangle \langle e| + \text{H.c.}.$$
(1)

Totally there are five atomic levels, with the probe beams

 $\Omega_p$  inducing the dipole-allowed optical transition  $|a\rangle \leftrightarrow |b\rangle$ . This leads to a combined  $\Lambda$  and tripod level atom-light coupling scheme described by the atomic Hamiltonian

$$H_{5\text{Levels}} = -\left(\Omega_p^* \mid a \rangle \langle b \mid +\Omega_p \mid b \rangle \langle a \mid \right) + H_{4\text{Levels}}.$$
 (2)

We have demonstrated that dark states can be formed for such an atom-light coupling. This is essential for formation of the EIT and slow light. In the limiting cases the scheme reduces to conventional Lambda- or N- type atom-light couplings providing, respectively, the EIT or absorption. Thus the atomic system can experience a transition from the EIT to the absorption by changing the amplitudes or phases of control lasers [6].



Fig. 1. Schematic diagram of the five-level Lambda-tripod quantum system.

Reikšminiai žodžiai: lėta šviesa, elektomagnetiškai sukeltas praskaidrėjimas, atomų terpė.

#### Literatūra

[1] S. E. Harris, Phys. Today 50 (1997), pp. 36.

[2] M. Fleischhauer, and A. Imamoglu, and J. P. Marangos, *Rev. Mod. Phys.* 77 (2005) 633--673.

[3] J. Ruseckas, G. Juzeliūnas, P. Öhberg, and S. M. Barnett, *Phys. Rev.* A 76 (2007), pp. 053822.

[4] M.-J. Lee, J. Ruseckas, Ch.-Y. Lee, V. Kudriašov, K.-F. Chang, H.-W. Cho, G. Juzeliūnas and I. A. Yu, Nat. Commun. 5, 5542 (2014);
[5] H. R. Hamedi and G. Juzeliūnas, G., *Phys. Rev. A* 91 (2015), pp. 053823.

[6] H. R. Hamedi, J. Ruseckas, G. Juzeliūnas. Submitted to J. Phys. B.

# Universalios Seimo rinkimų statistinės savybės ir jų modeliavimas

# Statistical patterns of Seimas elections and their modeling

Aleksejus Kononovicius

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

Nors visi balsai yra vienodai svarbūs rinkimų baigčiai, tačiau tikimybė, kad vienas konkretus balsas bus lemiantis yra be galo maža. Taigi balsavimo veiksmo atnešama nauda atrodytų menka, o veiksmo kaina yra akivaizdi, tad racionalu būtų rinkimuose nebalsuoti. Keli ankstyvi lošimų teorijos darbai [1] suteikė vilties tikėtis išvysti darbus paaiškinančius tiek šį paradoksą, tiek pačių rinkimų dinamiką, bet vėlesni tyrimai parodė, kad toks paaiškinimas yra bendru atveju neįmanomas [2]. Bet realūs žmonės retai yra racionalūs lošimų teorijos prasme.

Yra darbų, kurie bando aiškinti rinkimų fenomeną iš psichologinės pusės. Pvz., aiškinant, kad žmonės taip parodo paramą demokratijai, vengia kaltės jausmo (jei laimėtų "bloga" partija) ar jaučia visuomenės spaudimą. Nors šie paaiškinamai skamba gana įtikinamai ir turi mokslinį pagrindą, bet šių apmąstymų pagrindu formuluojami rinkimų modeliai dažnai pasidaro per daug sudėtingi, kad juos būtų įmanoma tinkamai sukalibruoti ir panaudoti praktikoje [3].

Per paskutinius 30 metų atsirado alternatyvus požiūris į socialinių reiškinių modeliavimą. Fizikai pradėjo naudoti savo metodiką ir idėjas tirdami vis labiau tampančius prieinamais socialinius duomenis. Taip galiausiai atsirado tai kas šiuo metu yra vadinama sociofizika (angl. sociophysics) [4]. Tačiau nepaisant praėjusio laiko ir gausybės darbų esminiai klausimai lieka iki galo neatsakyti iš teorinės pusės. Šis tyrimas yra išskirtinis, nes mes nagrinėjame jaunos demokratinės valstybės, Lietuvos, duomenis. Taip pat mes nagrinėjame balsus atiduotus už partijų sąrašus, kai sociofizikiniai darbai dažnai nagrinėja balsus atiduotus už žmones [5]. Lietuvos sociologai ir politologai savo ruožtu nagrinėja rinkimų duomenis apygardų ar rajonų mastelyje dažnai siekdami ne sukurti matematinį statistinį modelį, nors yra buvę bandymų sukurti regresinius modelius [6], o paaiškinti rezultatus socialiniais ir demografiniais pokyčiais [7, 8, 9]. Mūsų tikslas yra išsami, mastelis - apylinkė, statistinė analizė ir modelis atkuriantis empiriškai stebimas statistines savybes.

Pirmasis požiūris, kuriuo nagrinėjame duomenis, yra partijų balsų dalies skirstinys per skirtingas apylinkes tų pačių rinkimų metu. Kiekvienai apylinkei įvertiname kaip dažnai balsuota už kiekvieną rinkimuose dalyvavusią partiją. Jeigu partija gavo daugiau nei 5 procentus balsų, ją nagrinėjame atskirai, o jeigu ne, tai prijungiame prie "kitos" partijos. 1 pav. kairėje dalyje matome Sąjūdžio kelio (a), Lietuvos socialdemokratų partijos (b), Lietuvos krikščionių demokratų partijos (e), Lietuvos demokratinės darbo partijos (f) ir "kitos" partijos (i) balsų dalies skirstinius 1992 Seimo rinkimų metu.



1 pav. 1992 metų Seimo rinkimų rezultatai: juodi taškai - empiriniai duomenys, ištisinės kreivės - Beta skirstinys.

Antrasis požiūris yra eiliškumo-dydžio skirstinys (angl. rank-size distribution). Naudojant šį metodą duomenys, šiuo atveju - partijos balsų dalis, yra išrikiuojami nuo didžiausios iki mažiausios vertės. Šis vaizdavimas yra ekvivalentus tikimybiniam vaizdavimui, bet akcentuoja ne dažniausiai pasitaikančias vertes, o didžiausias stebėtas vertes. Kai kurių rinkimų duomenyse tai padeda įžvelgti, kad kai kurių partijų balsai yra segreguoti. 1992 metų rinkimuose segregacija matoma tik "kitos" partijos duomenyse. Taip nutinka dėl stiprios paramos Lietuvos lenkų rinkimų akcijai rytų Lietuvos rajonuose, kai tuo tarpu likusioje Lietuvoje jos palaikymas buvo menkas.

Siekdami paaiškinti empirinius duomenis mes siūlome elementarų agentais paremtą modelį. Šiame modelyje rinkėjų nuomonės yra lanksčios. Agentai gali keisti nuomonę nepriklausomai vieni nuo kitų (pvz., dėl informacijos žiniasklaidoje). Agentai taip pat pasiduoda konformizmui - juos gali įtakoti kiti agentai. Iš šio elementaraus modelio seka Beta skirstiniai, kurie gana gerai aproksimuoja empirinius duomenis [10].

*Reikšminiai žodžiai: socialinių reiškinių modeliavimas, statistinė analizė, agentais paremti modeliai* 

- [1] D. Black, The theory of committees and elections (CUP, 1958).
- [2] R. D. McKelvey, J. Eco. Theory 12, 472-482 (1976).
- [3] P. Duggins, JASSS 20, (2017).
- [4] D. Stauffer, J. Stat. Phys. 151, 9-20 (2013).
- [5] S. Fortunato, C. Castellano, Phys. Rev. Lett. 99, 138701 (2007).
- [6] M. Jastramskis, Parlamento studijos 11 (2011).
- [7] A. Krupavicius, Elect. Stud. 16, 541-549 (1997).
- [8] M. Degutis, Lit. Pol. Sci. Yearbook 2000, 69-111 (2000).
- [9] A. Ramonaite, *The Development of the Lithuanian Party System: From Stability to Perturbation*, 69–88 (Routledge, 2006).
- [10] A. Kononovicius, arXiv:1704.02101 [physics.soc-ph].

# Pliūpsnių statistika ir netikra ilga atmintis Forex duomenyse

## Bursting statistics and spurious long-range memory in Forex

Aleksejus Kononovicius, Vygintas Gontis

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

Ankstesniuose darbuose mes daug dėmesio skyrėme netiesiniams Markovo modeliams, kurių generuojamos laiko eilutės pasižymi 1/f triukšmu. Pastarasis yra siejamas su ilgos atminties fenomenu, nes kai spektrinis tankis yra artimas 1/f formai, tai laiko eilučių autokoreliacijos gesta ypatingai lėtai - kaip laipsninės, o ne eksponentinės funkcijos. Tačiau kyla savotiškas paradoksas, nes pagal apibrėžimą Markovo procesai neturi atminties. 1/f spektras tokiuose modeliuose atsiranda dėl netiesiškmų. Ši problema taip pat yra nagrinėjama ekonometrijoje, bet pastarojoje dažniausiai nagrinėjami tiesiniai arba sub-tiesiniai Markovo modeliai [1]. Taip pat dažnai naudojami įvairūs ARCH šeimos modeliai (pvz., [2]), kurie priklauso daugiau nei nuo vienos sistemos praeities būsenos, tad pagal apibrėžimai jie nėra Markovo procesai. Žinoma, mes siekiame parodyti, kad netiesiniai Markovo modeliai yra geresni finansų rinkų, ir jose vyraujančios ilgos atminties, modeliai.

Viena galimybių tą parodyti yra nagrinėti empirinių duomenų, netiesinių Markovo modelių ir ne-Markovo modelių pliūpsnių statistiką (angl. *bursting statistics*). Pliūpsnių statistika yra įvertinama pasirinkus tam tikrą ribą  $h_x$  ir nubraižius ją kartu su laiko eilute (1 pav.).



1 pav. Pavyzdinė laiko eilutė, x(t):  $t_i$  ribos kirtimo laikai. Laiko tarpas tarp  $t_1$  ir  $t_2$  yra vadinamas pliūpsnio trukme, o laiko tarpas tarp  $t_2$  ir  $t_3$  yra vadinamas duobės trukme.

Tokiu atveju gauname įvykių laikų  $t_i$  rinkinį, kurių metu laiko eilutė kerta mūsų pasirinktą ribą. Taigi  $t_i$  atžvilgiu galime apibrėžti kelis skirtingus kirtimo "tipus" – kai riba kertama iš viršaus (prieš tai procesas buvo virš ribos), kai riba kertama iš apačios (prieš tai procesas buvo žemiau ribos). Visais atvejais mus domina grįžimo laikai,  $\tau_i = t_i - t_{i-1}$ . Jeigu kirtimo įvykio *i* metu procesas kirto ribą iš viršaus, tai *i*-tąjį grįžimo laiko vadiname pliūpsnio trukme (angl. *burst duration*) ir žymime  $T_j$  (indeksas *j* numeruoja pliūpsnius), o priešingu atveju tą patį laiką vadiname duobės trukme (angl. *inter-burst duration*) ir žymime  $\theta_k$  (indeksas *k* numeruoja duobes).

Ankstesniuose darbuose mes esame parodę [3, 4, 5], kad tiek pliūpsnių, tiek duobių trukmių skirstiniai mūsų modeliuose yra laipsninės formos su rodikliu 3/2. Šis rezultatas yra labai bendras, nes tokia forma ir jos rodiklis yra gaunama vienmačiams difuziniams procesams bendru atveju [6]. Daugiamačiams difuziniams procesams ir ne-Markovo procesams šis rodiklis turėtų būti kitoks [6, 7].

Turėdami mintyje šį teorinį skirtumą analizuojame realius empirinius duomenis iš Forex (trump. angl. *Foreign exchange market*). Mes nagrinėjame išvalytos vienos minutės grąžos (logaritminio kaino pokyčio) ir prekybos aktyvumo (sandorių skaičius per minutę) laiko eilutes. Taip pat analizuojame išvalytas vienos dienos grąžas. Valymo procedūros metu siekiame panaikinti tikrosios laiko eilutės iškraipymus rinkų diskretumu ir išoriniu triukšmu. Prekybos aktyvumo laiko eilutės valomos naudojant Anscombe transformaciją. Grąžos laiko eilutės valomos naudojant standartinio nuokrypio filtrą. Visais trim skirtingais atvejais galime patvirtinti, kad gavome pliūpsnių ir duobių skirstinius, kurie turi laipsninę formą su rodikliu 3/2.



2 pav. Prekybos aktyvumo pliūpsnių ir duobių tikimybės tankio funkcijos. Ištisinė kreivė atitinka 3/2 dėsnį.



3 pav. Absoliučios grąžos pliūpsnių ir duobių tikimybės tankio funkcijos. Ištisinė kreivė atitinka 3/2 dėsnį.

Reikšminiai žodžiai: ilga atmintis, rožinis triukšmas, pliūpsnių statistika

- M. Jeanblanc, et al., Mathematical Methods for Financial Markets (Springer, 2009).
- [2] L. Giraitis, et al., ARCH(∞) models and long memory, Handbook of Financial Time Series, 71–84 (Springer Verlag, 2009).
- [3] V. Gontis, A. Kononovicius, ACS 15, 1250071 (2012).
- [4] V. Gontis, et al., Physica A 462, 1091-1102 (2016).
- [5] V. Gontis, A. Kononovicius, Physica A 483, 266-272 (2017).
- [6] S. Redner, A guide to first-passage processes (CUP, 2001).
- [7] M. Ding, W. Yang, Phys. Rev. E 52, 207-213 (1995).

## Spinorinės lėtos šviesos formavimas šaltose atomų dujose

# Spinor slow light formation in cold atomic gas

Viačeslav Kudriašov<sup>1</sup>, Julius Ruseckas<sup>1</sup>, Gediminas Juzeliūnas<sup>1</sup>,

Meng-Jung Lee<sup>2</sup>, Chin-Yuan Lee<sup>2</sup>, Kao-Fang Chang<sup>2</sup>, Hung-Wen Cho<sup>2</sup>, Ite A. Yu<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Sauletekio 3, Vilnius LT-10257, Lithuania

<sup>2</sup>Department of Physics and Frontier Research Center on Fundamental and Applied Sciences of Matters,

National Tsing Hua University, Hsinchu 30013, Taiwan

viaceslav.kudriasov@ff.vu.lt

Over the last decade there has been significant progress in studying electromagnetically induced transparency (EIT) phenomena, related to slow, stored and stationary light [1]. This research has been strongly stimulated by a number of applications, like low-lightlevel non-linear optics and quantum information processing. The slow and stationary light greatly enhance the light-matter interaction and enable nonlinear optical processes to achieve significant efficiency even at a single-photon level. The storage of light using the dynamic EIT scheme transfers quantum states between photons and atoms, serving as a photonic quantum memory. EIT-related research has made a great impact on the nonlinear optics and quantum information science.

It was recently proposed a new concept of twocomponent or spinor slow light (SSL) exhibiting a number of distinct features in the EIT phenomena [2]. Particularly, theoretical investigations demonstrated that the SSL in a double tripod (DT) atom–light coupling scheme can lead to the peculiar phenomena, such as formation of the quasi-particles exhibiting Dirac spectra and oscillations between SSL field components [3]. This study is the first experimental demonstration of spinor slow light [4] which may result in novel applications for quantum information manipulation, precision measurement and nonlinear optics.

The experimental study makes use of the DT transition scheme and was carried out with the lasercooled <sup>87</sup>Rb atoms (Fig. 1). A cigar-shaped cloud of cold <sup>87</sup>Rb atoms with the dimension of  $9x2x2 \text{ mm}^3$  was produced by a magneto-optical trap (MOT). Typically, the  $10^9$  atoms with a temperature of about 300  $\mu$ K was trapped in the MOT. Although the system of cold atoms is not a necessary condition for the SSL formation, utilizing cold atoms helps to minimize losses such as those induced by collisional and transit decoherence processes. In this case, the experimental system is as simple as the theoretical model.

The DT level scheme consists of three atomic ground states  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$  and  $|2\rangle$  and two excited states  $|A\rangle$  and  $|B\rangle$  (Fig. 1a). One probe field and two coupling fields drive the transitions from  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$  and  $|2\rangle$  to  $|A\rangle$ , respectively, to form the first tripod configuration. Another probe field and the other two coupling fields drive the transitions from the same ground states to  $|B\rangle$ 

to form the second tripod configuration (Fig. 1b). This DT is a combination of two single-tripod schemes, but its physics is more abundant due to the interaction between the two components of light coupled with two atomic coherences. The DT setup was arranged in the co-propagation configuration where all fields propagate in the same direction and overlap completely (Fig. 1c).



Fig. 1. The light-atom coupling diagrams (a,b) and SSL experimental setup (c).

Keywords: slow light, double tripod, atomic cloud, rubidium gas, nonlinear optics.

#### Literature

- [1] M. Fleischhauer et al., Rev. Mod. Phys. 77, 633–673 (2005).
- [2] R.G. Unanyan et al., Phys. Rev. Lett. 105, 173603 (2010).
- [3] J. Ruseckas et al., Phys. Rev. A 83, 063811 (2011).
- [4] M.-J. Lee et al., Nature Commun. 5, 5542 (2014).

# Dvispalvės lėtos šviesos osciliacinis reiškinys kvantinėje terpėje

# Oscillation phenomenon of two-color slow light in quantum medium

<u>Viačeslav Kudriašov<sup>1</sup></u>, Julius Ruseckas<sup>1</sup>, Gediminas Juzeliūnas<sup>1</sup>,

Meng-Jung Lee<sup>2</sup>, Chin-Yuan Lee<sup>2</sup>, Kao-Fang Chang<sup>2</sup>, Hung-Wen Cho<sup>2</sup>, Ite A. Yu<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio 3, Vilnius LT-10257, Lithuania

<sup>2</sup>Department of Physics and Frontier Research Center on Fundamental and Applied Sciences of Matters,

National Tsing Hua University, Hsinchu 30013, Taiwan

viaceslav.kudriasov@ff.vu.lt

Two-color slow light is a novel approach in the research of electromagnetically-induced transparency (EIT) having potential applications in quantum light storage, quantum processing and nonlinear optics. Most of its properties are yet to be studied theoretically and experimentally [1-3].

In this work, we have studied the oscillation phenomenon between the two slow light components controlled by the two-photon detuning in a double tripod (DT) light-atom coupling scheme [3]. The oscillation phenomenon as well as the interaction of the probe fields with the atomic medium is determined by the coupling fields applied to the medium. Specifically, the oscillations are induced by the coupling between the two ground-state coherences due to the non-zero detuning. This leads to the interaction between the probe fields and their oscillations during the propagation in the atomic medium.

In the co-propagating DT scheme as only one probe pulse was sent to the input and the four coupling fields were constantly present, the outputs of both probe pulses were measured at different two-photon detunings  $\delta$ . Two outputs oscillate alternatively: when one reaches minima, the other becomes maxima and vice versa (Fig. 1c). Their total transmitted energy decays as the detuning increases, because the detuning away from the resonance is associated with losses. EIT The transparency peak or the maximum transmission corresponds to the two-photon resonance in the EIT spectrum [4]. The number of oscillation cycles can be considerably increased with the storage and retrieval of SSL. The idea is based on the intuition that the propagation time of the light pulses in the medium is equivalent to the storage time of motionless ones transformed into the atomic coherences.

The data of the light-storage DT scheme were used to determine the two-photon detuning (or anything that can affect it) with the satisfactory accuracy and precision. The sensitivity of our method is based on the fact that the light is stored in a superposition of two atomic levels, that is, in two atomic coherences. Therefore, for sufficiently long storage times, even a slight energy mismatch between these levels can lead to a large accumulated phase which can be detected by measuring the conversion of the regenerated light into another component. The storage time and the measurement precision were of the orders of  $100 \ \mu s$  and  $100 \ Hz$ , respectively.



Fig. 1. Oscillation phenomenon in the double-tripod atom-light coupling scheme.

Keywords: double tripod, two-photon detuning, field oscillations, transmission, atomic coherence.

#### Literature

- [1] R.G. Unanyan et al., Phys. Rev. Lett. 105, 173603 (2010).
- [2] J. Ruseckas et al., Phys. Rev. A 83, 063811 (2011).
- [3] M.-J. Lee et al., Nature Commun. 5, 5542 (2014).
- [4] M. Fleischhauer et al., P. Rev. Mod. Phys. 77, 633-673 (2005).

# Netiesinis dažnio keitimas ir interferometrija su lėta šviesa

# Nonlinear frequency conversion and interferometry with slow light

Viačeslav Kudriašov<sup>1</sup>, Julius Ruseckas<sup>1</sup>, Gediminas Juzeliūnas<sup>1</sup>,

Meng-Jung Lee<sup>2</sup>, Chin-Yuan Lee<sup>2</sup>, Kao-Fang Chang<sup>2</sup>, Hung-Wen Cho<sup>2</sup>, Ite A. Yu<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio 3, Vilnius LT-10257, Lithuania

<sup>2</sup>Department of Physics and Frontier Research Center on Fundamental and Applied Sciences of Matters,

National Tsing Hua University, Hsinchu 30013, Taiwan

viaceslav.kudriasov@ff.vu.lt

Spinor slow light (SSL) was recently proposed as a novel slow light modification scheme enabling to achieve unusual optical effects in quantum media [1,2]. The SSL may lead to the interesting physics such as spinor Bose–Einstein condensation of dark-state polaritons and Dirac particles. Particularly, formation of SSL polaritons exhibiting Dirac energy spectrum and oscillations between the frequency components were studied using a double tripod (DT) scheme [2,3]. Among the interesting effects to be studied are the nonlinear frequency conversion processes, especially at a single-photon level.

We demonstrated that by varying one of the three factors in the DT, the two-photon detuning, optical density (OD) and coupling field Rabi frequency, the spinor slow-light outputs oscillate alternatively [3]. Regarding the nonlinear optical process that converts light from one frequency to another, high conversion efficiencies (up to 96%) can be achieved for an OD of 250 in the DT scheme. The same efficiency would require an OD of 500 in the widely used double-lambda scheme [4]. Hence, the DT is a new and advantageous scheme for nonlinear frequency conversion. Current setup was arranged in a beam co-propagation configuration, which allows for a higher efficiency as compared with the counter-propagating one.

In a proof-of-principle measurement, our study shows that the DT scheme for the light storage behaves like the two outcomes of an interferometer enabling measurements of the frequency detuning with high precision (Fig. 1). With such an interferometer one can precisely determine the two-photon detuning in the system. We utilized the sufficiently long decay time constant of stored light (~76  $\mu$ s) for these measurements [4]. The measured value of the difference is consistent with the actual one, showing that the light-storage DT scheme can be used to determine the detuning or anything that can affect it, such as light shifts, Zeeman shifts, and so on. The precision demonstrated was of the order of 100 Hz.

Furthermore, we demonstrated a possible application of employing the DT scheme as quantum memory/rotator for the two-colour qubits by utilizing a two-photon detuning during the storage time. The single-photon SSL can be considered as the qubit with the superposition state of two frequency modes or, simply, as the two-colour qubit. Such a qubit can be produced by sending a single photon to the DT system. It was demonstrated that the storage of light in the DT system preserves the superposition coefficients [3].



Fig. 1. Light storage in the double-tripod scheme.

Keywords: double tripod, light storage, optical density, interferometer, two-color quibit.

#### Literature

- [1] R. G. Unanyan, et al., Phys. Rev. Lett. 105, 173603 (2010).
- [2] J. Ruseckas et al., Phys. Rev. A 83, 063811 (2011).
- [3] M.-J. Lee et al., Nature Commun. 5, 5542 (2014).
- [4] M. D. Lukin, Rev. Mod. Phys. 75, 457 (2003).

# Padrikojo spiečiaus IC 4756 raudonųjų milžinių sekos žvaigždžių cheminė sudėtis

# Chemical composition of giant stars in the open cluster IC 4756

Vilius Bagdonas<sup>1</sup>, Arnas Drazdauskas<sup>1</sup>, Gražina Tautvaišienė<sup>1</sup>, Rodolfo Smiljanic<sup>2</sup>, Yuriy Chorniy<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Saulėtekio al. 10222 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Nicolaus Copernicus Astronomical Center, Polish Academy of Sciences, Bartycka 18, 00-716, Warsaw, Poland

vilius.bgd@gmail.com

Stars of open clusters (OC) are born from the same molecular cloud, they have the same primordial chemical composition, age and distance. These reasons give for the OCs stars a significant advantage over the field stars, as former ones provide much better statistical evaluations and allow us to construct the Galaxy's chemical enrichment models more precisely.

Since the origin of  $\alpha$ - and iron-peak-elements are different – former ones are mainly produced via the Type II supernovae explosions, latter – via Type Ia supernovae explosions – the interstellar medium enrichement timescales for these elements are different as well. Thus,  $\alpha$ - and iron-peak chemical elements are important galactic evolution indicators as their abundances vary in different parts of the Galaxy.

The *s*- and *r*-process elements are created via the neutron capture processes at different stages of stellar evolution. However, a contribution of the asymptotic giant branch (AGB) stars to the production of *s*-process elements was underestimated, especially from old, low-mass stars. This effect is visible in young open clusters as they exhibit the overabundance of *s*-process elements compared to the older clusters [1] or the field stars.

In this work, we performed a high-resolution spectral analysis for thirteen red giant branch stars of the open cluster IC 4756. We determined their main atmospheric parameters as well as abundances of  $\alpha$ -, iron-peak, *s*-, and *r*-process chemical elements.

IC 4756 (Galactic coordinates l = 36.381, b = 5.242) is a relatively young open cluster (0.79 – 0.89 Gyr [2]). It is located in the inner part of the Galactic disk at the galactocentric distance of around 8.1 kpc. As established in several studies, cluster's metallicity [Fe/H] is close to Solar (varies from -0.22 to 0.08 dex). Even though this cluster has multiple studies, in this work we carried out a detailed chemical analysis of 13 its stars.

High resolution spectra (R  $\approx$  48 000) were obtained using a bench-mounted, high-resolution astronomical eschelle spectrograph FEROS [3] at the 2.2 m MPG/ESO Telescope in La Silla. FEROS covers the whole visible range of 350–920 nm over 39 orders. The FEROS DRS pipeline within MIDAS was used for spectral reductions. A differential analysis technique was used for the spectra analysis as in [4]. All calculations were carried out in relation to the Sun. Main atmospheric parameters ( $T_{\rm eff}$ , log g, Fe/H and  $v_t$ ) for our programme stars were derived using excitationionization equilibrium principles. For the determination of chemical element abundances, we used the EQWIDTH and BSYN program packages, developed at the Uppsala Observatory. A set of plane-parallel, one dimensional, hydrostatic, constant flux LTE model atmospheres from MARCS were used as well.

In this work, for 10 of our programme stars we derived similar atmospheric parameters – the average  $T_{\rm eff} = 5124 \pm 55$  K, log  $g = 2.73 \pm 0.1$ , [Fe/H] =  $-0.02 \pm 0.01$ ,  $v_t = 1.37 \pm 0.11$  km/s. The remaining stars (ID: 14, 28 and 52) have slightly lower  $T_{\rm eff}$ 's and slightly higher log g's. The determined combined average cluster metallicity for all stars is [Fe/H] =  $-0.03 \pm 0.04$ .

 $\alpha$ - and iron-peak-elements average abundances relative to iron for all programme stars are Solar or slightly above Solar. *s*-process elements show higher abundances compared to the Sun confirming the significance of AGB stars in producing them (Figure 1).



Figure 1. Mg and La abundance-to-Fe ratios in stars of IC 4756 compared to other clusters' studies. Stars investigated in this work are indicated as red dots. The green and blue dots indicate clusters from another our study [4], black circles – clusters from [5].

This work is supported by the grant from the Research Council of Lithuania (MIP-082/2015).

Key words: open cluster, chemical element abundances

- [1] V. D'Orazi et al., ApJ. 693, L31 (2009)
- [2] M. Salaris, A. Weiss, S. M. Percival, A&A. 414, 163 (2004)
- [3] A. Kaufer et al., Msngr. **95**, 8 (1999)
- [4] A. Drazdauskas et al., MNRAS 462, 794 (2016)
- [5] V. A. Marsakov et al. VizieR Online Data Catalog 809, (2016)

# Netaisyklingosios nykštukinės galaktikos Leo A žvaigždėdaros istorija

# Star formation history of the dwarf irregular galaxy Leo A

<u>Marius Čeponis</u><sup>1</sup>, Rima Stonkutė<sup>1,2</sup>, Vladas Vansevičius<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius <sup>2</sup>Vilniaus universiteto Astronomijos observatorija, Čiurlionio 29, LT-03100, Vilnius mariusceponis@gmail.com

Visatoje skaitlingiausios yra nykštukinės galaktikos. Todėl, nepaisant mažos masės, jos yra ypatingai svarbios aiškinantis galaktikų formavimosi ir žvaigždėdaros istoriją. Šių galaktikų struktūra ir evoliucija yra paprastesnė nei masyvių galaktikų, o tai įgalina nagrinėti ankstyviausius Visatos raidos laikotarpius tiriant netoli esančias nykštukines galaktikas. Išsiaiškinę, kaip formuojasi nykštukinės galaktikos, taip pat suprasime ir pagrindinius galaktikų evoliucijos dėsningumus.

Šiame darbe tiriama netaisyklingosios nykštukinės galaktikos Leo A žvaigždžių formavimosi istorija. Leo A yra viena iš labiausiai izoliuotų Vietinės grupės galaktikų, todėl jos raida, tikėtina, yra mažai paveikta išorinių veiksnių. Dėl šių priežasčių Leo A yra labai svarbus objektas nagrinėjant galaktikų evoliuciją.

Leo A žvaigždėdaros istorija tiriama naudojant žvaigždžių fotometrijos katalogą [1], kuris gautas matuojant Subaru Suprime-Cam CCD kameros nuotraukas. Taip pat naudojami ir mūsų atlikto dirbtinių žvaigždžių testo (AST – Artificial Star Test) rezultatai – fotometrinių paklaidų įverčiai ir matavimų pilnumo funkcijos. Kataloge žvaigždžių ryškiai pateikti trijose fotometrinėse juostose – *B*, *V*, *I* (visi jie panaudoti nustatant žvaigždėdaros istoriją). Iš 20583 pradiniame kataloge esančių objektų tyrimui buvo atrinktos žvaigždės (V < 24) patenkančios į elipsę, kurios didysis pusašis lygus Holmbergo spinduliui a = 3', 5 (805 pc) [2]. Be to, interaktyviai buvo pašalinti galimai nežvaigždiniai objektai. Viso šiame darbe tyrimui naudotos 2539 žvaigždės.

Leo A žvaigždėdaros istorija nustatyta nauju mūsų sukurtu metodu. Jame kiekvienai tiriamos galaktikos žvaigždei, lyginant išmatuotus ryškius (fotometrinių juostų skaičius neribojamas) su teoriniais modeliais, apskaičiuojama tikimybė priklausyti konkretaus amžiaus izochronai. Laikoma, kad ryškių matavimų paklaidos atitinka daugiamačius normaliuosius skirstinius nustatytus iš AST testų. Taip pat, įskaičiuojama pradinės masių funkcijos [3] ir matavimų pilnumo (įvertinta iš AST testų) įtaka tikimybėms. Be to, užduodamas amžiaus ir metalingumo sąryšis (1 pav. raudona kreivė), apskaičiuotas su PEGA-SE.2 [4] programa, naudojant anksčiau nustatytą Leo A žvaigždėdaros istorijos eigą pagal pagrindinės sekos posūkio taško žvaigždes [5].

Šiame darbe atkurta žvaigždėdaros istorija (1 pav.) aiškiai rodo, kad didžioji dalis Leo A žvaigždžių yra santykinai jaunos – spartesnės žvaigždėdaros etapai prasidėjo tik prieš 4-6 mlrd. m. Didžiausias žvaigždžių formavimosi aktyvumas buvo prieš 2-3 mlrd. m. ir per pastarąjį 800 mln. m. laikotarpį (2 pav.). Nustatyta Leo A galakti0.0020 0.0015 0.0015 0.0015 0.0015 0.0015 0.0010 0.0010 0.0010 0.0010

koje susiformavusių žvaigždžių masė yra  $\sim 3 \cdot 10^6 M_{\odot}$ .



1 pav. Leo A žvaigždėdaros istorija. Mėlyna linija žymi žvaigždžių formavimosi greitį, SFR(t). Šviesiai mėlynos sritys – SFR(t) neapibrėžtumai. Raudona linija – naudotas amžiaus-metalingumo sąryšis.



2 pav. Leo A žvaigždėdaros istorija per pastarąjį milijardą metų. Žymėjimai atitinka 1 pav.

Reikšminiai žodžiai: žvaigždės, žvaigždėdaros istorija, nykštukinės galaktikos, Leo A

- Stonkutė, R., Arimoto, N., Hasegawa, T., Narbutis, D., Tamura, N., Vansevičius, V. 2014, ApJ Suppl. Ser., 214, 19
- [2] Vansevičius, V., Arimoto, N., Hasegawa, T., Ikuta, C., Jablonka, P., Narbutis, D., Ohta, K., Stonkutė, R., Tamura, N., Vansevičius, V., Yamada, Y. 2004, ApJ, 611, L93
- [3] Kroupa, P. 2001, Mon. Not. R. Astron. Soc., 322, 231
- [4] Fioc, M., Rocca-Volmerange, B. 1999, astro.ph.1217
- [5] Cole, A. A., Skillman, E. D., Tolstoy, E., Gallagher, J. S., Aparicio, A., Dolphin, A. E., Gallart, C., Hidalgo, S. L., Saha, A., Stetson, P. B., Weisz, D. R. 2007, ApJ, 659, L17

# CNO elementų pasiskirstymas Paukščių Tako Galaktikoje

# Distribution of CNO elements in the Milky Way Galaxy

<u>Arnas Drazdauskas</u>, Gražina Tautvaišienė, Edita Stonkutė, Renata Ženovienė, Šarūnas Mikolaitis, Vilius Bagdonas, Yuriy Chorniy, Žydrūnė Misikonytė

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

arnas.drazdauskas@tfai.vu.lt

Gyvybei svarbių elementų, tokių kaip anglis, deguonis ir azotas, pasiskirstymas mūsu Galaktikoje vis dar nėra iki galo ištirtas. CNO elementai yra svarbūs Galaktikos cheminės evoliucijos kontekste. Sie elementai yra svarbūs ingridientai termobranduolinėse reakcijose, vykstančiose žvaigždžių šerdyse. Pastaruoju metu vykdoma keletas didelio masto dangaus apžvalgos tyrimų, vienas iš kurių yra Gaia-ESO [1] spektroskopinė dangaus apžvalga, vykdoma Europos pietinėje observatorijoje (ESO) su Čilėje esančiu Labai dideliu teleskopu VLT ir prie jo sumontuotu didelės skiriamosios gebos spektrometru UVES. Šio tyrimo metu planuojama spektroskopiškai atstebėti bei ištirti daugiau kaip 100 000 žvaigždžių. Apjungus gautus duomenis su Europos kosmoso agentūros Gaia kosminės misijos [2] astrometriniais rezultatais, siekiama tiksliau įvertinti cheminių elementų gradientus Paukščių Tako galaktikoje.

Pasitelkdami Gaia-ESO apžvalgoje nustatytas C, N, O elementų gausas (tyrimo metodika yra aprašyta [3]) ir žvaigždžių kinematinius parametrus iš Gaia-Tycho [4,5] astrometrinės bazės, mes tikimės tiksliau įvertinti šių elementų pasiskirstymą Galaktikos lauko žvaigždėse.

Mūsų darbe tyrinėjami anglies ir azoto elementai yra jautrūs įvairiems fizikiniams procesams, tokiems kaip pirmoji ir papildoma drumstis, įtakojama žvaigždės konvekcijos, sukimosi, ar kitų veiksnių, ko pasekoje yra stebimos pakitusios šių elementų gausos žvaigždžių fotosferose. Jų gausos žvaigždžių atmosferose priklauso nuo esamos žvaigždės evoliucijos stadijos, jos masės, bei kitų parametrų. Norint išvengti evoliucinių cheminių elementų maišymosi efektų, mes tyrinėjame suminės anglies ir azoto gausos ([C+N/Fe]) priklausomybę nuo galaktocentrinio atstumo, bei atstumo nuo Galaktikos plokštumos. Plonojo ir storojo disko žvaigždės buvo atskirtos pasinaudojant alfa-elementų ir geležies gausų santykių priklausomybe, kaip aprašyta kitų autorių darbuose [6].

Kaip matyti iš 1 pav., radialiniai gradientai tiek plonojo, tiek storojo disko žvaigždėms yra neigiami. Vertikalus gradientas plonojo disko žvaigždėms taip pat yra neigiamas, tuo tarpu storojo disko žvaigždėms nustatytoms C ir N gausoms stebimas šiek tiek teigiamas pasiskirstymas nuo atstumo modulio.



1 pav. [C+N/Fe] radialinis (viršuje) bei vertikalus (apačioje) gradientai plonojo (angl. *Thin*) ir storojo (angl. *Thick*) disko žvaigždėms.

Modelis, aprašantis Galaktikos chemodinaminę evoliucija, turėtų paaiškinti tiek radialinius tiek vertikalius cheminių elementų gausų pasiskirstymus. Šiuo metu duomenų kiekis yra nepakankamas, norint iki galo įvertinti anglies ir azoto gausų pasiskirstymus mūsų Galaktikoje. Ateityje, apjungiant Gaia kosminės misijos metu nustatytus tikslius žvaigždžių atstumų duomenis kartu su vykdomais plataus masto spektroskopiniais dangaus tyrimais, šių svarbių žvaigždžių evoliucijai elementų pasiskirstymas Galaktikoje bus ištirtas su daug didesniu tikslumu.

Tyrimas dalinai finansuojamas Lietuvos Mokslo Tarybos (projekto nr. MIP-082/2015).

Reikšminiai žodžiai: žvaigždžių evoliucija, Galaktikos evoliucija, spektroskopija.

#### Literatūra

[1] G. Gilmore, S. Randich, M. Asplund et al., The Messenger, 147, 25 (2012).

[2] Gaia Collaboration, T. Prusti, J. H. J. De Bruijne, A. G. A. Brown et. al., A&A, **595**, A1 (2016).

[3] G. Tautvaišienė et al., A&A, **573**, 55 (2015).

[4] D. Michalik, L. Lindegren & D. Hobbs, A&A, **574**, A115 (2015).

[5] F. Arenou, X. Luri, C. Babusiaux et al., A&A, **599**, A50 (2017).

[6] Š. Mikolaitis, V. Hill, A. Recio-Blanco et al., A&A, **572**, A33 (2014).

# Nauji absorbcijos linijų spektroskopiniai duomenys tarpžvaigždinės ir tarpgalaktinės medžiagos stebėjimams

# **Revised spectroscopic data for absorption lines relevant** to observations of interstellar and intergalactic matter

Romas Kisielius<sup>1</sup>, Frances H. Cashman<sup>2</sup>, Varsha P. Kulkarni<sup>2</sup>, Gary J. Ferland<sup>3</sup>, Pavel Bogdanovich<sup>1</sup> <sup>1</sup>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius, Lithuania <sup>2</sup>Department of Physics and Astronomy, University of South Carolina, Columbia, SC 29208, USA <sup>3</sup>Department of Physics and Astronomy, University of Kentucky, Lexington, KY 40506, USA <u>Romualdas.Kisielius@tfai.vu.lt</u>

Measurements of element abundances in galaxies from astrophysical spectroscopy depend sensitively on the atomic data used. With the goal of making the latest atomic data accessible to the community, we present a compilation of selected atomic data for resonant absorption lines at wavelengths longer than 911.753 Å (the H I Lyman limit), for key heavy elements (heavier than atomic number 5) of astrophysical interest [1]. In particular, we focus on the transitions of those ions that have been observed in the Milky Way interstellar medium ( ISM) , the circumgalactic medium ( CGM) of the Milky Way or other galaxies, and the intergalactic medium ( IGM).

We provide wavelengths, oscillator strengths, associated accuracy grades, and references to the sources of the oscillator strength data. We also make attempt to compare, to evaluate, and to assess the recent oscillator strength data, originating both from the theoretical and experimental determinations. For about 22% of the lines that have updated oscillator strength *f*-values, the differences between the former values and the updated ones are larger than or close to 0.1 dex.

Our compilation can be a useful resource for absorption line studies of the ISM, as well as studies of the CGM and IGM traced by sight lines to quasars and gamma-ray bursts. Further, the studies (including those enabled by future generations of extremely large telescopes) of absorption by galaxies against the light of background galaxies will also benefit from our compilation.

In the CGM/IGM community, the most commonly used reference for atomic data, by far, is [2]. Our goal is to make the latest improvements accessible to the community, thus here we present a compilation of oscillator strengths for key transitions, including updates made since 2003. We focus, in particular, on the ions that have been measured in ISM/CGM/IGM studies for the selected elements ranging from C (Z = 6) to Ge (Z = 32), and for Kr (Z = 36) and Pb (Z = 82). Various ionization stages are considered.

In data sources selection we wish to be as consistent as possible. Hence we have devised selection rules and procedure for the listed lines; (a) we give priority to the observed wavelength, which we denote  $\lambda_{vac}$  over the Ritz wavelength  $\lambda_{Ritz}$ ; (b) as a rule, the line wavelength source is the NIST database [3]; (c) we tabulate absorption lines originating from the ground level only. We do not investigate lines originating from the excited levels of the ground configuration or the ground term; (d) we consider only those lines that have  $f \ge 0.001$ ; (e) usually, we tabulate *f*-values from the newest sources giving priority to the experimental data over the theoretical values. In the cases where new data are not significantly different from the older data, we choose to rely on the older data preferring the most advanced theoretical methods for data production.

We investigated 576 spectral lines, for 400 of these transitions, we have listed updated data. Of these, 60 transitions, though listed either in [2] or [3], previously had no oscillator strength value reported. A breakdown of the accuracy grades for these lines is given in Fig. 1.



Fig.1. Statistical distribution by data accuracy grades for the 576 absorption lines:  $\blacksquare$  grade  $\ge A$ : accuracy  $\le 3\%$ ;  $\blacksquare A >$  grade  $\ge B$ : 3% < accuracy  $\le 10\%$ ;  $\blacksquare B >$  grade  $\ge$ C: 10% < accuracy  $\le 5\%$ ;  $\blacksquare C >$  grade  $\ge D$ : 25% <accuracy  $\le 50\%$ ;  $\blacksquare D >$  grade  $\ge E$ : accuracy > 50%.

*Key words: atomic data, absorption lines, oscillator strenghts, interstellar medium, quasars* 

- F.H. Cashman, V.P. Kulkarni, R. Kisielius, G.J. Ferland, P. Bogdanovich, ApJS, 230, 8 (2017)
- 2] C.D. Morton, D. C. 2003, ApJS, **149**, 205, (2003)
- [3] A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, NIST ASD Team, NIST Atomic Spectra Database, ver. 5.4 (Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology, 2016)

# Netaisyklingosios nykštukinės galaktikos Leo A senoji žvaigždžių populiacija

# The Old Stellar Population of the Dwarf Irregular Galaxy Leo A

<u>Alina Leščinskaitė</u><sup>1</sup>, Rima Stonkutė<sup>1,2</sup>, Vladas Vansevičius<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius <sup>2</sup>Vilniaus universiteto Astronomijos observatorija, Čiurlionio 29, LT-03100, Vilnius lescinskaitealina@gmail.com

Galaktikų formavimasis ir evoliucija yra viena aktualiausių problemų šiuolaikinėje astrofizikoje. Pagal šiuo metu priimtiniausią kosmologinį modelį numatomas hierarchinis galaktikų formavimasis – mažos pirminės struktūros sąveikaudamos ir susiliedamos suformavo masyvias galaktikas. Galaktikų sąveika bei susiliejimai ir šiandien yra dažnas reiškinys. Vietinėje galaktikų grupėje aptinkamos kelios dešimtys nykštukinių galaktikų, kurios didžiųjų galaktikų ardomos ar kitaip veikiamos, o dalis jų galiausiai "suvalgomos" [1]. Dėl šios priežasties manoma, jog tik izoliuotos nykštukinės galaktikos gali būti pirminių, kosmologinių modelių numatomų, struktūrų atitikmuo, o detalūs jų tyrimai gali padėti suprasti masyvių galaktikų formavimosi ir evoliucijos procesus.

Šiame darbe atliktas netaisyklingosios nykštukinės galaktikos Leo A tyrimas. Tai maža, izoliuota Vietinės grupės galaktika, nerodanti sąveikos su kitais objektais požymių. Darbo tikslas – ištirti jos struktūrą ir nustatyti senosios žvaigždžių populiacijos savybių priklausomybę nuo jų padėties galaktikoje.

Leo A yra santykinai artimas mūsų Galaktikai objektas ir danguje užima pakankamai didelį plotą, todėl į stebimą galaktikos lauką patenka ir daug foninių objektų – Paukščių Tako žvaigždžių bei tolimų (pagal išvaizdą neatskiriamų nuo žvaigždžių) galaktikų. Atliekant matavimus, tokie objektai paprastai yra įtraukiami į stebimo lauko bendrąjį žvaigždžių fotometrijos katalogą [2], todėl tiriant Leo A galaktikos struktūrą (ypač išorines jos sritis, kur galaktikos žvaigždžių paviršinis tankis yra labai mažas) foniniai objektai gali stipriai iškreipti rezultatus.

Siekiant pašalinti iš katalogo Leo A galaktikai nepriklausančius objektus, atlikta interaktyvi objektų (V < 24) nuotraukų ir jų fotometrinių parametrų analizė. Jos metu aptikti 1692 nežvaigždiniai objektai. Paukščių Tako žvaigždžių pašalinimui iš katalogo sukurtas naujas metodas, besiremiantis statistine žvaigždžių analize spalvosryškio diagramose.

Atliekant iš išvalyto žvaigždžių fotometrijos katalogo atrinktų raudonųjų milžinių sekos žvaigždžių (senoji populiacija) analizę, nustatyta, jog Leo A galaktika turi išplitusį žvaigždinį diską (1 pav.), kuris tęsiasi daug toliau (>10') nei ankstesniais tyrimais [3] nustatyta (naudojant nevalytą katalogą [2]) riba – 8'.

Tiriant senosios populiacijos žvaigždžių paviršinio tankio kitimą išorinėse Leo A galaktikos srityse, aptikta, jog šis nėra tolygus – stebimas perteklinis, palyginus su reguliariu azimutiniu pasiskirstymu elipsiniuose žieduose, žvaigždžių tankio padidėjimas išilgai didžiosios ašies.

Izochronų priderinimo metodu įvertinus senųjų

žvaigždžių amžių, nustatyta, jog priešingose galaktikos pusėse jų amžius gali skirtis daugiau nei  $\sim$ 1 mlrd. m.



**1 pav.** Leo A galaktikos paviršinio raudonųjų milžinių sekos žvaigždžių tankio radialinis profilis. Simboliai žymi paviršinį žvaigždžių tankį elipsinės (didysis pusašis – *a*) formos žieduose (raudonais trikampiais pažymėti nevalyto katalogo duomenys, juodais apskritimais – išvalyto). Galimas radialinio žvaigždžių tankio profilio neapibrėžtumas įvertintas darant prielaidą, kad natūralios žvaigždžių skaičiaus fliuktuacijos atitinka Puasono skirstinį:  $\sigma_i = \pm \sqrt{N_i}$ , čia  $N_i$  – žvaigždžių skaičius *i*-ajame žiede.

Reikšminiai žodžiai: spalvos-ryškio diagrama, nykštukinės galaktikos, Leo A

- [1] McConnachie, A. W. 2012, AJ, 144, 4
- [2] Stonkuté, R., Arimoto, N., Hasegawa, T., Narbutis, D., Tamura, N., Vansevičius, V. 2014, ApJ Suppl. Ser., 214, 19
- [3] Vansevičius, V., Arimoto, N., Hasegawa, T., Ikuta, C., Jablonka, P., Narbutis, D., Ohta, K., Stonkutė, R., Tamura, N., Vansevičius, V., Yamada, Y. 2004, ApJ, 611, L93

# Padrikasis žvaigždžių spiečius NGC 6939: cheminės sudėties tyrimas

## **Open stellar cluster NGC 6939: chemical composition study**

Renata Minkevičiūtė<sup>1</sup>, Gražina Tautvaišienė<sup>1</sup>, Ilya Ilyin<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>Potsdamo Astrofizikos institutas, An der Sternwarte 16, 14482 Potsdamas, Vokietija

renata.minkeviciute@tfai.vu.lt

Žvaigždžių padrikuosiuose spiečiuose tyrimai turi nemažai pranašumų, lyginant su atskirų objektų analize. Jų savybes galima nustatyti didesniu tikslumu nei lauko žvaigždėms, kadangi spiečių žvaigždės yra vienalytė grupė, nutolusi tuo pačiu atstumu ir susidariusi iš to paties tarpžvaigždinio debesies, taigi yra panašios cheminės sudėties. Padrikieji spiečiai yra labai įvairaus amžiaus ir įvairiai išsidėstę Galaktikos diske. Be to savo sudėtyje jie turi skirtingų evoliucijos stadijų žvaigždžių, o tai dar vienas privalumas norint tirti ir suprasti, kaip vykstant žvaigždžių evoliucijai, kinta jų atmosferų cheminė sudėtis. Dėl visų šių paminėtų ypatybių padrikieji spiečiai yra labai svarbūs ir Galaktikos disko cheminės evoliucijos tyrimuose.

Norint studijuoti Galaktikos formavimąsi ir jos cheminę evoliuciją reikia suprasti, kaip vyksta žvaigždžių nukleosintezė. Alfa elementai, *s*- ir *r*-procesų elementai yra sintetinami skirtingose aplinkose ir per skirtingą laiko tarpą. CNO elementai yra labai svarbūs tiriant energijos pernešimo ir medžiagos maišymosi procesus žvaigždžių viduje.

Savo darbe mes ištyrėme 8 evoliucionavusias padrikojo spiečiaus NGC 6939 žvaigždes, nustatėme jų atmosferų pagrindinius fizikinius parametrus bei daugiau nei 20 cheminių elementų gausas ir <sup>12</sup>C/<sup>13</sup>C santykį.

NGC 6939 yra gana tankus, vidutinio amžiaus padrikasis spiečius, matomas Cefėjo žvaigždyne. Jo koordinatės: RA(2000) =  $20^{h}31^{m}32^{s}$ , Dec.(2000) =  $+60^{\circ}39.0$ . Spiečius yra arti Galaktikos plokštumos (l =  $95.88^{\circ}$ ,  $b = 12.30^{\circ}$ ). Šis spiečius jau buvo ne kartą tirtas tiek fotometriškai, tiek spektroskopiškai, tačiau išsami cheminė analizė jam atlikta pirmą kartą šiame darbe. 1 pav. matome spiečiaus spalvos–ryškio diagramą su pažymėtomis tiriamomis žvaigždėmis.

Vidutinės skiriamosios gebos (R  $\approx$  30 000) spektrai buvo gauti Šiaurės šalių optiniu teleskopu ir ešeliniu spektrografu SOFIN. Spektrai apima bangų ruožą nuo 450 iki 875 nm. Signalo-triukšmo santykis kinta nuo 31 iki 118. CCD vaizdų redukcija buvo atlikta programiniu paketu 4A [1].

Žvaigždžių spektrai buvo analizuojami naudojant klasikinį diferencialinės analizės metodą. Cheminių elementų gausos buvo skaičiuojamos naudojant programinius paketus EQWIDTH ir BSYN. Efektinė temperatūra, gravitacijos pagreitis, mikroturbulencijos greitis ir metalingumas – pagrindiniai fizikiniai atmosferų parametrai – buvo nustatyti naudojant spektroskopinius metodus, paremtus sužadinimo– jonizacijos pusiausvyros principais. Darbe naudojome vienadimensinius hidrostatinius MARCS modelius [2]. Ekvivalentinių spektro linijų pločių metodu nustatėme Mg, Al, Si, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Co, Ni gausas. O, C, N, Y, Zr, Ba, La, Ce, Pr, Nd, Sm ir Eu gausos buvo nustatytos naudojantis sintetinių spektrų metodu [3].

Šiame darbe nustatytas vidutinis spiečiaus metalingumas [Fe/H]=-0,19, žvaigždžių efektinė temperatūra  $T_{\text{eff}}$  siekia nuo 4200 iki 5000 K, gravitacijos pagreičio logaritmas log g – nuo 1,5 iki 3,2. Deguonies, alfa, *s*- ir *r*-procesų elementų gausos yra šiek tiek padidėjusios, lyginant su šių elementų gausomis Saulėje. Šiuo metu atliekama gilesnė rezultatų analizė ir rengiama mokslinė publikacija.

Darbas iš dalies yra finansuojamas Lietuvos Mokslo tarybos (projekto Nr.: MIP-082/2015).



1 pav. Padrikojo spiečiaus NGC 6939 spalvos–ryškio diagrama. Darbe tirtos žvaigždės yra pažymėtos juodais skrituliukais.

Reikšminiai žodžiai: Galaktikos padrikasis spiečius, žvaigždžių cheminė sudėtis.

- [1] I.V. Ilyin, *High resolution SOFIN CCD échelle spectroscopy*, (Ph.D. dissertation, Univ. Oulu, Finland, 2000)
- [2] B. Gustafsson, B. Edvardsson, K. Eriksson, et al., Astronomy & Astrophysics, 486, 951 (2008).
- [3] A. Drazdauskas, G. Tautvaišienė, R. Smiljanic, et al., Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 462, 1 (2016).

# Netaisyklingosios nykštukinės galaktikos Leo A žvaigždžių 2-D pasiskirstymas

# 2-D Distribution of Stars in the Dwarf Irregular Galaxy Leo A

Rokas Naujalis<sup>1</sup>, Dmitrij Semionov<sup>1</sup>, Rima Stonkutė<sup>1,2</sup>, Vladas Vansevičius<sup>1,2</sup> <sup>1</sup> Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius <sup>2</sup> Vilniaus universiteto Astronomijos observatorija, Čiurlionio 29, LT-03100, Vilnius <u>rokas.naujalis@ftmc.lt</u>

Pagal šiuo metu vyraujančią kosmologinę paradigmą didžiosios galaktikos, tokios kaip Paukščių Takas, formavosi sąveikaujant ir jungiantis nykštukinėms galaktikoms. Netaisyklingoji nykštukinė galaktika Leo A yra izoliuota ir, manoma, neturėjo stiprių sąveikų su kitomis galaktikomis. Todėl ji turėtų gerai atitikti tuos pirminius objektus, iš kurių ir susiformavo didžiosios galaktikos.

Šiame darbe buvo nustatyti Leo A struktūriniai parametrai: centro koordinatės, elipsiškumas, didžiosios ašies pozicinis kampas ir galaktikos radialinis šviesio profilis. Šiam tikslui panaudotos Subaru teleskopu gautos nuotraukos (1 pav.), kurios apima visą Leo A galaktiką ir igalina atlikti detalius jos struktūros tyrimus.

Leo A pastaruosius kelis šimtus mln. metų vyko neaktyvi žvaigždėdara, todėl negausios jaunos (<300 mln. m.) masyvios (>5  $M_{\odot}$ ) žvaigždės galaktikoje yra pasiskirstę stochastiškai ir trukdo patikimai nustatyti tikruosius galaktikos parametrus. Tačiau senesnės (>1 mlrd. m.) žvaigždžių populiacijos jau yra daugiau relaksavusios, todėl geriau tinka galaktikos struktūrinių parametrų nustatymui.

Iš Subaru stebėjimų katalogo [1] buvo atrinktos raudonųjų milžinių sekos žvaigždės, atitinkančios senesnes nei 1 mlrd. metų žvaigždžių populiacijas. Pagal jų erdvinį pasiskirstymą *iraf.ellipse* programa [2] nustatytos Leo A centro koordinatės: R.A. (2000)  $09^{h} 59^{m} 24,5^{s}$ , Decl. (2000)  $+30^{\circ} 44' 47''$ ; mažosios ir didžiosios ašių santykis – 0,600 ± 0,015; didžiosios ašies pozicinis kampas – 114,6° ± 0,7°.

Fiksavus šiuos parametrus ir nuotraukose uždengus foninius objektus (ryškias Paukščių Tako žvaigždes ir galaktikas) buvo išmatuoti radialiniai paviršinio šviesio profiliai. Individualūs profiliai išmatuoti dvylikoje azimutinių segmentų (1 pav. jie išskirti raudonomis tiesėmis). Apskaičiavus jų medianą buvo nustatyti integraliniai paviršinio šviesio profiliai (2 pav., mėlyni ir raudoni simboliai). Prie integralinių profilių priderinti (iki vertikalios brūkšninės linijos) teoriniai Sersic modeliai (ištisinės linijos):

$$\mu \sim \mu_0 \exp\left(-\left(\frac{r}{r_e}\right)^{1/n} - 1\right)$$

čia  $\mu_0$  – centrinis paviršinis ryškis,  $r_e$  – efektinis spindulys.

Centrinis paviršinis galaktikos ryškis *B* ir *V* fotometrinėse juostose yra atitinkamai 24,53 ir 23,98 mag/arcsec<sup>2</sup>. Abiem atvejais efektinis spindulys lygus ~0,5 arcmin, o laipsnio rodiklis,  $n \sim 1,2$ , yra artimas

eksponentinio profilio atvejui, n = 1. Tai rodo, kad galaktika yra diskinė.



**1 pav.** Leo A galaktikos V fotometrinės juostos nuotrauka.
 Parodytos matavimo elipsės, jų didžiojo pusašio ilgis lanko minutėmis (arcmin) nurodytas legendoje.





Reikšminiai žodžiai: nykštukinė galaktika, Leo A.

#### Literatūra

 [1] Stonkutė, R., Arimoto, N., Hasegawa, T., ir kt. 2014, ApJ Suppl. Ser., 214, 19

[2] Jedrzejewski, R. I. 1987, MNRAS, 226, 747

# Daugianarės žvaigždės Paukščių Tako Galaktikoje

# **Binary stars in the Milky Way Galaxy**

Edita Stonkute<sup>1</sup>, Ross P. Church<sup>2</sup>, Sofia Feltzing<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilnius University, Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Saulėtekio av. 3, LT-10222 Vilnius, Lithuania <sup>2</sup> Lund Observatory, Department of Astronomy and Theoretical Physics, Box 43, SE-22100 Lund, Sweden

edita.stonkute@tfai.vu.lt

Stellar multiplicity is a key parameter for many astrophysical questions. Several interesting astronomical phenomena, such as gravitational waves or gamma-ray bursts, arise from binary stars, and the knowledge of multiplicity could provide constraints on possible channels of star formation and evolution in the Milky Way galaxy [1]. For ongoing and coming large spectroscopic surveys, such as RAVE, SEGUE, LAMOST, Gaia-ESO, GALAH and 4MOST, it is important to identify the binaries to clean the survey products from potentially faulty results.

All stars are formed in binary or multiple systems and the minority of single stars might be result from the decay of multiple systems. Binary star surveys suggest that the frequency of multiple systems is in the range of about 22 % to 80 %, where the binary fraction is higher for more massive stars [2]. Raghavan et al. (2010) work suggest that  $54\% \pm 2\%$  of solar-type (~F6–K3) stars in the solar neighborhood are single [3]. However, little is known about the binary frequency in Milky Way field stars, particularly outside the solar neighborhood.

We present our models of the effect of binaries on high-resolution spectroscopic surveys, in order to determine how many binaries will be observed, whether unresolved binaries will contaminate measurements of chemical abundances, and how we can use spectroscopic surveys to better constrain the population of binaries in the Galaxy.

Binary and single star evolution is performed by the rapid binary-star evolution (BSE) algorithm [4].

As an application we make mock APOGEE observations of red giants and subgiants. Our stars selection function mimics the selection function of APOGEE [5]. APOGEE is a high-resolution (R ~ 22 500), high signal-to-noise (S/N ~ 100/pixel) infrared (1.51–1.70 microns) spectroscopic survey targeting 146000 stars and enabling the determination of precise (~100 m/s) radial velocities as well as stellar parameters and elemental abundances.

In Fig 1. we see that the variation of RV scatter with log(g) and  $T_{eff}$  are similar in the model (a, b) and observations (c, d), suggesting that binaries are the cause of large RV scatter in APOGEE observations. We see a trend of decreasing velocity scatter with decreasing temperature (more evolved stars) in both the model and observations. Giants are on average in larger binary orbits than the early-type stars so the orbital periods are longer and consequently the RV scatter lower.



Fig. 1. Velocity scatter versus main atmospheric parameters  $T_{eff Primary}$  and  $log(g)_{Primary}$  from model shown in panels (a), (b) and in panels (c), (d) we show the same parameters form APOGEE observations.

We intend to investigate to what extent we can constrain the frequency of binaries, and whether we can detect any systematic variation with metallicity the Milky Way galaxy. The detailed results will be presented in Stonkute, Church & Feltzing 2017 (in prep.).

Key words: binary stars, Galaxy evolution, large spectroscopic surveys.

- [1] S. Dall'Osso et al., The Astrophysical Journal, 798, 10 (2015).
- [2] G. Duchēne, A. Kraus, ARA&A, 51, 269 (2013).
- [3] D. Raghavan, et al., ApJS, **190**, 1 (2010)
- [4] J. R. Hurley, C. A Tout., O. R. Pols, MNRAS, 329, 897 (2002).
- [5] G. Zasowski, et al., AJ, **146**, 81 (2013)

## Grimus-Neufeld modelio neutrino sektoriaus pernormavimas

## **Renormalization of the neutrino sector of Grimus-Neufeld model**

<u>Vytautas Dūdėnas</u>, Thomas Gajdosik Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 010222 Vilnius vytautasdudenas@inbox.lt

One of the challenges of contemporary particle physics is to explain the origin of the non-zero neutrino masses. Despite the fact that the first clear evidence of non-vanishing neutrino masses has been seen almost 20 years ago [1], there is still no final explanation for it. Numerous models have been proposed to accommodate this missing piece in the puzzle. For a review of some most popular ones, see [2]. One of the most straightforward ways to make a model that includes massive neutrinos is to take the Standard Model and extend it by the so called seesaw mechanism [3, 4]. In the seesaw mechanism, one postulates additional heavy neutral fermions that interact with the neutrinos of the Standard Model via the Higgs boson. After the electroweak symmetry breaking, the neutrinos acquire masses that are inversely proportional to the masses of the postulated additional fermions. So the seesaw mechanism not only explains the existence of the masses of neutrinos, but also the smallness of them, which is a highly desired feature for a model.

In the seesaw mechanism, the neutrinos couple to scalars of the theory. Hence, in the case of the Standard Model's scalar sector, they couple only to a single scalar particle - the Higgs boson. However, there is no evidence, that the scalar sector consists of only one Higgs boson. In fact, there are many theoretical motivations for an extended Higgs sector, such as grand unified theories or supersymmetric theories. The generic two Higgs doublet model is the extension in which there are two Higgs doublets instead of one. This model, paired with the seesaw mechanism, allows for yet another way of generating neutrino mass: via loop corrections. This means that the neutrino, which is massless at the zero order approximation, can acquire a mass radiatively, through the loops of the additional scalar particles. This set up, where both, the seesaw and radiative masses of neutrinos, are possible, is called Grimus-Neufeld model [5]. The minimal realization of this model is with one heavy fermion. This leads to one mass term for one light neutrino already at zero order approximation and a mass term for the second light neutrino only after the loop corrections are taken into account. One of the neutrinos still stays massless. However, the two non-zero masses are enough to explain experimentally observed neutrino oscillations, where only the mass differences enter.

Mass parameters of the neutrinos are defined in the renormalization procedure. The most commonly used scheme is the on-shell (OS) scheme, where the physical mass of the particle is defined as the real part of the pole of the propagator. However, it is shown that this scheme does not lead to a gauge invariant definition of the mass for unstable particles [6]. The solution to this problem is allowing the mass parameter to be complex and to coincide with the exact pole of the propagator. This definition of mass is proven to be gauge invariant at all orders [6]. The renormalization scheme using this definition of mass is called the complex mass scheme (CMS) [7, 8]. The propagators and the counterterms, however, can still stay gauge dependent.

We renormalize masses of the neutrinos of the Grimus-Neufeld model [5] at one loop level. We discuss the choices of OS and CMS renormalization schemes. By rearranging the loop corrections as proposed in [9], we define the mass counterterms to be gauge invariant and study the gauge invariance of the neutrino propagators.

*Keywords: seesaw neutrinos, loop corrections, two Higgs doublet model, renormalization, gauge invariance* 

- Y. Fukuda *et al.*, "Evidence for oscillation of atmospheric neutrinos," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 81, pp. 1562–1567, 1998.
- [2] G. Senjanovic, "Neutrino mass: From LHC to grand unification," *Riv. Nuovo Cim.*, vol. 34, pp. 1–68, 2011.
- [3] P. Minkowski, "μ → eγ at a Rate of One Out of 10<sup>9</sup> Muon Decays?," Phys. Lett., vol. B67, pp. 421–428, 1977.
- [4] R. N. Mohapatra and G. Senjanovic, "Neutrino Mass and Spontaneous Parity Violation," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 44, p. 912, 1980.
- [5] W. Grimus and H. Neufeld, "Radiative Neutrino Masses in an SU(2) X U(1) Model," *Nucl. Phys.*, vol. B325, pp. 18–32, 1989.
- [6] P. Gambino and P. A. Grassi, "The Nielsen identities of the SM and the definition of mass," *Phys. Rev.*, vol. D62, p. 076002, 2000.
- [7] A. Denner and S. Dittmaier, "The Complex-mass scheme for perturbative calculations with unstable particles," *Nucl. Phys. Proc. Suppl.*, vol. 160, pp. 22–26, 2006. [,22(2006)].
- [8] B. A. Kniehl and A. Sirlin, "Pole Mass, Width, and Propagators of Unstable Fermions," *Phys. Rev.*, vol. D77, p. 116012, 2008.
- [9] S. Liebler and W. Porod, "Electroweak corrections to Neutralino and Chargino decays into a W-boson in the (N)MSSM," *Nucl. Phys.*, vol. B849, pp. 213–249, 2011. [Erratum: Nucl. Phys.B856,125(2012)].

## Yukawa sąryšio konstantos su kilpos pataisomis Grimus-Neufeld modelyje

## The loop improved Yukawa couplings of the Grimus-Neufeld model

Thomas Gajdosik<sup>1</sup>, Andrius Juodagalvis<sup>2</sup>, Darius Jurčiukonis<sup>2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius <sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

tgajdosik@yahoo.com

The seesaw mechanism with as many heavy singlets as light neutrinos [1] or with loop generated masses [2] is taken as the usual explanation of the smallness of neutrino masses. W. Grimus and H. Neufeld connected both mechanisms [3] and proposed a model, where one neutrino gets the mass by the regular seesaw mechanism and a different neutrino gets its mass from radiative corrections stemming from the interaction with additional Higgs doublets. Its simplest implementation uses only one heavy fermionic singlet and only one additional Higgs doublet. We call this simplest implementation the Grimus-Neufeld model (GN-model).

The constraints between the neutrino sector and the two-Higgs-doublet sector of the GN-model come from the prediction of the mass of the second lightest neutrino by loop corrections that are dominated by the Higgs bosons in the loop, as was shown by W. Grimus and L. Lavoura [4].



Figure 1: Selfenergy Feynman diagrams contributing to the mass matrix of the light neutrinos: (a) with a scalar in the loop; (b) with a vector in the loop.

We parametrize the Yukawa coupling of the second Higgs doublet to the gauge singlet that drives the seesaw mechanism as

$$Y_N^{(2)} =: d\mathbf{V}_2 + d'\mathbf{V}_3 , \qquad (1)$$

where we choose the phase of complex 3-vector  $V_2$  in such a way, that *d* becomes real and positive [5]. With this Yukawa coupling we calculate the one loop corrected effective mass matrix as described in [4]. Comparing the resulting neutrino masses  $m_{\nu_i}$  with the measured mass squared differences of the neutrinos,  $\Delta m_{\text{atm}}^2$  and  $\Delta m_{\text{sol}}^2$ ,

$$\Delta m_{12}^2 = m_{\nu_2}^2 - m_{\nu_1}^2$$
 and  $\Delta m_{23}^2 = m_{\nu_3}^2 - m_{\nu_2}^2$ , (2)

taken from the evaluation of neutrino data [6], we can determine the parameter d as

$$d^{2} = \frac{v^{2}}{m_{D}^{2}} \frac{m_{\nu_{2}} m_{\nu_{3}}}{|f_{1}f_{3} + f_{2}^{2}|} .$$
 (3)

Here v is the vacuum expectation value.  $m_D^2$  parametrizes the Dirac mass term in the tree-level seesaw and we take it as a free parameter. The functions  $f_i$  come from the loop, figure 1. The modulus of  $d' = |d'|e^{i\phi'}$  is given by the solution to a fourth order equation. In order to find a real and positive solution, the values of the phase  $\phi'$  can be restricted.

In the loop functions  $f_i$  and the coefficients of the fourth order equation appear the masses and the mixing angles between the neutral Higgs bosons. Our parametrization of the Higgs sector follows the theoretical analysis of H. Haber and D. O'Neil [7]. We take the numerical evaluation of the restrictions on the Higgs masses from the thesis of A. Kunčinas [8].

With the values of the Yukawa couplings determined we find an effective loop induced mixing term between the light neutrinos, indicating that the neutrinos are not written in the mass eigenstates. Diagonalizing them again with a rotation matrix R we can relate the 3-vectors  $\mathbf{V}_i$  to the measured neutrino mixing matrix

$$V_{\text{PMNS}} = \{\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \mathbf{V}_3\} \cdot R \quad . \tag{4}$$

The predictive power of the model then lies in processes that use the second Yukawa coupling  $Y_N^{(2)}$ . Some of the analyses done with this model can be found in [9].

Reikšminiai žodžiai: neutrinos, seesaw mechanism, radiative masses

- J. Schechter and J. W. F. Valle, Phys. Rev. D 22 (1980) 2227. doi:10.1103/PhysRevD.22.2227
- [2] A. Zee, Phys. Lett. **93B** (1980) 389 Erratum: [Phys. Lett. **95B** (1980) 461]. doi:10.1016/0370-2693(80)90349-4, 10.1016/0370-2693(80)90193-8
- [3] W. Grimus and H. Neufeld, Nucl. Phys. B **325** (1989) 18.
- [4] W. Grimus and L. Lavoura, Phys. Lett. B 546 (2002) 86 [hepph/0207229].
- [5] T. Gajdosik, A. Juodagalvis, D. Jurčiukonis and T. Sabonis, Acta Phys. Polon. B 46 (2015) 11, 2323. doi:10.5506/APhysPolB.46.2323
- [6] D. V. Forero, M. Tortola and J. W. F. Valle, Phys. Rev. D 90 (2014) no.9, 093006 doi:10.1103/PhysRevD.90.093006 [arXiv:1405.7540 [hep-ph]].
- [7] H. E. Haber and D. O'Neil, Phys. Rev. D 83 (2011) 055017 [arXiv:1011.6188 [hep-ph]].
- [8] A. Kunčinas, Bachelor thesis, Vilnius University, Faculty of Physics. 2017.
- [9] 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].

# Radioaktyvių atliekų mažų energijų beta spektrometrija naudojant puslaidininkinius detektorius

# Application of semiconductor detectors for low energy beta spectrometry of radioactive waste

Jevgenij Garankin, Elena Lagzdina, Danielius Lingis, Artūras Plukis, Arūnas Gudelis, Andrius Garbaras Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius jevgenij.garankin@ftmc.lt

Dažniausiai bandiniai beta spektroskopijai specialiai paruošiami kaip skystų scintiliatorių tirpalai ar elektrolizės būdu paruoštos plokštelės. Tačiau šie procesai reikalauja daug laiko, o paviršiniais jonizuojančios spinduliuotės jutikliais paprastai negalima gauti elektronų spektrinės informacijos.

Šio darbo tikslas buvo sukurti metodiką skirtą didelio pusamžio radioaktyviems izotopams matuoti realiu laiku. Ši problema yra ypatingai aktuali uždarant RBMK tipo branduolinius reaktorius. Uždarant tokio tipo elektrines lieka didelis kiekis radioaktyvaus grafito, kuris yra užterštas ilgaamžiais radioaktyviais izotopais, vienas iš pagrindinių tokių izotopų yra 14C. Užterštumo matavimai reikalingi tam, kad išrūšiuoti atliekas pagal užterštumo lygi ir saugoti ar laidoti jas leidžiamose saugyklose pagal turimą informaciją [1]. Problemos, su kuriomis yra susiduriama norit įvertinti grafito užterštumą, yra nedestruktyvaus metodo nebuvimas, dėl mažos spinduliuojamų  $\beta$  dalelių energijos (E<sub>\betamax</sub>(<sup>14</sup>C) =156.5 keV) dalelių siekis yra 100 um eilės ir jos neišlekia iš kieto bandinio vidaus. Todėl matuojant kietą bandinį imanoma ivertinti tik paviršini aktyvumą. Norint išmatuoti <sup>14</sup>C kiekį bandinio tūryje reikia kietą grafitą paversti dujiniu, pagrindinis būdas yra pavertimas CO<sub>2</sub> dujomis.

Pristatomo metodo esmė yra <sup>14</sup>C įvertinimas naudojant puslaidininkinius detektorius. Metodika leidžia realiu laiku užfiksuoti radioaktyvių nuklidų buvimą dujose ir tuo pačiu išmatuoti tų nuklidų spinduliuojamus energijos spektrus, taip juos charakterizuojant.

Šiame darbe parodomos mažo aktyvumo ir mažos energijos  $\beta$  spinduliuojančių bandinių tyrimo galimybės naudojant minėtąją metodiką. Eksperimentiniai matavimai buvo palyginti su skaitinio modeliavimo rezultatais. Modeliai ruošti naudojant MCNP6 fotonų, elektronų, neutronų, Monte Karlo pernašos kodą.

Tyrimo metu buvo sukonstruota detektoriaus pratekančių dujų kamera, detektavimui pasirinkti PIPS [2] tipo detektoriai. Matavimo galimybėms nustatyti buvo naudojami <sup>14</sup>C, <sup>137</sup>Cs, <sup>99</sup>Tc kietos ir dujų fazės bandiniai. Dujiniai bandiniai buvo ruošiami deginant radioaktyvų grafitą specialioje deginimo kameroje. Dujos iš kameros patekdavo tiesiai į detektoriau kamerą, kurioje detektoriai registravo spinduliuotę. Impulsai iš detektoriaus registruojami ir analizuojami kompiuteryje.

Rezultatai parodė, kad pasirinkta metodika leidžia registruoti mažos energijos ir mažo aktyvumo  $\beta$  šaltinius, tokius kaip CO<sub>2</sub> dujos su <sup>14</sup>C izotopu.



1 pav. Beta spektrai išmatuoti PIPS detektoriumi. Matavimo metu naudotas kietas <sup>14</sup>C šaltinis skirtingais nuotoliais nuo detektoriaus.



2 pav. Beta spektras užregistruotas naudojant PIPS detektorių ir pratekančių dujų kamerą

Reikšminiai žodžiai: beta spinduliuotė, puslaidininkinis detektorius, Monte Karlo modeliavimas.

- V. Remeikis, A. Plukis, A. Juodis, Nucl. Eng. Des. 239, 813-818 (2009)
- [2] A. Courti, F. Goutelard, P. Burger, E. Blotin, Appl. Rad. And isotopes. 53, 101-108 (2000).

# Priemaišų identifikavimas HfO<sub>2</sub> dangoje naudojant jungtinį PIXE-RBS metodą

# Detection of impurities in HfO<sub>2</sub> coating with combination of PIXE-RBS

<u>M. Gaspariūnas</u>, V. Kovalevskij, A. Plukis, K. Juškevičius, R. Buzelis, R. Drazdys, V. Remeikis Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius <u>mindaugas.gaspariunas@ftmc.lt</u>

Reaktyviuoju magnetroninio dulkinimo būdu  $O_2$ atmosferoje Ar dujomis formuojamos dangos kokybei įtakos turi ne tik dulkinimui naudojamo taikinio švarumas. Žinoma, kad dangoje lieka Ar priemaišų, be to ant dulkinimo kameros paviršių gali nusėsti medžiagos, kuri tolesnių sesijų metu gali turėti įtakos dangos kokybei.

Paprastai optinės dangos kokybė vertinama naudojant efektyviosios terpės aproksimacijos modelius [1], kuriais sunku įvertinti priemaišų dangoje įtaką. Aišku, kad pagaminama reikiamų parametrų (lūžio rodiklio ar kt.) danga, tačiau priemaišos gali nulemti pvz. dangos atsparumą lazerinei spinduliuotei.

Taikant jonų analizės metodus galima įvertinti dangų sluoksnių stechiometriją ir priemaišų koncentraciją sluoksniuose ir taip papildyti optinius analizės metodus [2, 3]. Išsiaiškinus priemaišų nusėdimo dangoje mechanizmus galbūt galima pakeisti formavimo parametrus taip, kad suformuotos reikiamos struktūros dangos priemaišų koncentracija būtų minimali.

Jungtinės PIXE ir RBS analizės eksperimentui naudotų protonų siekis dangoje ~25  $\mu$ m, jonizuojanti dalelė sustoja bandinio padėkle. Eksperimento metu į bandinius implantuota ~3x10<sup>12</sup> protonų. Duomenys apdoroti DataFurnace jonų analizės kodu.



1 pav. Užregistruota bandinio sp25 rentgeno išeiga, kai danga apšvitinama 1530 keV energijos protonų pluošteliu. Juodi taškai – eksperimentiniai duomenys, raudona linija – aproksimacija.

Vertinant reaktyviuoju magnetroninio dulkinimo būdu  $O_2$  atmosferoje Ar dujomis suformuotas  $HfO_2$ dangas pasikliauti vien efektyviosios terpės aproksimacijos modeliais negalima: optiniais metodais nustatytą sandarą gali atitikti kitokia sluoksnių stechiometrija.



2 pav. Užregistruotas atgal 135° kampu išsklaidytų protonų energinis spektras, kai bandinys apšvitinamas 1530 keV energijos protonų pluošteliu.

-	1 . 1.	<b>T</b> . • •	•	1	1
	lantala	lun otinoo	10011	00011700	#OZULLOTO1
L	iemeie	mighnes	1()	ananzes	техниата
-	10110010.	o angunos	10110	ananzoo	10Dunuuu

	sp25		sp30	
Sluoksnis	1 2		1	2
$t (1e^{15}at/cm^2)$	2352	206386.3	2350	183454.5
t (nm)	302.2	25901.3	302.9	23023.4
$r(1e^{22}at/cm^3)$	7.8	8.0	7.8	8.0
Zr	1.1	0.0	1.1	0.0
0	65.6	66.7	65.4	66.7
Ar	1.6	0.0	1.9	0.0
Hf	31.7	0.0	31.6	0.0
Si	0.0	33.3	0.0	33.3

2 lentelė. Nustatytos bandinio sudėties PIXE ir RBS išeigų palyginimas



Reikšminiai žodžiai: RBS, PIXE, optinės dangos

- T.Tolenis, M.Gaspariunas, A.Melninkaitis, M.Lelis, R.Buzelis, A.Plukis, Lithuanian Journal of Physics, Vol.54, No. 2, pp. 99–105 (2014).
- [2] H.R. Verma, Atomic and Nuclear Analytical Methods (Springer, Berlin, 2007).
- [3] C.Jeynes, N.P.Barradas, P.K. Marriott, G. Boudreault, M.Jenkin, E.Wendler and R.P.Webb, Elemental thin film depth profiles by ion beam analysis using simulated annealing – a new tool, J. Phys. D: Appl. Phys. 36 (2003) R97–R126.

# Leptonų aromatų apsikeitimas Higso bozono skilimuose dviejų Higso dubletų ir sūpuoklių modelyje

# Lepton flavour changing Higgs boson decays in a two-Higgs-doublet seesaw model

Darius Jurčiukonis<sup>1</sup> and Luís Lavoura<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius <sup>2</sup> Universidade de Lisboa, Instituto Superior Técnico, CFTP, 1049-001 Lisboa, Portugal

 $\underline{darius.jurciukonis} @tfai.vu.lt \\$ 

From the experimental observation of neutrino oscillations, lepton flavor violation (LFV) in the neutrino sector has been observed. However, that violation has not yet been observed in the chargedlepton sector and it is not quite certain where it is most likely to be observed first. After discovery of Higgs boson it is pertinent to ask if there could be a connection or mixing between the Higgs sector and the mechanism responsible for the nonconservation of lepton number, and to find out whether some remnant effect could show up in Higgs decays, which may be detectable at present or future colliders. We are interested in studying the decays of the Higgs boson  $H \to \ell_1 \ell_2$  as a possible signal of LFV. The CMS and ATLAS Collaborations have reported current upper limits on the branching ratios of the Higgs decay to two leptons [1, 2]. The second run of the LHC, at a center of mass energy  $\sqrt{s} = 13$  TeV will provide an important probe of flavour changing couplings of the Higgs boson.

We consider a two-Higgs-doublet extension of the Standard Model (SM), with three right-handed neutrino singlets and the seesaw mechanism. Is assumed that the lepton flavours are conserved in the Yukawa couplings and broken only in the Majorana mass terms of the right-handed neutrinos; this assumption is field-theoretically consistent because those mass terms have dimension three while the Yukawa couplings have dimension four. Therefore all the Yukawa coupling matrices are lepton flavour-diagonal and LFV originates solely in the non-flavour-diagonal Majorana mass matrix of the right-handed neutrinos [3].

We compute the process  $H(\bar{p}_1 + p_2) \rightarrow \ell_1(\bar{p}_1) \ell_2(p_2)$ . Here, H is supposed to be the observed neutral scalar with mass  $m_H \approx 125 \text{ GeV}$ . In a two-Higgs-doublet model in the Higgs basis,

$$\Phi_{1} = \begin{pmatrix} G^{+} \\ \left( v + X_{1} + iG^{0} \right) / \sqrt{2} \end{pmatrix},$$
  
$$\Phi_{2} = \begin{pmatrix} C^{+} \\ \left( X_{2} + iX_{3} \right) / \sqrt{2} \end{pmatrix}, \qquad (1)$$

where  $v \approx 246 \text{ GeV}$  is real and  $X_{1,2,3}$  (and  $G^0$ ) are real fields. The field  $G^+ \equiv S_1^+$  is the charged Goldstone boson;  $C^+ \equiv S_2^+$  is a physical charged scalar with mass  $m_C$ . The amplitude is of the form

$$T = \overline{u}_{\mu} \left( p_2 \right) \left( l \gamma_L + r \gamma_R \right) v_{\tau} \left( \overline{p}_1 \right), \qquad (2)$$

where T has mass dimension while l and r are dimensionless. Therefore, summing over the spins of the final fermions  $\ell_1$  and  $\ell_2$ ,

$$|T|^{2} = \left(m_{H}^{2} - m_{\ell_{1}} - m_{\ell_{2}}\right) \left(|l|^{2} + |r|^{2}\right) - 4m_{\ell_{1}}m_{\ell_{2}} \Re(lr^{*}).$$
(3)

The partial decay width is

$$\Gamma_{\text{partial}} = |T|^2 \, \frac{\sqrt{\lambda \, (m_H, m_{\ell_1}, m_{\ell_2})}}{16\pi m_H^3}, \qquad (4)$$

where  $\lambda(x, y, z)$ .

There are four diagrams generating  $l = \sum_{i=1}^{4} l_i$ and  $r = \sum_{i=1}^{4} r_i$ . The first two are self-energy diagrams. The third amplitude arises from diagrams in which the external H couples to gauge bosons and/or charged scalars. In the fourth amplitude, Hcouples to two (either distinct or identical) neutrinos; the other intermediate particle may be either  $W^{\pm}/G^{\pm}$  or  $C^{\pm}$ .

We have computed the branching ratios of the Higgs decay in to two charged leptons in the case of a two-Higgs-doublet model assuming that the observed particle with mass 125 GeV is 90% equal to the Higgs of the SM and has a 10% contribution from a second Higgs doublet. Also, we have employed several simplifying assumptions in order to reduce the parameter space of the model and demonstrate that is possible to find a region in the parameter space where the branching ratios are close to their experimental limits.

Reikšminiai žodžiai: flavour violation, Higgs boson decay, two-Higgs-doublet, seesaw mechanism

- V. Khachatryan et al., Search for Lepton-Flavour-Violating Decays of the Higgs Boson, Phys. Lett, B 749, 337–362, (2015). [arXiv:hep-ex/1502.07400].
- [2] G. Aad et al., Search for lepton-flavour-violating H → μτ decays of the Higgs boson with the ATLAS detector, JHEP, vol. 11, p. 211, (2015). [arXiv:hep-ex/1508.03372].
- [3] W. Grimus and L. Lavoura, Soft lepton-flavor violation in a multi-Higgs-doublet seesaw model, Phys. Rev. D 66 (2002) 014016 [hep-ph/0204070].

# Se<sup>2+</sup> jono dviguba jonizacija elektronu

# Electron-impact double ionization of $Se^{2+}$

Jurgita Koncevičiūtė, Sigitas Kučas, Šarūnas Masys, Aušra Kynienė, Valdas Jonauskas Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius konceviciutej@gmail.com

Vienelektronė ir daugiaelektronė atomų ir jonų jonizacija elektronais yra vieni iš pagrindinių procesų, kurie suteikia žinių apie atominių sistemų struktūrą ir dinamiką. Aplinkose, kuriose vyrauja didelės energijos elektronai, itin svarbus yra dvigubos jonizacijos procesas, kurio įtaka jonų pasiskirstymui pagal jonizacijos laipsnius yra didžiausia, lyginant su kitais daugiaelektronės jonizacijos procesais.

Dviguba jonizacija elektronais gali vykti keliais būdais. Netiesioginio proceso atveju du atomo arba jono elektronai išlaisvinami viengubos vidinio sluoksnio jonizacijos bei po jos vykstančios autojonizacijos metu. Tiesioginio proceso metu atomui arba jonui sąveikaujant su krentančiu elektronu du elektronai pašalinami iš karto. Pastaruoju atveju tenka nagrinėti keturių sąveikaujančių kūnų uždavinį. Tokiems uždaviniams spręsti taikomi įvairūs artiniai.

Selenas yra aptinkamas kosminiuose ūkuose bei tam tikrų tipų žvaigždėse, be to, jo vaidmuo reikšmingas modeliuojant branduolių sintezę, todėl šis elementas yra svarbus astrofizikiniuose tyrimuose.

 $Se^{2+}$  jono dviguba jonizacija elektronais anksčiau buvo tirta taikant pusiau reliatyvistinį konfigūracijų vidurkių iškraipytųjų bangų artinį [1]. Tačiau šiuo artiniu negautas geras sutapimas su eksperimentinėmis skerspjūvių vertėmis didesnių kritusio elektrono energijų atveju ir šio neatitikimo priežastys nėra žinomos.

Tiesioginės dvigubos jonizacijos elektronais atveju buvo parodyta, kad šią problemą nagrinėjant kaip kelių vienas po kito vykstančių procesų visumą gaunamas geras atitikimas su eksperimentų duomenimis [2]. Todėl šis artinys buvo pritaikytas ir tiriant  $Se^{2+}$  jono dvigubą jonizaciją elektronu.

 $Se^{2+}$  jono netiesioginės jonizacijos iš 3dsluoksnio (nustatyta, kad jonizacijos iš šio sluoksnio indėlis į netiesioginės dvigubos jonizacijos procesą yra didžiausias) skerspjūviai pateikti 1 pav. Iš šio paveikslo matyti, kad esant didesnėms kritusio elektrono energijoms suskaičiuotų skerspjūvių vertės yra didesnės, nei eksperimentinės  $Se^{2+}$  jono dvigubos jonizacijos skerspjūvių vertės.

Svarbu tai, kad po jonizacijos-jonizacijos proceso iš  $Se^{2+}$  jono 3d sluoksnio susidariusi  $Se^{4+}$  jono  $3d^94s4p^2$  konfigūracija gali suirti vykstant autojonizacijai, kadangi šios konfigūracijos energija yra didesnė nei trigubos jonizacijos slenkstis. Todėl į šį procesą būtina atsižvelgti vertinant dvigubos jonizacijos skerspjūvius.

Taikant vienas po kito vykstančių procesų artinį gauta trigubos jonizacijos skerspjūvių maksimali vertė

yra apie 2 kartus didesnė nei eksperimentinių skerspjūvių [3] maksimali vertė. Tačiau šiuose skaičiavimuose nebuvo atsižvelgta lygmenu, į susidariusių po pirmojo jonizacijos proceso, užpildas. Ankstesnių tyrimų metu buvo nustatyta, kad dvigubos jonizacijos elektronais skerspjūvių skaičiavimuose taikant kelių vienas po kito vykstančių procesų artini neatsižvelgus į lygmenų užpildas gaunamos ženkliai didesnės teorinės skerspjūvių vertės, lyginant su eksperimentinėmis vertėmis. Todėl tikėtina, kad tolesnių tyrimų metu įtraukus lygmenų užpildas bus gautas žymiai geresnis atitikimas su eksperimentinėmis skerspjūvių vertėmis. Tai padės tiksliau įvertinti tiek trigubos, tiek dvigubos jonizacijos skerspjūvius.



1 pav.  $Se^{2+}$  jono netiesioginės dvigubos jonizacijos elektronu iš 3d sluoksnio skerspjūviai. Juoda linija - $Se^{2+}$  jono netiesioginės jonizacijos iš 3d sluoksnio skerspjūviai; taškai su paklaidų ribomis –  $Se^{2+}$  jono dvigubos jonizacijos elektronais eksperimento

duomenys [3].

Reikšminiai žodžiai: jonizacija elektronu, tiesioginė dviguba jonizacija, netiesioginė dviguba jonizacija, autojonizacija

- [1] M. S. Pindzola, S. D. Loch. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 49, 125202 (2016)
- [2] V. Jonauskas, A. Prancikevičius, Š. Masys ir A. Kynienė, Phys. Rev. A 89, 052714 (2014).
- [3] G. A. Alnawashi, N. B. Aryal, K. K. Baral, C. M. Thomas ir R. A. Phaneuf, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 47, 135203 (2014).

## Branduolinio reaktoriaus konstrukcijų aktyvacijos skaitinio modeliavimo optimizavimas

# Optimization the numerical modelling of activation of nuclear reactor constructions

<u>Artūras Plukis</u>, Vytenis Barkauskas, Darius Germanas, Rita Plukienė, Laurynas Juodis, Vidmantas Remeikis Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius arturas.plukis@ftmc.lt

Nuklidinės sudėties evoliucija reaktoriuje lemia visa eilė neutronu srauto saveikos su medžiaga reiškinių. Vykstantiems procesams aprašyti norimu reaktoriaus darbo momentu reikia analizuoti kelių tūkstančių nuklidų virsmus vienu metu. Neutronų srautui reaktoriuje modeliuoti skirti deterministiniai (WIMS, HELIOS, NEWT) arba euristiniai (Monte Karlo -MCNP, MORSE) metodai, kurie pakankamu tikslumu leidžia įvertinti naudoto branduolinio kuro (NBK) sudėtį bei medžiagų aktyvaciją reaktoriaus aktyviojoje zonoje. Tačiau tiek vieni tiek kiti metodai turi apribojimu norint įvertinti tolimesnių reaktoriaus sričių konstrukcinių medžiagų aktyvaciją. Monte Karlo metodus apriboja skaičiavimo laikas, nes statistiškai sekamų daleliu įvykiai parenkami atsitiktinai pagal sąveikos tikimybes, atžvelgiant į fizikinius bei tikimybinius procesus vykstančius medžiagoje. Deterministiniai metodai yra nepalyginamai greitesni - jie pagal suvidurkintą visos dalelių populiacijos elgseną sprendžia Boltzmanno lygtį todėl negali tiksliai aprašyti toli nuo neutronų šaltinio vykstančių procesų.

Siekiant optimizuoti branduolinio rektoriaus konstrukcijų aktyvacijos modelį buvo pasitelkta tiek MCNP6 [1] programa tiek SCALE6.2 [2] programu paketas, kurie leidžia pakankamai tiksliai ir salyginai greitai medžiagų aktyvacijos gauti rezultatus pasirinktose reaktoriaus konstrukcijose. SCALE 6.2 yra pranašesnė už MCNP6 skaičiavimo laiko požiūriu, tačiau MCNP6 turi platesnės galimybės neutronų sklaidai reaktoriaus konstrukcijoje modeliuoti.

Reprezentatyvaus neutronų srauto reaktoriaus konstrukcijose nustatymui naudojant MCNP, iteraciju apskaičiuojamas kiekvienos būdu nagrinėjamos konstrukcijos ar konstrukciju grupės neutronu svarbos koeficientas, kuris leidžia išlyginti gaunamo neutronu srauto tikslumą per visą modeliuojamą reaktorius sritį (pvz. gali būti įskaitomos metalinės, betoninės konstrukcijos ar biologinė apsauga). Priklausomai nuo analizuojamos sistemos parenkamas atitinkamai išplėstas reaktoriaus 3D modelis: aktyviajai zonai pakanka 4x4 kuro gardelių sistemos pakankamai tiksliai ivertinti neutronų srautus centrinėje dalyje (kadangi beveik 100 kartų mažesnis modelis leidžia eile sutrumpinti skaičiavimo laika neprarandant tikslumo), tolimesniems objektams aprašyti reikia ketvirčio arba pilno trimačio reaktoriaus modelio. Iš tiesų pilno reaktoriaus modelyje gaunamas neutronų srautas yra didesnis dėl mažesnio neutronų daugėjimo koeficiento  $(k_{\rm eff})$  reikšmės, didesnis neutronų srautas kompensuoja neutronų nuotėkį per šoninius reflektorius.

Apskaičiavus visus neutronų srautus reikiamose

konstrukcijose atitinkamoms neutronų grupėms (naudojama ENDF/B-VII.1 sąveikos bibliotekų SCALE6 suskirstymas į 252 grupes) pereinama prie kito etapo: neutronų srautų perkėlimo deterministiniams SCALE6 paketo kodams tolesniems skaičiavimams.

SCALE6 paketo COUPLE programa pagal apskaičiuotą neutronų srautą naudojant daugelio (252) sąveikos skerspjūvius grupių neutrony ivertina makroskopinius neutronų sąveikos skerspjūvius  $\Sigma$ medžiagoje. Toliau gali būti sudaromos vienos energijos grupės skerspjūvių bibliotekos skirtos SCALE6 paketo ORIGEN-S programai. Šiuo būdu pakanka kelių sekundžių procesoriaus laiko sumodeliuoti medžiagų evoliuciją pasirinktoje reaktoriaus konstrukcijoje. Svarbus vaidmuo taip pat tenka pakankamai tiksliems duomenims apie reaktoriaus ir jo aplinkos komponentų medžiaginei sudėčiai aprašyti, nes nuo priemaišų sudėties tikslumo labai priklauso gaunamų aktyvacijos rezultatų patikimumas.



1 pav. Neutronų srauto energinis pasiskirstymas RBMK tipo reaktoriaus konstrukcijose.

Reikšminiai žodžiai: radioaktyviosios atliekos, neutronų aktyvacija, MCNP6, SCALE6, ORIGEN-ARP modeliavimas.

- Goorley, et al., Initial MCNP6 Release Overview, Nuclear Technology, 180, pp. 298-315 (2012)
- [2] B.T. Rearden and M.A. Jessee, Eds., SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.1, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee (2016).

## P-izoelektronės sekos energijos spektro ir radiacinių šuolių teorinis tyrimas

## Theoretical study of energy spectra and radiative transitions of P-like ions

Pavel Rynkun<sup>1</sup>, Gediminas Gaigalas<sup>1</sup>, Per Jönsson<sup>2</sup>, Kai Wang<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, LT-10222 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Materials Science and Applied Mathematics, Malmö University, SE-205 06 Malmö, Sweden

pavel.rynkun@tfai.vu.lt

Accurate atomic data for (highly) ionized atoms are needed in astrophysics and plasma physics. Iron group elements are important in the study of astrophysical plasmas, as many of their emission lines are frequently observed from different ionization stages. These observations provide a wealth of data about the plasma characteristics, such as temperature, density, and chemical composition. Atomic data, including energy levels and transition data, are required for many ions.

In this work energy spectrum calculations were performed for 147 even states of the  $3s3p^4$ ,  $3s^23p^23d$ ,  $3p^43d$ ,  $3s3p^23d^2$  configurations and for 124 odd states of the  $3s^23p^3$ ,  $3p^5$ ,  $3s3p^43d$ ,  $3s^23p3d^2$  configurations in Co XIII - Zn XVI ions. The calculations are in progress and some other ions of P-isoelectronic sequence will be studied. In the abstract the part of energy spectra of Plike Co ion is presented. Energy levels are compared with data from NIST and other theoretical computations when it is available. All calculations were performed using the general relativistic atomic structure package GRASP2K [1].

The calculation was done using multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) approximation [2]. As a final step, a relativistic configuration interaction (RCI) calculation was performed to include the transversephoton (Breit) interaction describing the transversely polarized photon contribution to the electron-electron interactions in the Coulomb gauge, the vacuum polarization (VP), and the self-energy (SE) corrections.

In the present work, the atomic state functions (ASFs) were obtained as expansions over jj-coupled CSFs. To provide the LSJ labeling system the ASFs were transformed from a jj-coupled CSF basis into an LSJ-coupled CSF basis using the method provided by Gaigalas *et al.* [3].

In the Table 1 energy levels of this work are compared with data from NIST, theoretical computations performed by Vilkas and Ishikawa [4] who used relativistic multireference Moller-Plesset (MR-MP) perturbation theory and Fritzsche *et al.* [5] who used multiconfiguration Dirac-Fock approach. In the NIST database for P-like Co ion just 31 energy levels are given. Vilkas and Ishikawa [4] calculated the energy levels of  $3s^23p^3$ ,  $3s3p^4$ ,  $3s^23p^23d$  and  $3s3p^33d$  configurations, whereas Fritzsche *et al.* [5] have studied  $3s^23p^3$ ,  $3s3p^4$ ,  $3s^23p^23d$  configurations.

As it seen from the Table 1 there is good agreement between present work, MR-MP calculations and NIST. The mean energy differences for presented energy levels in Table 1 comparing with NIST are 0.11% for this work, 0.03% for [4], and 1.32% for [5]. There are some disagreements in the identifications of the levels comparing with this work: level  $3s^2 3p^2({}_2^3P) {}^3P 3d {}^2P_{1/2}$  in NIST and in Vilkas paper [4] was identified as  $3s3p^4 {}^2P_{1/2}$ . And level  $3s^2 3p^2({}_2^1D) {}^1D 3d {}^2F_{7/2}$  in Vilkas column have  ${}^4D_{7/2}$  identification.

Table 1. Energy levels in  $\text{cm}^{-1}$  from RCI calculations for P-like Co ion. Energies are compared with NIST, and theoretical results from Vilkas *et al.* [4] and from Fritzsche *et al.* [5].

State	RCI	NIST	[4]	[5]
$3s^2 3p^3 ({}^4_3S)  {}^4S^o_{3/2}$	0	0	0	0
$3s^2 3p^3({}^2_3D) {}^2D_{3/2}^{o}$	43742	43650	43630	45284
$3s^2 3p^3({}^2_3D) {}^2D_{5/2}^{o'}$	49725	49690	49657	51225
$3s^2 3p^3 ({}^2_1P) {}^2P^o_{1/2}$	79706	79460	79507	81491
$3s^2 3p^3({}^{\bar{2}}_1P) {}^2P^{o'}_{3/2}$	88215	88170	88192	89980
$3s^{2}S 3p^{4}({}^{3}_{2}P) {}^{4}P_{5/2}$	295145	295160	295037	295717
$3s^{2}S 3p^{4}({}^{3}_{2}P) {}^{4}P_{3/2}$	307093	307030	306917	307475
$3s^{2}S 3p^{4}({}^{3}_{2}P) {}^{4}P_{1/2}$	312376	312110	312000	312564
$3s^{2}S 3p^{4}(\frac{1}{2}D)^{2}D_{3/2}$	365933	365530	365493	367592
$3s^{2}S 3p^{4}(\frac{1}{2}D)^{2}D_{5/2}$	368496	368250	368161	370221
$3s^{2}S 3p^{4}({}^{3}_{2}P)^{2}P_{3/2}$	419100	418480	418519	421348
$3s^2 3p^2 ({}^3_2\tilde{P}) {}^3P 3d {}^2P_{1/2}$	423852	423290	423250	426855
$3s^{2}S 3p^{4}(_{0}^{1}S)^{2}S_{1/2}$	443092		442206	446179
$3s^2 3p^2 ({}^3_2P) {}^3P 3d {}^4F_{3/2}$	457680		456371	458742
$3s^2 3p^2 (\frac{3}{2}P) {}^3P 3d {}^4F_{5/2}$	462393		461086	463389
$3s^2 3p^2 ({}^3_2P) {}^3P 3d {}^4F_{7/2}$	469198		468017	470240
$3s^2 3p^2 (\frac{1}{2}D) {}^1D 3d {}^2F_{5/2}$	475172		474008	476754
$3s^2 3p^2 ({}^{5}_{2}P) {}^{3}P 3d {}^{4}F_{9/2}$	477485		476358	
$3s^2 3p^2 (\frac{1}{2}D) {}^1D 3d {}^2F_{7/2}$	480425		479395	481939
$3s^2 3p^2 (\frac{3}{2}P) {}^3P 3d {}^4D_{1/2}$	480678		479765	482164

Keywords: energy spectra, transition data, multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock method, relativistic configuration interaction method.

- P. Jönsson, G. Gaigalas, J. Bieroń, C. Froese Fischer, and I.P. Grant, Computer Physics Communications 184, 2197 (2013).
- [2] C. Froese Fischer, M. Godefroid, T. Brage, P. Jönsson, G. Gaigalas, J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. 49, 182004 (2016).
- [3] G. Gaigalas, C. Froese Fischer, P. Rynkun, P. Jönsson, Atoms 5, 6 (2017).
- [4] M. J Vilkas and Y. Ishikawa, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 3, 4763 (2004).
- [5] S. Fritzsche, C. Froese Fischer, and B. Fricke, At. Data and Nucl. Data Tables 68, 149 (1998).

## Sunkiųjų barionų M1 šuolių pločių skaičiavimas

# Calculation of M1 decay widths of heavy baryons

Vytautas Šimonis

# Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius vytautas.simonis@tfai.vu.lt

Šiuo metu eksperimentatoriai jau yra stebėję beveik visus pagrindinių būsenų barionus, turinčius vieną sunkųjį (*c*- ar *b*-) kvarką. Tikimasi, kad netolimoje ateityje pavyks atrasti ir barionus, turinčius keletą tokių kvarkų. Tad nieko nuostabaus, kad ir teoriniam šių dalelių savybių tyrimui skiriamas tam tikras dėmesys.

Viena iš svarbių hadronų charakteristikų yra jų elektromagnetinių šuolių pločiai. Šio darbo tikslas buvo sunkiųjų barionų magnetinių dipolinių (M1) šuolių pločių teorinis įvertinimas. Naudodami modifikuotą maišų modelį mes suskaičiavome visų pagrindinių būsenų sunkiųjų barionų magnetinių dipolinių šuolių momentus. Kad galėtume lyginti su eksperimentiniais duomenimis šie dydžiai dar turi būti pakoreguoti atsižvelgiant į pataisas dėl masių centro judėjimo. Tam naudojome ta pačia procedūra, kaip ir ankstesniame darbe, kur buvo nagrinėjamos mezonų magnetinės savybės [1]. Esminis skirtumas nuo iprasto metodo yra tas, kad koreguojami atskiru kvarku, o ne viso hadrono, šuolių momentai. Tik taip įmanoma pasiekti gerą suskaičiuotų dydžių sutapimą su eksperimentiniais dydžiai duomenimis. Pakoreguoti naudojami skaičiuojant M1 šuolių pločius remiantis išraiška

$$T = 8 \alpha \mu^2 k^3 / (2J+1)$$

Ι

kur  $\alpha$  – smulkiosios struktūros konstanta,  $\mu$  - šuolio momentas, k - fotono energija skylančio bariono atskaitos sistemoje, *J*- šio bariono sukinys.

Siekiant kiek imanoma sumažinti galimas paklaidas, skaičiuojant fotono energijas tais atvejais, kai barionų masės yra žinomos, tikslinga naudoti eksperimentines barionų masių vertes. Kitais atvejais tenka remtis teoriniais įverčiais. Sunkiųjų barionų atveju čia situacija nėra labai gera. Skaičiavimai remiantis pirminiais principais (QCD ant keturmatės gardelės) gali pasitarnauti kaip naudingas orientyras, tačiau praktiškai, dėl vis dar gana didelių statistinių bei sisteminių paklaidų, nėra labai naudingi. Rezultatai gaunami naudojant įvairius modelius gana skiriasi tarpusavyje, o ir sutapimas su eksperimentu (barionų su vienu sunkiu kvarku atveju) toli gražu nėra pakankamai geras. Barionų, turinčių keletą sunkių kvarkų, atveju mūsų skaičiavimams konkrečios jų masės nėra labai reikalingos – pilnai pakanka masių skirtumų, atsirandančių dėl kvarkų "hipersmulkiosios" (sukiniosukinio tipo) saveikos. Siekdami ivertinti šiuos barionu masiu skirtumus mes pasinaudojome iprastais kvarku modelio saryšiais. Remdamiesi prielaida, kad konkrečiame modelyje gaunamų rezultatų nesutapimą su eksperimentu sąlygoja kvarkų tarpusavio sąveikos energijos netikslus įvertinimas, kaip pradinius duomenis paėmėme rezultatus gautus viename iš pakankamai

stabiliu modeliu (potencialinis modelis AL1 [2,3]) ir pernormavome juos taip, kad gaunami barionų su vienu sunkiu kvarku masiu skirtumai sutaptu **S**11 eksperimentiniais. Vis dėlto, kvarkų b- ir c- tarpusavio sąveikos ivertinimui eksperimentinių duomenu nepakanka, tad teko remtis, kaip patikimiausiais, QCD skaičiavimais ant gardelės [4]. Pasirinkome barionus  $\Omega_{cbb}^{*}$ ,  $\Omega_{cbb}^{-}$ . Kadangi QCD ant gardelės, kaip taisyklė, pervertina "hipersmulkiosios" sąveikos sąlygotus barionų masių skirtumus, paėmėme mažiausią paklaidų ribose galimą jų masių skirtumo vertę ir prilyginome ją eksperimentinei.

Dalis gautų darbe rezultatų pateikta lentelėje, kur jie palyginti su kituose modeliuose (potencialiniame [3] bei reliatyvistiniame kvarkų modelyje [5]) gautais M1 šuolių pločių įverčiais. Kaip matome, išskyrus keletą atvejų, rezultatai gaunami trijuose skirtinguose modeliuose yra gana panašūs.

l lentelė. I	3arionų su	dviem	sunkiais I	kvarkais
nagnetini	ı dipoliniy	šuolių	pločiai Γ	(Kev).

		PM[3]	RQM[5]
$\Xi_{cc}^{*++} \rightarrow \Xi_{cc}^{++}$	2,79		23,46
$\Xi_{cc}^{*+} \rightarrow \Xi_{cc}^{+}$	2,17		28,79
$\Omega_{cc}^{*+} \rightarrow \Omega_{cc}^{+}$	1,60		2,11
$\Xi_{cb}^{*+} \rightarrow \Xi_{cb}^{++}$	1,306	0,739	0.46
$\Xi_{cb}^{*+} \rightarrow \Xi_{cb}^{*+}$	0,0293	0,0605	0,0015
$\Xi^{*}_{cb}^{+} \rightarrow \Xi_{cb}^{+}$	0,161	0,124	0,14
$\Xi_{cb}^{*0} \rightarrow \Xi_{cb}^{0}$	0,876	1,03	0,51
$\Xi_{cb}^{*0} \rightarrow \Xi_{cb}^{0}$	7,6×10 <sup>-5</sup>	0,0012	2×10-6
$\Xi_{cb}^{0} \rightarrow \Xi_{cb}^{0}$	0,204	0,209	0,31
$\Omega_{cb}^{*0} \rightarrow \Omega_{cb}^{0}$	0,637	0,502	0,29
$\Omega_{cb}^{*0} \rightarrow \Omega_{cb}^{0}$	1,3×10 <sup>-5</sup>	0,0031	1×10 <sup>-6</sup>
$\Omega_{cb}^{0} \rightarrow \Omega_{cb}^{0}$	0,170	0,0852	0,21
$\Xi_{bb}^{*0} \rightarrow \Xi_{bb}^{0}$	0.137		0,31
$\Xi_{bb}^{*} \rightarrow \Xi_{bb}^{-}$	0.0268		0,059
$\Omega_{bb}^* \rightarrow \Omega_{bb}^-$	0.0148		0,0226

Reikšminiai žodžiai: sunkieji barionai, magnetiniai dipoliniai (M1) šuoliai, maišų modelis.

- [1] V. Šimonis, Eur. Phys. J. A 52, 90 (2016).
- [2] C. Albertus, J.E. Amaro, E. Hernández and J. Nieves, Nucl.Phys. A740, 333 (2004).
- [3] C. Albertus, E. Hernández, and J. Nieves, Phys. Lett. B 690, 265 (2010).
- [4] Z.S. Brown, W. Detmold, S. Meinel, and K. Orginos, Phys. Rev. D 90, 094507 (2014).
- [5] T. Branz, A. Faessler, T. Gutsche, M. A. Ivanov, J.G. Körner, V. E. Lyubovitskij, and B. Oexl, Phys. Rev. D 81, 114036 (2010).
# Kilminių koeficientų skaičiavimas šešių kūnų sistemoms naudojant transliaciškai invariantinę bazę

# Calculation of coefficients of fractional parentage for six body systems in translationally invariant basis

<u>Augustinas Stepšys</u><sup>1</sup>, Saulius Mickevičius<sup>2</sup>, Darius Germanas<sup>3</sup>, Ramutis Kazys Kalinauskas<sup>3</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius <sup>2</sup>Vytauto Didžiojo universitetas, K. Donelaičio 58, LT-44248, Kaunas, Lithuania <sup>3</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius <u>augustinas.stepsys@ff.vu.lt</u>

Ab-initio metodai užtikrina branduolio fizikos uždavinių sprendimą naudojant tik minimalias aproksimacijas. Tiek ab-initio metodų vystymasis, tiek šiuolaikiniai skaičiavimo pajėgumai leidžia aprašyti vis sudėtingesnes sistemas, bei sužinoti daugiau apie branduolių struktūrą, egzotiškus branduolius [1, 2] ir jame veikiančias jėgas [3, 4]. Tačiau sistemų sudėtingumas reikalauja naujų metodų paieškų, leidžiančių pilnai išnaudoti šiuolaikinius superkompiuterius.

Norint sukonstruoti branduolinės sistemos banginę funkciją yra būtina užtikrinti jos antisimetriškumą ir panaikinti masių centro judėjimą. Masių centro judėjimas gali būti lengvai eliminuotas banginę funkciją užrašius naudojant santykinių (Jakobi) koordinačių sistemą. Jakobi koordinačių panaudojimas leidžia sistemą antisimetrizuoti naudojant kilminių koeficientų formalizmą, išvengiant Sleiterio determinantų skaičiavimo ir nebereikia papildomai eliminuoti taip vadinamų "melagingų būsenų" (spurious states). Ši metodika leidžia ženkliai sumažinti matricų dimensijas ir suprastinti banginės funkcijos konstravimo procedūrą.

Kilminių koeficientų skaičiavimas šešių kūnų sistemoms gali būti paremtas simetrinės grupės S(6) perstatymo operatorių (pavyzdžiui  $P_{14}$ ) atvaizdais Jakobi koordinatėse. Tokiu atveju yra patogu šešių kūnų sistemą aprašyti naudojant binarinių klasterių modelį. Šiame modelyje šešių kūnų sistemą galima aprašyti kaip sudarytą iš dviejų trijų dalelių klasterių, kurie savo ruožtu turi savo vidinę sandarą (1 pav.) Trijų kūnų klasteriai taip pat turi būti antisimetrizuoti pasinaudojant analogišku kilminių koeficientų skaičiavimu trijų kūnų sistemoms pasinaudojant grupės S(3) perstatymo operatoriais (pvz. ,  $P_{13}, P_{46})$ [5].

Kilminių koeficientų radimas yra paremtas neredukuotinais grupės atvaizdais, charakterizuojamais Jungo schemomis, kurias ženklina žinomos tikrinės vertės. Trijų kūnų sistemoms gaunami neredukuotiniai atvaizdai yra charakterizuojami Jungo schema [1<sup>3</sup>] (atitinka pilnai antisimetrinį poerdvį), bei [21] (atitinka dalinės antisimetrijos neredukuotinį poerdvį). Pasirinkus pilnai antisimetrinius poerdvius trijų kūnų klasteriuose galimos Jungo schemos šešiems kūnams yra [1<sup>6</sup>], [21<sup>4</sup>], [2<sup>2</sup>1<sup>2</sup>], [2<sup>3</sup>], kurias atitinka tikrinės vertės -1, -1/3, 1/9, 1/3. Pilnai antisimetrinį poerdvį atitinka Jungo schema [1<sup>6</sup>], iš kurios tikrinių vektorių galima pasigaminti reikiamus kilminius koeficientus. Tuomet šešių kūnų sistema gali būti charakterizuojama gerais kvantiniais skaičiais: harmoninio osciliatoriaus sužadinimo energija E, pilnu judesio kiekio momentu J, lyginumu  $\pi$ , izosukiniu T ir papildomu kvantiniu skaičiumi  $\Delta$ , skirtu antisimetrinių būsenų numeracijai.

Konferencijoje pristatoma metodika kilminių koeficientų skaičiavimui šešių kūnų sistemai transliaciškai invariantinėje bazėje.

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



1 pav. Jakobi medis šešių kūnų sistemai su binariniais trijų dalelių klasteriais.

Reikšminiai žodžiai: branduolio fizika, matematinė fizika, ab-initio skaičiavimai

- [1] C. Romero-Redondo et al. Phys. Rev. Lett 117 222501(2016)
- [2] C. Ji et al, Phys Rev. C 90 044004 (2014)
- [3] G. Hupin,S. Quaglioni, P. Navratil, Phys. Rev. Lett.114 212502 (2015)
- [4] S. Binder et al, Phys. Rev. C 93 044002 (2016)
- [5] S. Mickevičius, D. Germanas, R. K. Kalinauskas, Cent. Eur. J. Phys. 11 (2013), 568.

#### Elektronais sužadinto Ba atomo autojonizacijos skerspjūvis

# Autoionization cross section of Ba atoms excited by electron impact

Alicija Kupliauskienė<sup>1</sup>, Vladimir Borovik<sup>2</sup>, Ivan Shafranyosh<sup>2</sup> and Oleksandr Borovik<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania <sup>2</sup>Uzhgorod National University, Uzhgorod, 88000, Ukraine

<sup>3</sup>Institute of Electron Physics, 88017 Uzhgorod, Ukraine alicija.kupliauskiene@tfai.vu.lt, baa1948@gmail.com

The electron decay of autoionizing states is in fact an indirect ionization process which can result in essential enhancement of the ionization cross section of atoms. Such autoionization contribution reaches 30-40% of the total ionization cross section in heavy atoms with outer p<sup>6</sup> subshell [1, 2]. The direct measurements of this contribution (autoionization cross section) are known only for alkali atoms (see [3] and references therein).

In the present work we report the first data on the autoionization cross section of barium atoms. It was obtained as a sum of normalized intensities of lines observed in ejected-electron spectra arising from the decay of the  $5p^5n_1l_1n_2l_2n_3l_3$  *LSJ* autoionizing states. The spectra were measured at the 'magic' angle of 54.7° for the incident electron energies from the lowest autoionization threshold at 15.61 eV up to 600 eV. The measurements were performed by using the apparatus described in detail elsewhere [4]. The obtained relative data were put on the absolute scale by normalizing the excitation function of the 5d6s<sup>2</sup> <sup>3</sup>D<sub>1</sub> state to the calculated cross section [4] at 600 eV. The summary relative error did not exceed 30%.

Figure 1 shows the autoionization cross section  $\sigma_{aut}$  of barium atoms in an impact energy range 10-600 eV. As can be seen, the dominant features of the cross section are the strong near-threshold maximum containing structures (*a*), (*b*) and a broad maximum around 100 eV. The cross section reaches the maximum value  $6.7 \times 10^{-16}$  cm<sup>2</sup> at 17.4 eV (feature *a*).

The position of the near-threshold maximum coincides with an energy region where the  $5p^5n_1l_1n_2l_2n_3l_3$  *LSJ* autoionizing states are known in barium atoms (see bars on top of figure 1). As follows from the spectroscopic classification of these states [4] and from the analysis of their excitation dynamics [5], the feature (*a*) is formed by the resonances present in electron impact excitation of the states from 5d6s<sup>2</sup> and 5d<sup>2</sup>6s configurations lying between 15.6 and 17.5 eV.

The origin of feature (*b*) is due to the resonance excitation of two group of states from autoionizing configurations  $6s^26p$ ,  $5d^26s$  and 5d6s7s,  $5d^26p$ , 6d, 7d lying between 17.8 and 21.8 eV. The dominance of the near-threshold maximum points out that the strong resonance excitation is a common feature both for dipole-allowed and dipole-forbidden AIS in barium.

The behavior of the cross section  $\sigma_{aut}$  around 100 eV and at higher impact energies reflects the total contribution from dipole-allowed AIS. Note, however,

that due to strong mixing and correlation effects in  $5p^6$  excitation of barium atoms [4, 6] dipole-forbidden AIS ( $J\neq 1$ ) also participate in formation of the autoionization cross section above 100 eV impact energy.

The calculations of electron-impact ionization and excitation-autoionization cross sections for 6s<sup>2</sup> and 5p<sup>6</sup> shells will be our next steps in further analysis of the autoionization cross section of barium atoms.



**Figure 1.** The 5p<sup>6</sup> autoionization cross section of Ba atoms excited by electron impact. The solid line is used to show the resonance features (*a*) and (*b*) at low impact energies. Bars on top mark the location of the  $5p^5n_ll_n2l_2n_3l_3$  LSJ autoionizing states.

*Keywords: experiment, atomic theory, autoionization, electron-impact excitation cross sections.* 

#### References

- [1]K.J. Nygaard, Phys. Rev. A 11, 1475 (1975).
- [2]Y. Okuno, J. Phys. Soc. Japan 31, 1189 (1971).
- [3]A. Borovik, A. Kupliauskiene, O. Zatsarinny, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 46, 215201 (2013).
- [4]V. Hrytsko, G. Kerevicius, A Kupliauskienė,
  - A Borovik, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 49, 145201 (2016).
- [5] J. Phys. B, to be published.
- [6] J. Nienhaus, O. I. Zatsarinny, W. Mehlhorn, Phys. Essays 13, 307 (2000).

# Ba atomų $5p^5n_1l_1n_2l_2n_3l_3$ *LSJ* būsenų sužadinimo elektronais funkcijos

# The electron-impact excitation functions of the $5p^5n_1l_1n_2l_2n_3l_3$ LSJ states in Ba atom

Alicija Kupliauskienė<sup>1</sup>, Vladimir Borovik<sup>2</sup>, Ivan Shafranyosh<sup>2</sup> and Oleksandr Borovik<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Uzhgorod National University, Uzhgorod, 88000, Ukraine

<sup>3</sup>Institute of Electron Physics, 88017 Uzhgorod, Ukraine

alicija.kupliauskiene@tfai.vu.lt, baa1948@gmail.com

we have performed the detailed Recently spectroscopic classification of the  $5p^5n_1l_1n_2l_2n_3l_3$  LSJ autoionizing states (AIS) in barium by measuring the ejected-electron spectra in a broad electron-impact energy range and by calculating their excitation cross section, energies and decay rates [1]. The electron spectra were measured at incident and ejected-electron energy resolutions of 0.2 eV and 0.07 eV, respectively. The calculations of the cross sections were performed in distorted wave approximation by using relativistic radial wavefunctions obtained in the standard Dirac-Fock-Slater method. The Flexible Atomic Code [2] and quantum numbers jjJ of the relativistic coupling scheme of angular momenta were used. Transformation from the *jjJ* to *LSJ* coupling scheme of angular momenta was performed by using the computer program [3]. A number of configurations used in the superposition to take into acount correlation effects both in the initial and final states was 10198.

In the present work, the obtained in [1] set of data on intensities of ejected-electron lines was used to obtain the electron-impact excitation cross sections for a number of the states from different autoionizing configurations.

In figure 1, the experimental cross sections for the  $5d6s^2 {}^{3}P_1$ ,  $5d^2({}^{3}P)({}^{4}P)6s {}^{3}P_1$  and  $5d({}^{3}P)6s({}^{2}P)7s {}^{3}P_1$  dipole-allowed AIS are compared with calculated ones in an impact energy range from excitation thresholds up to 600 eV. Although the reliability of the present calculations is not large at low impact energies, nevertheless they also confirm the observed strong resonance excitation of all states considered in the present study.

Comparing the cross sections shows that the ratio between resonance and potential scattering varies noticeably along the 5p<sup>6</sup> energy level spectrum. As can be seen, the resonance excitation is the dominant process for 5d6s<sup>2</sup> <sup>3</sup>P<sub>1</sub> state at 15.81 eV, which is the lowest dipole-allowed 5p6-core excited AIS in Ba atoms. With increasing the excitation energy of the states the efficiency of potential excitation increases and becomes stronger for the states lying in the middle of the  $5p^6$  spectrum (see in figure 1 the cross section for 5d<sup>2</sup>(<sup>3</sup>P)(<sup>4</sup>P)6s <sup>3</sup>P<sub>1</sub> state) and dominant for the high-lying states (5d(<sup>3</sup>P)6s(<sup>2</sup>P)7s <sup>3</sup>P<sub>1</sub>). Since mixing and correlation effects play a major role in 5p-core electron-impact excited Ba atoms and are especially strong for high-lying states, the observed regularity is quite unexpected. Our preliminary data on the excitation cross sections for dipole-forbidden AIS  $(J \neq 1)$  from similar configurations show that the resonance excitation dominates for all states regardless of their excitation energy.



**Figure 1**. Ejected-electron excitation functions for the  $5p^5n_1l_1n_2l_2n_3l_3$  *LSJ* autoionizing states in barium. Solid curves represent the present calculations.

*Keywords: atomic theory, experiment, energy levels, electron-impact excitation.* 

#### References

[1]V. Hrytsko, G. Kerevicius, A Kupliauskienė,

A Borovik, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 49, 145201 (2016).

[2] M. F. Gu, Can. J. Phys. **86**, 675 (2008).

[3] O. Zatsarinny (private communication).

# Sr atomo sužadinto 4p<sup>6</sup> sluoksnio būsenų spektroskopinė klasifikacija

# Spectroscopic classification of the 4p<sup>6</sup> shell excited states in Sr atoms

Alicija Kupliauskienė<sup>1</sup>, Vladimir Borovik<sup>2</sup>, Ivan Shafranyosh<sup>2</sup> and Oleksandr Borovik<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Uzhgorod National University, Uzhgorod, 88000, Ukraine

<sup>3</sup>Institute of Electron Physics, 88017 Uzhgorod, Ukraine

alicija.kupliauskiene@tfai.vu.lt, baa1948@gmail.com

The electron excitation and radiationless decay of the  $4p^5n_1l_1n_2l_2n_3l_3$  *LSJ* states in Sr atoms have been the subject of many experimental and theoretical investigations (see e.g. [1-3] and references therein). However, poor energy resolution of the measurements, limited energy region understudy and the lack of systematic calculations resulted in a situation when only six lowest states from  $4p^54d5s^2$  configuration were associated with the lines observed in photoabsorption [2] and ejected-electron spectra [1].

In the present work, basing on experimental studies of the intensity behavior of ejected-electron spectra in a broad electron impact-energy range and on *ab initio* calculations of energies, decay rates and excitation cross sections of the  $4p^5n_1l_1n_2l_2n_3l_3$  *LSJ* states by employing the standard software package Flexible Atomic Code (FAC) [4], the lines in ejected-electron spectra [1] and the most intense lines in photoabsorption spectra [2, 5] were classified/re-classified as attributed to the excitation and subsequent radiationless multichannel decay of 99 atomic states predominantly from  $4p^55s^2nl$ ,  $4p^54d^2nl$  and  $4p^54d5snl$  configurations.

The experiments were performed using an electron spectrometer with an incident electron energy resolution of 0.2 eV [3]. The ejected-electron spectra were obtained at an observation angle of  $54.7^{\circ}$  and at impact energies starting from the appearance of the first spectral line up to 102 eV. Unlike previous studies, we investigated the entire ejected-electron energy region 12-21 eV where the lines arising from the decay of atomic AIS can be observed. The uncertainty of the line energies was determined at  $\pm 0.05$  eV.

The calculations of energies, autoionization probabilities, oscillator strengths of electric dipole transitions, and electron impact excitation cross sections were performed in the basis of mixed relativistic configurations by using FAC computer code [4]. The radial orbitals for the construction of basis state wave functions were derived from a modified self-consistent Dirac-Fock-Slater iteration. The total number of both odd and even states included in calculations was 29824.

In table 1 the excitation thresholds  $E_{\text{exc}}$ , spectroscopic classification and decay channels for eleven lowest AIS  $4p^5n_1l_1n_2l_2n_3l_3 LSJ$  in Sr are presented. The excitation energy of the  $4d5s^2 {}^{3}P_0$  lowest AIS at 20.98  $\pm$  0.05 eV determines the excitation threshold of the  $4p^6$  subshell in strontium atom.

Table 1. Excitation un	esholus Lexc,	Classifi	cation a	uiu
decay channels of the $4$	$p^{5}n_{1}l_{1}n_{2}l_{2}n_{3}l_{3}$	LSJ lov	vest AIS	in
Sr atoms.				

classification and

**Table 1** Excitation thresholds E

$E_{\rm exc} ({\rm eV})$		Configuration	Decay
		LSJ	channel
Exp.	Theor.		
20.98	20.961	$4d5s^{2}P_{0}$	5s <sub>1/2</sub>
21.12	21.134	$4d5s^{2}P_{1}$	5s <sub>1/2</sub>
21.38	21.432	$4d5s^{2}P_{2}$	5s <sub>1/2</sub>
21.62	21.685	$4d5s^{2}F_{4}$	5s <sub>1/2</sub>
			4d <sub>5/2</sub>
			5p <sub>3/2</sub>
21.82	21.685	$4d5s^{2}F_{3}$	5s <sub>1/2</sub>
			4d <sub>3/2</sub>
			5p <sub>1/2</sub>
22.06	22.121	$4d5s^{2}F_{2}$	5s <sub>1/2</sub>
			4d <sub>3/2</sub>
			5p <sub>3/2</sub>
22.22	22.243	$5s^{2}5p^{3}P_{1}$	5s <sub>1/2</sub>
			5p <sub>3/2</sub>
22.35	22.364	$4d^{2}(^{3}P)(^{4}P)5s ^{5}P_{3}$	4d <sub>5/2</sub>
22.43	22.504	$4d5s^{2} {}^{3}D_{3}$	4d <sub>5/2</sub>
22.45	22.601	$5s^{2}5p^{3}D_{3}$	5s <sub>1/2</sub>
			4d <sub>5/2</sub>
			5p <sub>1/2</sub>
			5p <sub>3/2</sub>

*Keywords: electron-impact excitation, autoionizing state, decay channels.* 

#### References

- [1] M. D. White, D. Rassi, K. J. Ross, J. Phys. B 12, 315 (1979).
- [2] J. P. Connerade, M. A. Baig, M. Sweeney, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 23, 713 (1990).
- [3] A. Borovik, V. Vakula, A. Kupliauskienė, Lith. J. Phys. 47, 129 (2007).
- [4] M.F. Gu, Can. J. Phys. 86, 675 ( 2008).
- [5] M. W. D. Mansfield, G. H. Newsom, Proc. R. Soc. Lond. A 377, 431 (1981).

#### Išsklaidytų elektronų sužadinant Rb autojonizacines būsenas kampinis pasiskirstymas

# Angular distribution of scattered electrons in excitation of autoionizing states in Rb atoms

Alicija Kupliauskienė<sup>1</sup>, Viktorija Roman<sup>2</sup> and Oleksandr Borovik<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio Ave. 9, LT-10222 Vilnius, Lithuania <sup>2</sup>Department of Electron Processes, Institute of Electron Physics, 88017 Uzhgorod, Ukraine <u>alicija.kupliauskiene@tfai.vu.lt</u>

The ejected-electron and photoabsorption spectroscopies are powerful methods for the investigation of the autoionizing states of atoms [1, 2]. Concerning quasimetastable and metastable states, their direct observation in the excitation channel is enabled only by the energy-loss spectroscopy.

The main purpose of the present work was to calculate the angular distribution of scattered electrons from the excitation of the autoionizing states of Rb atom by electron-impact. The obtained regularities of the angular distribution are planned to be used for the analysis of energy-loss spectra measured in our group.

For the excitation of Rb atom from the state  $J_0$  to the state  $J_1$  by an electron moving with the momentum  $p_1$  can be written as follows [3]:

$$\frac{d\sigma(J_0 \rightarrow J_1 p_2)}{d\vartheta} = \frac{\sigma}{4\pi} \Big[ 1 + \sum_{k>0} \beta_k P_k(\cos(\vartheta)) \Big].$$

Here  $\sigma$  is the total excitation cross section [3] of an atom,  $P_k(cos(\vartheta))$  is the Legendre polynomial,  $\vartheta$  is the polar angle of the scattered electron with respect to the direction of the incoming electron, the asymmetry parameter  $\beta_k$  of the angular distribution of the scattered electrons is defined as [3, 4]:

$$\beta_{k} = \frac{(2k+1)B^{ex}(0,k,0,k,k,0,k,0,k)}{B^{ex}(0,0,0,0,0,0,0,0,0)}.$$

The expression for  $B^{ex}$  is presented in [4], and the summation parameter k can acquire the values *max*  $(|\lambda_1 - \lambda_1 \uparrow, |\lambda_2 - \lambda_2 \uparrow) \le k \le \min(\lambda_1 + \lambda_1 \prime, \lambda_2 + \lambda_2 \prime)$  for each set of the partial wave momenta which can be very large depending on the energy of the projectile electron.

The calculations of the parameters  $\beta_k$  were performed by using our own computer codes in the basis of the intermediate coupling Hartree-Fock state wave functions. The calculated factors

$$C = 1 + \sum_{k>0} \beta_k P_k(\cos(\vartheta))$$

characterizing the increase or decrease of the intensity of the scattered electrons at the `magic` angle  $\vartheta$ =54.7° are presented in table 1 for some of low-lying autoionizing states of Rb atoms as a function of the energy *E* of impacting electrons.

Table 1. The factors <i>C</i> for the autoionizing states of Rb
in the case of the registration of the scattered electrons
at 54.7° angle.

E(eV)	$5s^2 {}^2P_{1/2}$	$5s^{2}P_{3/2}$	5s( <sup>1</sup> P)5p <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	4d( <sup>1</sup> P)5s <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>
19	0.33	0.31	0.50	1.62
25	0.58	0.56	0.71	1.06
30	1.06	1.08	1.09	0.69
35	1.14	1.16	0.30	0.63
40	1.12	1.14	0.13	0.61
45	1.48	1.49	0.04	0.57
50	0.89	0.92	0.00	0.52
55	0.82	0.84	0.01	0.47
60	0.76	0.78	0.03	0.46
65	0.68	0.70	0.05	0.45
70	0.62	0.64	0.09	0.47
75	0.60	0.61	0.11	0.48
80	0.57	0.57	0.13	0.48

The results in table 1 show, that the differential excitation cross sections for all states except  $4d(^{1}P)5s$   $^{2}P_{3/2}$  state should increase from the excitation threshold and reach a maximum at the energy of about 35 eV. In the case of  $5s^{2} \, ^{2}P_{1/2,3/2}$  the cross sections decrease with increasing impacting electron energy. The cross section of  $5s(^{1}P)5p \, ^{2}P_{3/2}$  state achieves a minimum at 55 eV and then starts to increase. In the case of  $4d(^{1}P)5s \, ^{2}P_{3/2}$  state, the cross section should decrease from the threshold, reach a minimum at 65 eV and then slowly increase with increasing the energy of incoming electrons. The present data will be used for analysing the experimental energy-loss spectra of Rb atoms [5].

*Keywords: electron-impact excitation, autoionizing states, electron angular distribution.* 

#### References

- [1] A. Borovik, V. Roman, and A. Kupliauskienė, J. Phys. B 45, 045204 (2012).
- [2] M.W. D. Mansfield, Proc. R. Soc. Lond. A 364, 135 (1978).
- [3] A. Kupliauskienė, Lith. J. Phys. 44, 17 (2004).
- [4] A. Kupliauskienė, Phys. Scr. **75**, 524 (2007).
- [5] V. Roman, V. Hrytsko, A. Borovik, Uzhorod University Scientific Herald. Series Physics. 34, 139 ( 2013).

# Uždelsto grįžtamojo ryšio valdymo metodo teorijos plėtojimas

## Progress in the theory of the time-delayed feedback control method

Viktoras Pyragas, Kęstutis Pyragas

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

viktoras.pyragas@ftmc.lt

Chaoso valdymas, t.y. chaotinių sistemų nestabiliųjų būsenų stabilizavimas neinvaziniais metodais, yra viena idomiausiu netiesinės dinamikos sričiu. Uždelsto grįžtamojo ryšio valdymo metodas (UGRV), kuris buvo pasiūlytas [1] darbe, yra paprasta, bet efektyvi priemonė Nestabiliųjų periodinių orbitų (NPO) stabilizavimui. UGRV yra panaudotas daugelyje eksperimentų, ir yra pasiūlyta daugybė jo modifikacijų, pagerinančių jo veiksmingumą (žr. pavyzdžiui apžvalgą [2]). Svarbiausia šio metodo modifikacija yra Išplėstinis UGRV (IUGRV) [3], kuris panaudoja begalinę delsų eilutę, ir padaro metodą veiksmingą stipriai nestabilių NPO atvejais. UGRV teorija yra sudėtinga, nes šių sistemų dinamika vyksta begalinio matavimo erdvėje. UGRV valdomų sistemu tiesini stabiluma nusako begalinis Flokė rodikliu (FR) skaičius. Tai apsunkina šio metodo optimizavimą, nes sunku manipuliuoti begaliniu FR spektru, turint baigtinį valdymo parametrų rinkinį.

Čia pateikiame du mūsų pastaruosius darbus [4,5], kurių tikslas yra tolimesnis UGRV teorijos plėtojimas.

Publikacijoje [4] mes nagrinėjome baigtinės UGRV dimensijos modifikacija, panaudodami laukimo-veikimo koncepcija. Ši idėja iš pradžių buvo pasiūlyta tiesinei invariantinei laiko atžvilgio sistemai, veikiamai UGRV valdiklio. Idėjos esmė yra periodiškas uždelsto valdymo trikdžio išjunginėjimas (laukimas) ir įjunginėjimas (veikimas). Mes čia pritaikėme šią idėją kad, kai UGRV veikiamoms NPO. Parodėme, laukimo trukmė yra ilgesnė negu veikimo, tai dinaminių sistemų begalinio matavimo funkcinė erdvė redukuojasi iki baigtinio matavimo skaičiaus. Tuomet valdomos sistemos FR skaičius tampa lygus laisvos sistemos FR skaičiui. Todėl valdomos NPO tiesinis stabilumas gali būti žymiai pagerintas, tinkamai varijuojant valdymo parametrus. Mes čia apsiribojome neautonominiu sistemų atveju, nes tuomet valdoma NPO ir periodinė junginėjimo funkcija yra sinchronizuotos.

Mes adaptavome *Gradient Sampling* (GS) metodą laukimo-veikimo UGRV metodo veikiamoms NPO. Šiuo atveju reikėjo rasti tokias valdymo parametrų vertes, kurioms esant FR realioji dalis virstų dideliu neigiamu skaičiumu, t.y. įvyktų *deadbeat* (tikras deadbeat'as atitiktų minus begalybę). Uždavinys buvo apsunkintas tuo, kad deadbeat'as yra smailus minimumas, t.y. minimizuojamos funkcijos išvestinė yra labai didelė. Šią problemą išsprendėme, adaptavę GS metodą, kuris yra taikomas laužtinių funkcijų minimumų paieškai.

Straipsnyje [5] mes atradome sąryšį tarp IUGRV ir neseniai Olyaei ir Wu [6] pasiūlyto chaoso valdymo metodo. Pastarajame metode norima NPO yra aproksimuojama apkarpyta Furje eilute. Ši eilutė yra modeliuojama Harmoninių oscilaitorių (HO) sistema, kuri yra prijungta prie valdomos sistemos taip, kad HO ir valdomos NPO sinchronizuota dinamika tampa stabili. Lyginant su UGRV valdymo schemomis, HO metodas (HOM) reikalauja daugiau pastangų eksperimentinėse realizacijose; tačiau HOM teorija yra daug paprastensė, nes yra pagrįsta paprastomis diferencialinėmis lygtimis.

Mes tyrėme HOM begalinio harmonikų skaičiaus riboje, ir nustatėme, kad, kai ryšio koeficientai yra vienodi visiems HO, tai tuomet HO valdiklio perdavimo funkcija sutampa su IUGRV valdiklio perdavimo funkcija. Šis rezultatas yra vertingas ne tik teoriniu požiūriu (jis padeda giliau suprasti HOM ir UGRV valdymo schemas). Jis taip pat leidžia aproksimuoti IUGRV sistemas paprastomis diferencialinėmis lygtimis. Taip pat parodėme, kad IUGRV metodo vedantysis FR gali būti įvertintas iš HOM tiesinės analizės, apsiribojant baigtiniu harmonikų skaičiumi.

Mes panaudojome patobulintą Spektrinių elementų metodą (SEM) IUGRV atvejui. Pavyzdžiui, [7] darbe SEM buvo pritaikytas IUGRV sistemų FR radimui, apkarpant begalinę delsų eilutę iki baigtinės, todėl metodas buvo iš esmės apytikslis. Tuo tarpu, mes SEM patobulinome, pritaikę jį begalinei delsų eilutei, pasinaudodami rekurentiniu sąryšiu, žr. [8] darbo apendiksą.

Reikšminiai žodžiai: chaoso valdymas, Nestabilios periodinės orbitos, uždelsto grįžtamojo ryšio valdymo metodas, harmoninių osciliatorių metodas, laukimo-veikimo valdymo strategija.

- [1] K. Pyragas, Phys. Lett. A 170, 421 (1992).
- [2] K. Pyragas, Philos. Trans. R. Soc. A 364, 2309 (2006).
- [3] J. E. S. Socolar, D.W. Sukow, and D. J. Ghauthier, Phys. Rev. E 50, 3245 (1994).
- [4] V. Pyragas, K. Pyragas, Phys. Rev. E 94, 012201 (2016).
- [5] V. Pyragas, K. Pyragas, Phys. Rev. E 92, 022925 (2015).
- [6] A. A. Olyaei, Ch. Wu, Phys. Rev. E 91, 012920 (2015).
- [7] D. J. Tweten, B. P. Mann, Phys. Rev. E **86**, 046214 (2012)
- [8] V. Pyragas, K.Pyragas, Eur. J.Phys. B 87, 274 (2014)

#### Chaotinių sistemų dinamikos prognozė taikant algoritmus be delsos elementų

#### Anticipating of chaotic dynamics via schemes without time-delay terms

<u>Tatjana Pyragienė</u>, Kęstutis Pyragas Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius <u>tatj</u>ana.pyragiene@ftmc.lt

Vienas iš būdų prognozuoti chaotinių sistemų dinamiką yra prognozuojančios sinchronizacijos (*anticipating synchronization*, **AS**) taikymas [1]. Šis reiškinys atsiranda konfigūracijoje "valdančioji sistema - atsakas" ("*drive - reponse*" arba "*master - slave*"). Populiariausi **AS** algoritmai turi delsos elementus atsako sistemoje. Pastarieji didina visos sistemos laisvės laipsnių skaičių iki begalybės. Tai labai komplikuoja stabilaus **AS** režimo teorinį tyrimą bei eksperimentinį realizavimą. **AS** režimo analizės ir įdiegimo palengvinimui naudojami algoritmai be vėlinimo linijos [2]. Šiuo atveju, prognozė yra netiksli, bet pakankamai gera praktiniams taikymams.

Mes realizavome prognozuojančią sinchronizaciją pasitelkdami du naujus ryšio konstravimo algoritmus be delsos elementų. Mūsų darbe [3], visa sistema,

$$\dot{\mathbf{r}}_0 = \mathbf{f}(\mathbf{r}_0), \tag{1a}$$

$$\dot{\mathbf{r}}_1 = \beta(t)\mathbf{f}(\mathbf{r}_1) + \alpha(t)\mathbf{K}_1(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1), \qquad (1b)$$

$$\dot{\mathbf{r}}_2 = \mathbf{f}(\mathbf{r}_2) + \gamma(t)\mathbf{K}_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \qquad (1c)$$

susideda iš trijų chaotinių sistemų, aprašomų vektoriniu lauku **f**(**r**). Vektoriai **r**<sub>0</sub>, **r**<sub>1</sub> ir **r**<sub>2</sub> yra valdančios sistemos (*master system*, **M**), tarpinės sistemos (*intermediate slave system*, **I**) ir atsako (terminal slave system, **T**) dinaminiai kintamieji. Ryšių stipriai pažymėti simboliais **K**<sub>1,2</sub>. Visa grandinė parodyta 1 pav. viršuje. Žemiau pavaizduota parametrų  $\alpha(t)$ ,  $\beta(t)$  ir  $\gamma(t)$  dinamika per laiko periodą T



1 pav. AS su parametrų perjungimu schema.

Algoritme periodiškai atliekama tokia procedūra. Periodas T padalintas į tris dalis. Laiko intervale  $T_1$ , valdančioji sistema **M** pilnai sinchronizuojasi su tarpine sistema **I**. Laiko intervale  $T_2$ , visos trys sistemos osciliuoja laisvai, o sistema **I** perjungiama į greitesnę laiko skalę. Laiko intervale  $T_3$ , tarpinė sistema **I** pilnai sinchronizuojasi su atsako sistema **T**. Analiziniais tyrimais mes nustatėme optimalias sistemos parametrų vertes ir gavome stabilų prognozuojančios sinchronizacijos režimą Rössler'io [4] ir Lorenz'o [5] sistemų chaotinėms osciliacijoms bei Hindmarsh-Rose neuronų sistemos [6] chaotinėms smailėms (*spikes*).

Mūsų darbe [7], mes pakeitėme delsos elementą klasikiniame Voss'o algoritme [1] mažos eilės visų dažnių filtru (*low-order all-pass filter*, **LOAOF**). Filtras yra sukonstruotas pasitelkiant Padé aproksimacijos ir Laplaso transformacijos metodus. Naujo algoritmo efektyvumas pademonstruotas analiziškai paprastam spiralių modeliui ir skaitmeniškai chaotinei Rössler'io sistemai [4]. 2 pav. matome, kad **LOAPF** algoritmas skiriasi nuo klasikinio Voss'o algoritmo [1] tik esant pirmos eilės filtrui, ir abiejų algoritmų rezultatai sutampa aukštesnės eilės filtrams.



2 pav. **LOAPF** algoritmo stabilios **AS** ribos. *K* - ryšio stipris,  $\tau$  - prognozės trukmė, *n* - filtro eilė.

Reikšminiai žodžiai: chaotinės sistemos, prognozuojanti sinchronizacija, jungties dizainas, visų dažnių filtras.

- [1] H. U. Voss, Phys. Rev. E 61, 5115 (2000) .
- [2] N. J. Corron, J. N. Blakely, S. D. Pethel, Chaos 15(2), 023110 (2005).
- [3] T. Pyragienė, and K. Pyragas, Phys. Lett. A 379, 3084 (2015).
- [4] E. Rössler, Phys. Lett. A 57, 397 (1976).
- [5] E. N. Lorenz, J. Atmos. Sci. 20, 130 (1963).
- [6] J. L. Hindmarsh, R. M. Rose, Proc. R. Soc. Lond. B, Biol. Sci. 221 (1222), 87 (1984).
- [7] T. Pyragienė, and K. Pyragas, Phys. Lett. A 381, 1893 (2017).

# Tautomerizmu pasižyminčių junginių rūgštingumo konstantų modeliavimas tankio funkcionalo teorijos metodais

#### DFT predictions of acidity constants for compounds exhibiting tautomerism

Sonata Kvedaravičiūtė<sup>1</sup>, Andrés Cedillo<sup>1,2</sup>, <u>Kęstutis Aidas</u><sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, San Rafael Atlixco 186, México DF, Mexico <u>kestutis.aidas@ff.vu.lt</u>

Consideration of tautomeric species in the field of computer-aided drug design represents significant challenges. Different tautomers of the same molecule typically exhibit different properties such as hydrophobicity or acidity constant,  $pK_a$ , and they might even adopt considerably different spatial arrangements. For these reasons the pharmacological activity of the different tautomeric forms can also be rather different. For example, proteins are known to often preferentially bind the tautomer which has lower abundance in aqueous solution. Because the tautomerization rates are typically high, measured properties like  $pK_a$  are averages over all tautomers, unless experiments have been specifically designed to detect only one of the tautomers. Because microscopic  $pK_a$  values for specific tautomers are rearly known, it is thus difficult to train the so-called empirical QSPR or QSAR approaches in order for these methods to predict tautomeric  $pK_a$  values with acceptable accuracy.

Problems met herein can be in principle lifted by using electronic structure calculations of molecular thermochemical properties. These calculations can be combined with different thermodynamic cycle based schemes to provide the acidity or tautomeric equilibrium constants,  $pK_a$  and  $pK_T$ , respectively. The accuracy of these approaches depends on the reliability of the electronic structure method and solvation model, as well as on the nature of the thermodynamic cycle. While satisfactory agreement of predicted and experimental acidity constants has been documented, generally valid conclusions have not yet been reached, and theoretical predictions of the  $pK_a$  values for (drug-like) molecular compounds is thus still an active research area.

We have recently demonstrated that computational schemes based on density functional theory (DFT) methods, on the so-called SMD solvation model and on the so-called proton exchange thermodynamic cycle provide accurate predictions of acidity constants for the family of primary benzenesulfonamides [1]. In present work, we aim to test similar computational strategies in the predictions of acidity and tautomeric equilibrium constants for the 2-, 3- and 4-phenacylpyridines, see Fig. 1. The underlying  $pK_a$  and  $pK_T$  constants for different tautomeric forms of these molecules have been reported [2]. Our approach involves the use of two different DFT functionals as well as a couple of oneelectron basis sets of different quality. We have also considered the composite CBS-QB3 approach for extremely accurate predictions of gas-phase thermochemical properties. We have relied on the SMD solvation model. We have considered both the direct and the proton exchange thermodynamic cycles for the calculation of acidity constants.

We were able to demonstrate that computed acidity constants for 5 different tautomeric forms of each molecule in neutral and cationic states are typically overestimated as compared to experimental data when direct thermodynamic cycle is employed. The errors are smaller when larger Dunning type cc-pVTZ basis set is used as compared to the Pople style  $6-31G^*$  double-zeta basis, yet most importantly these errors are found to systematically follow a rather linear trend. The use of proton exchange thermodynamic cycle has lead to improved  $pK_a$  values in some cases, yet achievable errors were found to be difficult to control as different reference compounds had to be used for different tautomeric forms.



Figure 1. Molecular structure of 2-, 3- and 4phenacylpyridine, a, b and c, respectively.

*Keywords: acidity constant, density functional theory, thermodynamic cycle.* 

#### Acknowledgment

Computations were performed on resources at the High Performance Computing Center "HPC Sauletekis" of Vilnius University. A.C. acknowledges support from Lithuanian Ministry of Education and Science.

#### **Bibliography**

- K. Aidas, K. Lanevskij, R. Kubilius, L. Juška, D. Petkevičius, and P. Japertas, J. Comp. Chem. 36, 2158 (2015).
- [2] A.R.E. Carey, S. Eustace, R.A.M. O'Ferrall, and B.A. Murray, J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2, 2285 (1993).

#### Perilenų fluorescencijos kvantinių našumų priklausomybė nuo jų cheminės struktūros

# The Influence of Molecular Structure on Fluorescence Quantum Yields of Perylene Compounds

<u>Austėja Bukauskytė<sup>1,2</sup></u>, Romualdas Striela<sup>2</sup>, Renata Karpicz<sup>2</sup>, Linas Labanauskas<sup>2</sup>, Alytis Gruodis<sup>1</sup>, Domantas Peckus<sup>3</sup>, Ramūnas Augulis<sup>2</sup>, Vidmantas Gulbinas<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>3</sup> Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51426 Kaunas

bukauskyte.austeja@gmail.lt

Perilendiimido (PDI) dariniai - ivairiose srityse tiriami organiniai dariniai, kurių panaudojimas gali būti labai platus. Šie dariniai yra termiškai ir foto- stabilūs, pasižymi cheminiu inertiškumu bei aukštu fluorescencijos kvantiniu našumu. Pirmieji perilendiimidai pasižymėjo prastu tirpumu, todėl buvo plačiai naudojami kaip aukštos kokybės pramoniniai dažai, ypač automobilių kėbulams [1]. Pradėjus sintetinti perilendiimidus su tirpumą gerinančiais pakaitais, ju taikymo galimybės stipriai išplito. Dėl aukšto fluorescencijos kvantinio našumo, didelio foto- ir terminio stabilumo. PDI dariniai naudoiami liuminescenciniuose saulės koncentratoriuose, plati sugertis regimojoje srityje leidžia šiuos darinius naudoti dažais sensibilizuotuose saulės elementuose [2]. PDI dariniai pasižymi n-tipo laidumu, todėl gali būti naudojami organiniuose saulės elementuose, organiniuose lauko tranzistoriuose bei organiniuose šviestukuose [3].

Medžiagos fluorescencinės savybės gali būti charakterizuojamos jos fluorescencijos spektru, fluorescencijos gyvavimo trukme bei kvantiniu našumu. šių parametrų sudėtingiausia yra nustatyti Iš fluorescencijos kvantini našuma. Vienas iš fluorescencijos paprasčiausių kvantinio našumo nustatymo metodų - palyginamasis [4]. Šio metodo esmė yra žinomo kvantinio našumo medžiagos bei tiriamos medžiagos sugerties ir fluorescencijos spektrų palyginimas.

Šiame darbe buvo tiriami devyni naujai susintetinti PDI junginiai. Ju struktūra pavaizduota 1 pav. Išmatuoti chloroforme tirpalu šių medžiagų sugerties ir fluorescencijos spektrai, fluorescencijos gesimo kinetikos. Išmatuoti kai kurių junginių žadinimo spektrai bei atlikti kvantmechaniniai zondavimo skaičiavimai. Palyginamuoju metodu, naudojant du visų perilendiimidu standartus, buvo nustatyti fluorescencijos kvantiniai našumai.

Darbo metu nustatyta, jog pakaitai prie centrinių perileno žiedų lemia PDI junginių sugerties ir fluorescencijos spektrinių juostų išplatėjimą bei, priklausomai nuo pakaitų tipo, stebimas spektrinių juostų poslinkis. PDI junginiai, turintys keturis 4-tert-butilfenolio pakaitus prie centrinių perileno žiedų, pasižymi aukščiausiu kvantiniu našumu. PDI junginiai su šešiais 4-tert-butilfenolio pakaitais pasižymi žemesniu fluorescencijos kvantiniu našumu. PDI junginiai, turintys bromo pakaitus, pasižymi labai žemu fluorescencijos kvantiniu našumu.

Žadinimo – zondavimo spektrų duomenys bei kvantmechaninių skaičiavimų rezultatai atskleidė, jog bromo pakaitai stipriai sumažina fluorescencijos kvantinį našumą dėl vykstančios interkombinacinės konversijos. Taip pat nustatyta, jog pakaitai prie centrinių perileno žiedų deformuoja PDI molekulės plokštumą. PDI molekulių fluorescencijos kvantinis našumas atvirkščiai proporcingas šiam posūkio kampui (1pav.).





Reikšminiai žodžiai: fluorescencijos kvantinis našumas, perileno diimidai, kvantmechaniniai skaičiavimai.

Šis darbas buvo dalinai finansuotas LMT projekto Nr. LAT-07/2016

- [1] W. Herbst, K. Hunger, *Industrial Organic Pigments Production*, *Properties, Applications*, (Weinheim, 2004).
- [2] E. M. Calzado, J. M. Villalvilla, P. G. Boj, J. A. Quintana, R. Gomez, J. L. Segura, M. A. Diaz-Garcia, J. Phys. Chem. C, 111, 13595-13605 (2007).
- [3] D. Kotowski, S. Luzzati, G. Scavia, M. Cavazzini, A. Bossi, M. Catellani, E. Kozma Dyes and Pigments 120, 57-64 (2015)
- [4] H. Langhals, J. Karolin, L. BA. Johansson, J. Chem. Soc., Faraday Trans., 94, 2919-2922, (1998)

#### Daugelio būsenų modelis trikampių molekulių susitvarkymams skaičiuoti

#### A multistate model for simulation of triangular molecules ordering

Andrius Ibenskas<sup>1</sup>, Mantas Šimėnas<sup>2</sup>, Evaldas E. Tornau<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Puslaidininkių Fizikos Institutas, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

andrius.ibenskas@ftmc.lt

Supramolekulinės struktūros gali pasižymėti svarbiomis magnetinėmis ir optinėmis savybėmis, kurios nebūdingos pavienėms molekulėms. Organinių molekulių savaiminį susitvarkymą į tvarkingus porėtus monosluoksnius dažniausiai lemia silpnos nekovalentinės sąveikos, tarpmolekuliniai ypač vandeniliniai ryšiai. Į nanoporas įterpiant įvairias kitas funkcines molekules arba nanodaleles, suformuojamos struktūros. kurios vra taikomos molekulinėje elektronikoje ir spintronikoje. taip pat duiu biojutikliuose ar medicinoje - vaistų ir genų pernešimui.

Susidarančios molekulių sistemos yra tiriamos pasitelkiant skenuojančią tunelinę mikroskopiją. Vis dėlto šie eksperimentai nesuteikia pilnos informacijos, kadangi net submolekulinės skyros dažnai nepakanka struktūrinių detalių nustatymui, todėl reikalingas skaitmeninis molekulinių sistemų modeliavimas.

Tvarkingų molekulių monosluoksnių struktūra priklauso nuo molekulių dydžio ir formos. Pvz., yra žinoma, kad trimezinės rūgšties (TMA) molekulės, sudarytos iš fenilo žiedo ir trijų periferinių karboksilo grupių ir pasižyminčios trikampe simetrija, ant įvairių metalų paviršių suformuoja heksagoninę, taip vadinamą medaus korio (MK), fazę. Šios fazės susidarymas gali būti aprašomas trijų būsenų modeliu [1-3], tačiau realūs susitvarkymai yra žymiai sudėtingesni, kadangi molekulė atlieka daug rotacinių žingsnių, kol "randa" optimalų vandenilinį ryšį su kita molekule. Taigi, konstruojant tikslesnį modelį, reikėtų įvertinti didesnį skaičių orientacinių molekulės būsenų. Tai taip pat leistų padidinti sistemos entropiją ir suskaičiuoti tikslesnę susitvarkymo temperatūrą.

Šiame darbe simetriškų trikampių TMA molekulių susitvarkymas tiriamas naudojant q+1 būsenų (q = 2 - 120) fazinių virsmų modelius ant trikampės gardelės. Sąveikauja tik molekulės, atsidūrusios artimiausių kaimynų mazguose. Dėl savo trikampės simetrijos molekulė gali formuoti skirtingas būsenas pasisukdama  $2\pi/(3q)$  kampu. Molekulių pora turi  $q^2$  galimų tarpusavio orientacijų, o neužimtas gardelės mazgas atitinka nulinę būseną. Kiekvienai tokiai konfigūracijai priskiriama konkreti porinės sąveikos vertė. Siekiant kuo geresnio atitikimo realiems eksperimentams, tankio funkcionalo metodu (TF) suskaičiuotos visos tarpusavio porinės sąveikos modeliui su būsenų skaičiumi q = 12. Ryšio atstumas fiksuojamas taip, kad optimaliai attiktų stipriausią sąveiką, kai gretimų molekulių jungtys nukreiptos viena į kitą. Sukant vieną molekulę, porinė sąveika (šiek tiek asimetriškai) silpnėja pagal sinuso dėsnį. Ekstrapoliuojant tarp šitų verčių, buvo gautos sąveikų vertės, kai q > 12. Be to, TF skaičiavime atsižvelgta į TMA molekulių skirtingų konformacijų egzistavimą. Apskaičiuotas sąveikų vertes naudojame termodinaminiuose susitvarkymo skaičiavimuose, sprendžiant modelį Monte Karlo metodu. Palaikoma fiksuota MK struktūros stechiometrinė molekulių koncentracija (c = 0.67).

Gauti rezultatai rodo, kad dvimačiam q+1 būsenų modeliui yra būdingas susitvarkymas į porėtą MK fazę. Mažų q atveju (q < 12) žemoje temperatūroje gaunama idealiai tvarkinga struktūra. Esant didesniems q, net ir žemoje temperatūroje didelė dalis molekulių išlieka pasisukusios 10° nuo idealios MK struktūros padėties. Kadangi saveikos energiju skirtumas tarp idealios ir iškraipytos struktūrų yra nedidelis, tvarkingos sistemos iškraipymus sukelia kitos į MK ertmes įsiterpusios TMA molekulės. Didinant būsenų skaičių, t.y. diskretiniam modeliui artėjant į tolydinį, fazinis virsmas vis dėlto išlieka, bet virsmo temperatūra  $T_c$  eksponentiškai mažėja (apie 2 kartus, palyginus su triju būsenu modeliu [1,2]) ir priartėja prie eksperimentinės vertės. Paskaičiuotos kritinės eksponentės (kai q = 4 ir q = 120) rodo, kad fazinis virsmas priklauso trijų būsenų Potts'o universalumo klasei. Šiluminės talpos priklausomybėje nuo temperatūros žemiau T<sub>c</sub> taip pat atsiranda antras maksimumas ties temperatūra  $T_1$ , kurį sąlygoja MK struktūros ertmių išsivalymas nuo ten įsiterpusių molekulių. Temperatūra  $T_1$  taip pat mažėja didinant q.

Reikšminiai žodžiai: molekulių savitvarka, fazinių virsmų modeliai, Monte Karlo metodas.

- [1] T. Misiūnas and E. E. Tornau, J. Phys. Chem. B. 116, 2472 (2012).
- [2] M. Šimėnas, A. Ibenskas, and E. E. Tornau, Phys. Rev. E. **90**, 042124 (2014).
- [3] A. Ibenskas, M. Šimėnas, and E. E. Tornau, J. Phys. Chem. C. 120, 6669 (2016).

#### Priemaišų įtaka TiO2 plonų sluoksnių fotokatalitinėms savybėms

### Photocatalytic performance of Mg-, Cu-, Ni- doped TiO<sub>2</sub> films under UV light

Vytautas Kavaliūnas<sup>1</sup>, Edvinas Krugly<sup>2</sup>, Giedrius Laukaitis<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Kauno Technologijos Universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Fizikos katedra, Studentų g. 50, LT-

51368 Kaunas

<sup>2</sup>Kauno Technologijos Universitetas, Cheminės Technologijos fakultetas, Aplinkosaugos technologijos katedra,

Radvilėnų pl. 19C, LT-50299 Kaunas

vytautas.kavaliunas@ktu.edu

Titano dioksidas (TiO<sub>2</sub>) yra tyrinėjamas daugelį metų įvairiose panaudojimo srityse, kadangi šios medžiagos savybes galima kontroliuoti keičiant kristalinę struktūrą, dalelių dydį, paviršiaus plotą, poriškumą, nusodinimo technologiją bei įterpiant priemaišų [1]. TiO<sub>2</sub> pasižymi greita krūvininkų generacija apšvietus jį UV spinduliuote ar regimosios šviesos diapazone. TiO2 savybės gali būti lengvai keičiamos į jį įterpiant kitų metalų jonų ar polimerų [2]. Svarbiausias parametras fotokatalizės procese yra medžiagos laidumas, o svarbiausias parametras fotokatalizatoriui yra lėta krūvininkų rekombinacija. Metalų jonai ar polimerai atlieka antrinį vaidmenį fotokatalizės procese kaip krūvininkų generatoriai bei, parinkus atitinkamas priemaišas, galima padidinti TiO<sub>2</sub> šviesos absorbciją regimosios šviesos diapazone [3].

Pagrindinis šio darbo tikslas yra rasti optimalias Mg-, Cu-, Ni- koncentracijas TiO<sub>2</sub> dangoje, naudojant magnetroninį dulkinimą, bei ištirti šių dangų fotokatalitines savybes skaidant oksalo rūgšties vandeninį tirpalą.

Tiriamieji bandiniai ant nerūdijančio plieno plokštelių buvo užnešti Cu-, Ni-, Mg- /TiO<sub>2</sub> danga naudojant magnetroninį dulkinimą. Fotokatalizės procesas buvo atliekamas oksalo rūgšties vandeniniame tirpale. Bandiniai buvo tiriami su "Shimadzu TOC-L" norint nustatyti bendrą likutinį anglies kiekį tirpale. XRD, TOC, SEM, EDS tyrimai buvo naudojami surandant optimalias sąlygas ir tiriant fotokatalitines savybes.

Atlikus tyrimus nustatytos optimalios priemaišų koncentracijos bei fotokatalizės greičio konstantos kiekvienam bandiniui atskirai.



priklausomybė nuo priemaišų koncentracijos

Atlikti XRD, SEM ir EDS tyrimai rodo, kad mažėjant priemaišų koncentracijai TiO<sub>2</sub> dangoje, mažėja sistemos stabilumas, tačiau padidėja paviršiaus aktyvumas.



Optimali Mg-, Cu-, Ni- priemaišų koncentracija, kai pasiekiamas didžiausias efektyvumas, TiO2 dangoje negali viršyti 1% (1 pav.). Priemaišos veikia kaip elektronų akceptoriai, kurie stabdo rekombinacijos procesa, taip padidindami proceso efektyvuma. Taip pat fotokatalizės efektyvumui itaka daro ir aplinka kurioje vyksta procesas. Ištirtos dangų fotokatalitinės savybės, naudojant oksalo rūgštį kaip skaidomą tirpalą, po UV spinduliuote. Nustatyta optimalios priemaišų koncentracijos, kuomet fotokatalizės proceso efektyvumas yra didžiausias: Mg - 0,9%, Cu - 0,6% ir Ni – 0,5% (2 pav.). Mažėjant ar didėjant koncentracijai – efektyvumas mažėja. Mg priemaišų turinčio TiO2 fotokatalizės proceso greičio konstanta yra kapp=0,01866  $min^{-1}$ ;  $Cu - k_{app} = 0,02221 min^{-1}$ ;  $Ni - k_{app} = 0,01317 min^{-1}$ , kai gryno TiO2 kapp=0,01160 min-1, o oksalo rūgšties kapp=0,00080 min<sup>-1</sup>.

*Reikšminiai žodžiai: fotokatalizė, fotokatalitinis aktyvumas, titano dioksidas.* 

- Scuderi, V., et al. Photocatalytic and Antibacterial Properties of Titanium Dioxide Flat Film. Materials Science in Semiconductor Processing, 2, 2016, vol. 42, Part 1. pp. 32-35 ISSN 1369-8001.
- [2] Dionysiou, D.D., et al. Photocatalysis: Applications. Royal Society of Chemistry, 2016.
- [3] Liu, B. and Zhao, X. A Kinetic Model for Evaluating the Dependence of the Quantum Yield of Nano-TiO2 Based Photocatalysis on Light Intensity, Grain Size, Carrier Lifetime, and Minority Carrier Diffusion Coefficient: Indirect Interfacial Charge Transfer. Electrochimica Acta, 4/30, 2010, vol. 55, no. 12. pp. 4062-4070 ISSN 0013-4686.

# Joninių skysčių imidazolo pagrindu BMR spektrai: įžvalgos iš KM/MD skaičiavimų

# NMR spectra of imidazolium based ionic liquids: insights from large-scale QM/MD calculations

Dovilė Lengvinaitė, Vytautas Klimavičius, Kęstutis Aidas

Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Bendrosios fizikos ir spektroskopijos katedra, Saulėtekio al. 9, LT-10222

dovile.lengvinaite@ff.stud.vu.lt

Branduolių magnetinio rezonanso spektroskopija, žinoma kaip BMR spektroskopija, yra plačiai taikomas metodas tiriant įvairių molekulių ir molekulinių darinių struktūrą bei dinamiką. Cheminiai poslinkiai – skirtumai tarp skirtingų branduolių izotropinių magnetinio ekranavimo tenzorių verčių – yra vieni dažniausiai matuojamų dydžių BMR spektroskopijoje. Dažnai eksperimentiškai išmatuotus BMR spektrus ir ypač jų evoliuciją keičiant eksperimentines sąlygas, pvz., tirpiklį, temperatūrą, vandenilinio ryšio partnerio rūgštingumą ar baziškumą, yra sudėtinga interpretuoti. Šioje situacijoje labai puikiai pasitarnauja molekulinis modeliavimas naudojant kvantinės molekulių teorijos metodus [1].

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 [2].

Šiame darbe buvo tiriami 1-decil-3-metil-imidazolo chlorido - populiaraus, plačiai tyrinėjamo joninio skysčio – <sup>1</sup>H BMR spektrai įvairaus poliškumo tirpikliuose, buvo pastebėta neįprasta antros pozicijos ekranavimo protono elgsena: didėjant tirpiklio poliškumui registruotas šio protono ekranavimo didėjimas [3]. Branduoliu cheminiu poslinkių skaičiavimui buvo taikyti du metodai, tai tankio funkcionalo teorija (TFT) su poliarizuoto kontinuumo modeliu siekiant įskaičiuoti tirpiklio efektus ir jungtinis mechanikos/molekulinės kvantinės mechanikos (KM/MM) metodas kombinuotas su klasikinėmis molekulinės dinamikos simuliacijomis.

Tankio funkcionalo teorijos rezultatai atskleidė, kad katijono <sup>1</sup>H BMR spektrai dielektriniame kontinuume išlieka praktiškai nepatikę nepriklausomai nuo tirpiklio, o tai prieštarauja eksperimentiniams rezultatams. Šie rezultatai atskleidė, kad vandenilinio ryšio partnerio įtraukimas į dielektrinio kontinuumo dalį yra būtinas. Pastarieji rezultatai atskleidė, kad 2-osios pozicijos protono cheminis poslinkis nepriklauso nuo tirpiklio poliškumo, tačiau priklauso nuo vandenilinio ryšio partnerio. Norint pagerinti rezultatų tikslumą yra svarbu geras elektrostatinių tirpinio-tirpiklio ir neelektrostatinių sąveikų aprašymas. Tokį aprašymą suteikia jungtinis kvantinės mechanikos/molekulinės mechanikos (KM/MM) metodas.

Rezultatai patvirtino, kad Cl anijonas turi didelę įtaką 2-osios pozicijos protono cheminiam poslinkiui. Šis efektas didžiausias acetonitrilo ir dichlorometano tirpikliuose. Taip pat rezultatai atskleidė, kad joninių porų disociacijos laipsnis įvairaus poliškumo tirpikliuose turi lemiamos įtakos užregistruotiems <sup>1</sup>H BMR spektrams. Galiausiai, mūsų skaičiavimai leido atgaminti eksperimentinius rezultatus ir paaiškinti neįprastą 2-osios pozicijos protono cheminio poslinkio elgseną.



1 pav. 1-Decil-3-Metil-imidazolo chlorido joninės poros struktūra

Reikšminiai žodžiai: branduolių magnetinis rezonansas, kvantinės mechanikos/molekulinės mechanikos (KM/MM) metodas, molekulinės dinamikos simuliacijos, joniniai skysčiai, 1-decil-3-metilimidazolo chloridas.

#### Literatūra

[1] T. Helgaker, S. Coriani, P. Jørgensen, K. Kristensen, J. Olsen, K. Ruud. Recent Advances in Wave Function-Based Methods of Molecular-Property Calculations, *Chem. Rev.* **112**, 543 (2012).

[2] Bates, E. D.; Mayton, R.; Ntai, I.; James, H.; Davis, J. J. Am. Chem. So. **2002**, 124, 926.

[3] V. Balevicius, Z. Gdaniec, K. Aidas, J. Tamuliene, NMR and Quatum Chemistry Study of Mesoscopic Effects in Ionic Liquids, *J. Phys. Chem.* A **114**, 5365 (2010).

Vilnius

#### Trinarių trifenilamino fragmentą turinčių junginių sužadintos būsenos dinamika

### Excited state dynamics of trinary star-shaped triphenylamine based compounds

Domantas Peckus<sup>1</sup>, Tomas Matulaitis<sup>2</sup>, Jūratė Simokaitienė<sup>2</sup>, Tomas Tamulevičius<sup>1</sup>, Viktorija Mimaitė<sup>2</sup>, D. Volyniuk<sup>2</sup>,

Marius Franckevičius<sup>3</sup>, Vidmantas Gulbinas<sup>3</sup>, Sigitas Tamulevičius<sup>1</sup>, Juozas Vidas Gražulevičius<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Kauno technologijos universitetas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas <sup>3</sup>Fiziniu ir technologijos mokslu centras, Saulėtekio pr. 3, 10257 Vilnius

inologijos moksių centras, sauletekio pr. 5, 10

domantas.peckus@ktu.lt

Elektrono pernašos procesas ir jį lydintis organinių molekulinių fragmentų, kurie susideda iš donorinių (D) ir akceptorinių (A) grupių, sukimasis yra vadinamas sukimine vidumolekuline krūvio pernaša (angl. "*Twisted Intramolecular Charge Transfer*", toliau TICT). Šis reiškinys yra įdomus dėl plačių panaudojimo galimybių jutikliuose, fotojungikliuose, organiniuose saulės šviesos dioduose, saulės šviesos elementuose [1, 2].

Šiame darbe mes pristatome trijų naujų žvaigždės tipo junginių, turinčių skirtingų elektrono akceptorinių savybių branduolius, kurie yra sujungti dvigubomis jungtimis su trifenilamino (TPA) šoninėmis grupėmis, sinteze ir detalius tyrimus. Šiame darbe buvo ištirta junginio branduolio įtaka terminėms, optinėms, fotofizikinėms ir TICT susidarymo savybėms. Trifenilamino dariniai buvo detaliai tirti nuostoviosios ir laikinės spektroskopijos metodais, siekiant išsiaiškinti sužadintos būsenos formavimosi ir relaksacijos procesus. Nuostovioji sugertis buvo išmatuota su UV-VIS-NIR spektrometru, o ultraspartūs procesai - skirtuminės sugerties spektrometru HARPIA (Šviesos konversija). Ultrasparčių procesų matavimams buvo naudotas Yb:KGW lazeris Pharos (Šviesos konversija), kuris generuoja 200 kHz pasikartojimo, 290 fs trukmės, 1030 nm bangos ilgio impulsus. Norimas žadinimo bangos ilgis buvo parenkamas kolineariu optiniu parametriniu stiprintuvu Orpheus ir harmonikų generatoriumi Lyra (Šviesos konversija). Baltos šviesos generavimui buvo naudotas safyro kristalas, kuris buvo veikiamas 1030 nm bangos ilgio spinduliu. Nuostovioji ir dinaminė fluorescencija buvo matuota Edinburgh instruments FLS980 ir Streak-camera Hamamatsu C5680 spektrometrais.

Trifenilamino darinių struktūros pateiktos 1 pav.



1 pav. Žvaigždės formos trifenilamino dariniai.

Tiriami bandiniai buvo ištirpinti įvairiuose poliniuose (tetrahidrofuranas (THF)) ir nepoliniuose (toluenas) tirpikliuose.

TICT procesas TPA junginiuose buvo tirtas pasitelkiant dinaminės fluorescencijos ir skirtuminės sugerties metodus. TICT pernaša buvo stebima Streakcamera ir skirtuminiu sugerties spektrometru. Skirtuminės sugerties spektrometras dėl savo geriausios laikinės skyros pateikė daugiausia informacijos apie TICT procesus TPA molekulėse. Tyrimai rodo, kad efektyviausiai TICT procesas vyksta TPA-TRZ junginyje (2 pav.). Greitas neigiamo skirtuminės sugerties signalo gesimas ties 500 nm ir teigiamo signalo augimas ties 540 nm rodo naujos būsenos formavimasi, kaip kad rodo fluorescenijcos matavimai bei teorinis molekuliu orbitalių modeliavimas. Šią nauiai atsirandančia būseną galime priskirti prie TICT susidarymo.



2 pav. Skirtuminės sugerties spektrai (a) ir kinetikos
(b) TPA-TRZ bandinio THF tirpale. Bandinys buvo žadintas 435 nm bangos ilgio spinduliuote.

Dendrimerinių junginių išsami analizė parodė, kad TPA-TRZ junginys susideda iš stiprių elektrono donorinių ir akceptorinių dalių. TPA-TPA susideda tik iš donorinių dalių, o TPA-TPB susideda iš stiprių donorinių ir silpnos akceptorinės dalies.

Reikšminiai žodžiai: sukiminė vidumolekulinė krūvio pernaša, solvatochromizmas, skirtuminė sugertis, laikinė fluorescencija, D-A sistema.

- [1] S. Sasaki, G.P.C. Drummen and G. I. Konishi, J. Mater. Chem. C 4, 2731 (2016).
- [2] H. Zhu, M. Li, J. Hu, X. Wang, J. Jie, Q. Guo, C. Chen and A. Xia, Sci. Rep. 6, 24313 (2016).

#### Fluoruotų acetilacetono darinių struktūros ir sąveikos su vandens molekulėmis tyrimas

# Study of fluorinated acetylacetone derivatives and their interaction with water

Rasa Platakytė<sup>1</sup>, Justinas Čeponkus<sup>1</sup>, Claudine Crepin-Gilbert<sup>2</sup>, Valdas Šablinskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Bendrosios fizikos ir spektroskopijos katedra, Saulėtekio al. 9, Vilnius <sup>2</sup>CNRS ir Paris-Sud Universitetas, Orsė molekulinių mokslų institutas, 91405 Orsay, Prancūzija <u>rasa.platakyte@gmail.com</u>

Biocheminėse sistemose vandenilinis ryšys yra svarbus veiksnys, darantis įtaką molekulės struktūrai, energijos bei krūvio pernašai. Jis susidaro ir tarp molekulių, ir jų viduje - vienas iš pavyzdžių yra βdiketonų tipo molekulės, iš kurių paprasčiausią struktūrą turi acetilacetonas (AcAcH8). Ši molekulė jau buvo tirta įvairiais teoriniais ir eksperimentiniais metodais, tačiau norint geriau suprasti vidinį vandenilinį ryšį ir tarpmolekulinius ryšius su vandens molekulėmis, svarbu tirti ir modifikuotos struktūros molekules. Pakeičiant abiejose radikalinėse CH<sub>3</sub> grupėse esančius vandenilius fluoro atomais gaunama heksafluoroacetilacetono (AcAc6F), o tik vienoje iš ju - trifluoroacetilacetono (AcAcF3) molekulė. Pastaroji molekulė įdomi dėl savo asimetrinės geometrijos - CF3 grupė gali atsidurti CO grupių pusėje. Pagal OH B3LYP/6arba 311++G(3df,3pd) metodu atliktus skaičiavimus buvo nustatyta, kad stabilesnė molekulė yra AcAcF3(CO), kurią stabilizuoja  $\pi$  elektronų delokalizacija, nors vidinis vandenilinis ryšys šiuo atveju silpnesnis. Vidinio ryšio stipris pagal molekulinio modeliavimo rezultatus, įvertinant tarpatominius atstumus molekulėse, mažėja tokia tvarka:

AcAcH8 > AcAcF3(OH) > AcAcF3(CO) > AcAcF6



1 pav. Acetilacetono ir heksafluoroacetilacetono molekulių asociatai su vandeniu

Eksperimentiškai molekulės buvo tiriamos infraraudonosios sugerties spektroskopijos metodu, kombinuojamu su žemų temperatūrų matricine izoliacija. Tyrimu metu užregistruoti grynu medžiagu ir ju mišiniu izoliuotu argono matricoje spektrai (2 pav.). Heksafluoroacetilacetono vandens ir spektruose stebimos juostos ties 3700 cm<sup>-1</sup> bei 3580 cm<sup>-1</sup> (2 pav. b) priskiriamos molekuliniams asociatams. Pirmosios juostos pozicija lieka tokia pati ir trifluoroacetilacetono molekulės atveju, tačiau antroji (asimetrinis OH virpesys vandens molekulėje) yra mažiau nutolusi nuo vandens monomerų juostos (3760 cm<sup>-1</sup>). Tai parodo, kad AcAcF3 atveju susidaro silpnesnis tarpmolekulinis vandenilinis ryšys su vandeniu. Trifluoroacetilacetono ir vandens

kompleksams priskiriamos juostos matomos ties 3550 cm-1 bei 3480 cm-1, pastaroji išryškėja tik esant pakankamai didelei vandens koncentracijai. Teoriniai skaičiavimai numato dviejų tipu vandens ir trifluoroacetilacetono asociatų molekulių struktūras. Taigi, nors gryno trifluoroacetilacetono bandiniuose stebime tik AcAcF3(CO) molekules, gali būti, kad matricose formuojasi vandens asociatai su AcAcF3(CO) ir AcAcF3(OH) molekulėmis. Pačių AcAcF6 ir AcAcF3 molekulių OH valentinių virpesių juosta yra labai plati ir nestebima eksperimentiniuose spektruose.



2 pav. IR sugerties spektrai OH valentinių virpesių srityje: (a) eksperimentinis AcAcF6 ir H<sub>2</sub>O 30 K argono matricoje, (b) teorinis AcAcF6+H<sub>2</sub>O, (c) H<sub>2</sub>O ir H<sub>2</sub>O 30 K argono matricoje, (d) teoriniai AcAcF3(CO)+H<sub>2</sub>O ir (e) AcAcF3(OH)+H<sub>2</sub>O.

Remiantis atliktų tyrimų rezultatais galima teigti, kad heksafluoroacetilacetono tarp ir vandens bei trifluoroacetilacetono ir vandens molekulių susidaro vandenilinis ryšys. Teoriniai skaičiavimai numato, kad stipriausias vandenilinis ryšys suformuojamas AcAcF3(OH) ir vandens asociato atveju, tačiau šis asociatas yra mažiau tikėtinas nei AcAcF3(CO), nes jo susidarymui reikalingas vidinio vandenilio tuneliavimas tarp dviejų CO grupių. Iš eksperimentinių spektrų galima teigti, kad matricoje formuojasi didesnis kiekis (CO) ir mažesnis - (OH) AcAcF3 konfigūraciju molekulju su vandeniu kompleksų. Heksafluoroacetilacetono atveju vandenilinis ryšys susilpnėja tiek pačioje molekulėje, tiek ir asociatuose su vandeniu.

Reikšminiai žodžiai: matricinė izoliacija, vandenilinis ryšys, tarpmolekuliniai kompleksai, infraraudonoji spektroskopija.

# Potencialo įtaka monosluoksnio su su fenilo galine grupe paviršiaus sustiprintiems Ramano sklaidos spektrams

# Effect of potential on surface enhanced Raman spectra of monolayer with terminal phenyl group

Marija Špandyreva, Ilja Ignatjev, Zenonas Kuodis, Gediminas Niaura Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius marija.spandyreva@gmail.com

Savitvarkiai monosluoksniai plačiai naudojami siekiant suteikti metalo paviršiams norimas fizikines ir chemines savybes. Monosluoksniai su galinėmis aromatinėmis funkcinėmis grupėmis gali dalyvauti pi-pi tarpmolekulinėje sąveikoje, elektronų pernašos procesuose [1]. Elektrocheminėje fazių riboje didelę įtaką monosluoksnių stabilumui, sanglaudai ir galinės funkcinės grupės struktūrai daro elektrodo potencialas.

Šiame darbe elektrocheminio potencialo įtaka monosluoksnio su galine fenilo funkcine grupe (MOPHE) struktūrai buvo tiriama paviršiaus sustiprintos Ramano spektroskopijos metodu. Spektrai buvo registruoti RamanFlex 400 spektrometru, naudojant 785 nm žadinančią spinduliuotę. Eksperimentai buvo atliekami in-situ vandeniniame tirpale (0,1 M Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> + 0,01 M fosfato buferis, pH 7,0), esant kontroliuojamam elektrodo potencialui.

Paviršiaus sustiprinti Ramano sklaidos spektrai, esant skirtingiems elektrodo potencialams, pateikti 1 pav. Spektrai rodo, kad monosluoksnis yra stabilus potencialų srityje nuo 0,40 iki -1,10 V. Plati žemo dažnio juosta ties 279-283 cm<sup>-1</sup> susijusi su metalas-ligandas valentiniu virpesiu [2]. Šios juostos buvimas vienareikšmiškai įrodo, kad fazių riboje susidaro kovalentinis Au-S ryšys, kuris nenutrūksta elektrodo potencialui pasiekus -1,10 V.



1 pav. Paviršiaus sustiprinti Ramano sklaidos spektrai nuo Au elektrodo modifikuoto MOPHE monosluoksniu, esant skirtingiems elektrodo potencialams.

Galinės fenilo grupės virpesinės juostos matosi ties 622 (F6b), 1003 (F12), 1203 (F7a), 1295 (F14), ir 1603 cm<sup>-1</sup> (F8a) [3]. Fenilo žiedo juostų dažnio priklausomybės nuo elektrodo potencialo parodytos 2 pav. Modų F8b ir F6b dažnis nepriklauso nuo potencialo, tuo tarpu modų F8a ir F12 dažnis didėja neigiamėjant elektrodo potencialui. Matosi, kad fenilo virpesinės juostos F8a dažnis labiausiai jautrus potencialo pokyčiams, nustatyta artima tiesinei priklausomybė. Taigi F8a moda gali būti naudojama, siekiant virpesinės spektroskopijos metodais įvertinti potencialo pokyčius sunkiai tiriamose sistemose, pavyzdžiui biomembranose.



2 pav. Fenilo žiedo juostų (a) F8a, (b) F8b, (c) F12 ir (d) F6b dažnio priklausomybė nuo elektrodo potencialo.

Reikšminiai žodžiai: potencialas, savitvarkis monosluoksnis, paviršiaus sustiprinta Ramano spektroskopija, fenilo žiedas.

- M. Kažemėkaitė, A. Bulovas, V. Smirnovas, G. Niaura, E. Butkus, and V. Razumas. Tetrahedron Lett. 42, 7691 (2001).
- [2] S. Bloxham, O. Eicher-Lorka, R. Jakubénas, and G. Niaura, Chemija. 13, 4 (2002).
- [3] E. Proniewicz, D. Skoluba, I. Ignatjev, G. Niaura, D. Sobolewski, A. Prahl, and L. M. Proniewicz, J. Raman Spectrosc. 44, 655 (2013).

### Amiloido-β fibrilių formavimasis ant biologinių paviršių

# Formation of Amyloid-β Fibrils at Biological Surfaces

Simona Strazdaitė<sup>1</sup>, Rima Budvytytė<sup>2</sup>, Edvinas Navakauskas<sup>1</sup>, Ilja Ignatjev<sup>1</sup>, Gintaras Valinčius<sup>2</sup>, Gediminas Niaura<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas Gyvybės mokslų centras, Saulėtekio al. 7, 10223 Vilnius

simona.strazdaite@ftmc.lt

Amiloido fibrilių formavimasis ląstelėse ir/arba tarplasteliniame tinkle iš pirminių netvarkių baltymų yra siejamas su daugiau nei 30 skirtingomis klinikinėmis ligomis: Alzheimerio liga, Parkinsono liga, II tipo diabetas ir kitos [1]. Šiame darbe pagrindinį dėmesį skiriame amiloido-β (Aβ) peptidui, kuris manoma yra Alzheimerio ligos pirmtakas. Aß peptidas agreguojasi sudarydamas įvairaus dydžio struktūras - tirpius, nedidelius iš kelių peptido monomerų sudarytus oligomerus, o vėliau ir didesnes netirpias polimerines fibriles. Šie agregatai kaupiasi smegenyse ir sukelia uždegiminius procesus, ląstelių žūtį ir audinių degradaciją. Vienas centrinių šių procesų reiškinių molekuliniame lygyje yra amiloidiniu dariniu saveika su fosfolipidiniu dvisluoksniu. Būtent dėl šios priežasties ypatingai svarbu suprasti, kaip Aβ peptidas ir skirtingos jo struktūros sąveikauja su ląstelės membrana. Ši sąveika manoma, veikia agregacijos procesa, todėl svarbu žinoti, kokia yra agregatų molekulinė struktūra ir kaip tie agregatai orientuojasi ant membranos paviršiaus. Tam, kad galėtume atsakyti į šiuos klausimus, reikalingas paviršiui jautrus spektroskopinis metodas.

Netiesinė virpesinė suminio dažnio generacijos spektroskopija (SDG) yra nepakeičiamas metodas, pasižymintis ypatingu paviršiaus jautrumu, ir įgalinantis virpesinius molekulių paviršiaus tyrimus fazių riboje skystis/oras. Suminio dažnio generacija yra antros eilės netiesinis optinis procesas, kuris galimas tik sistemose, kurios neturi centrinės simetrijos. Suminiam dažniui sugeneruoti naudojami didelės galios ultratrumpi lazerio impulsai, tipiškai vienas derinamo bangos ilgio infraraudonojoje srityje ir kitas regimosios šviesos impulsas (1 pav. a). Suminis dažnis generuojasi, kai abu impulsai persikloja laike ir erdvėje ant paviršiaus, ir infraraudonosios spinduliuotės dažnis sutampa su molekulės virpesiniu tiriamos dažniu. SDG spektroskopija taip pat gali būti naudojama gauti unikalią informacija apie paviršinių molekulių chirališkumą. Iš chiralinių SDG spektrų galima vienareikšmiškai nustatyti baltymo ar agregatų antrinę struktūrą [2].

1 pav. b) pateiktas Aβ fibrilių 10  $\mu$ M koncentracijos pH 8 fazių riboje skystis/oras SDG spektras. Aβ42 fibrilių spektre ties 2880 cm<sup>-1</sup> ir 2950 cm<sup>-1</sup> matomos siauros linijos, priskiriamos baltymų aminorūgščių šoninėms alifatinėms grupėms: CH<sub>2</sub> ir CH<sub>3</sub> valentiniams virpesiams atitinkamai. Taip pat spektre matoma intensyvi juosta ties 3200 cm<sup>-1</sup>, kuri atitinka stipresnius vandenilinius ryšius sudarančią koordinuotą tetraedrinę vandens struktūrą. Ši juosta gali būti priskiriama vandens molekulėms solvatiniame apvalkale, kurios stipriai sąveikauja su šoninėmis baltymo grupėmis arba vandens molekulėms lokalizuotoms vidinėje fibrilių ertmėje. Dėl interferencijos kai kurios juostos SDG spektre matomos ne kaip juostos, o kaip įdubimai. Aβ42 fibrilių spektre matomi keletas įdubimų, susijusių su baltymo virpesiais: aromatinis C-H virpesys ties ~3060 cm<sup>-1</sup> ir ne toks ryškus N-H valentinis virpesys ties ~3300 – 3350 cm<sup>-1</sup>.

l pav. c) ir d) pavaizduoti chiraliniai spektrai N-H virpesių srityje ir amido srityje atitinkamai. N-H srityje nematyti virpesinės juostos, o amido srityje matoma juosta ties ~1620 cm<sup>-1</sup>. Iš tokio juostų pasiskirstymo [2] galima pasakyti, kad A $\beta$ 42 fibrilės sudarytos iš lygiagrečių  $\beta$  klosčių.

Tolesniuose tyrimuose aiškinsimės, kaip pasikeičia Aβ baltymo ir jo agregatų struktūra sąveikaujant su modelinėmis fosfolipidinėmis membranomis, pavyzdžiui, DPPC (dioleoilfosfatidilcholinas) ir kitomis.



1 pav. a) Principinė SDG schema; b) SDG spektras A $\beta$  fibrilių 10  $\mu$ M koncentracijos pH 8 tirpalo fazių riboje su oru 2800 – 3800 cm<sup>-1</sup> srityje ; c) chiralinis SDG spektras NH virpesių srityje ir d) amido srityje.

*Reikšminiai žodžiai: Amiloidas-β, fibrilės, suminio dažnio generacija, paviršiaus spektroskopija* 

- [1] H. J. Dyson and P. E. Wright, Nat. Rev. Mol. Cell Biol. 6, 197 208 (2005).
- [2] E. C. Yan, Z. Wang, and L. Fu, J. Phys. Chem. B 119, 2769 2785 (2015).

#### Ozono interferencijos tyrimas gyvsidabrio halogenidų atmosferos ore matavimuose

# Investigation of ozone interference for the detection of mercury halides in the atmospheric air

Andriejus Urba<sup>1</sup>, Darius Valiulis<sup>1</sup>, Jonas Šarlauskas<sup>2</sup>, Jelena Tamulienė<sup>3</sup>, Evaldas Naujalis<sup>1</sup> <sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius <sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Biochemijos institutas, Saulėtekio al. 7, LT-10257 Vilnius <sup>3</sup>Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius andriejus.urba@ftmc.lt

Pastaraisiais metais gyvsidabrio aplinkoje tyrimų tematika išgyvena naują pakilimą, nes, nepaisant per 20 metų daugiau nei dvigubai sumažintų pramoninių gyvsidabrio emisijų išsivysčiusiose šalyse, pastarąjį dešimtmetį stebimos naujos metilo gyvsidario didėjimo tendencijos tiek jūrinėse, tiek ir gėlavandenėse žuvyse, įskaitant ir Europą [1].

Oksiduotosios gyvsidabrio formos, o tai yra visų pirma gyvsidabrio halogenidai HgCl2 ir HgBr2 svarbiausios gyvsidabrio globalios apykaitos požiūriu ir toksiškiausios dujinio gyvsidabrio formos atmosferos ore, tačiau būdo jas patikimai matuoti iki šiol nėra. Pagrindinė problema yra drėgmės ir ozono interferencija, kuri trukdo kiekybiškai sukaupti oksiduotąsias gyvsidabrio formas automatiniame metode naudojamais kietais sorbentais, tokiais kaip kalio chlorido sorbentu, taip pat ir kitais bandytais sorbentais. Mes pasiūlėme ir išbandėme cirkonio dioksido sorbentą. Pastarasis puikiai adsorbuoja gyvsidabrio halogenidus, praleidžia elementini gyvsidabrį ir visai nereaguoja į drėgmę, tačiau ozono interferencija vis dar išliko. Tai reiškia, kad cirkonio dioksido paviršiuje adsorbuotos gyvsidabrio halogenidų molekulės reaguoja su atmosferos ozonu ir bandinys yra prarandamas elementinio gyvsidabrio pavidalu.

Ozono interferencijos mechanizmas ir jį lemiančios cheminės reakcijos iki šiol nėra žinomos. Šiuos mechanizmus supratus, būtų galima efektyviau ieškoti būdų kaip interferencijos išvengti. [2] pasiūlė reakciją:

(1) 
$$\operatorname{HgCl}_{2(ad)} + 2O_{3(g)} \rightarrow \operatorname{Hg}(g) + 2O_{2(g)} + ClO_{(g)}$$
,

tačiau nenurodė mechanizmo kaip ši reakcija galėtų vykti ir jos nepatvirtino eksperimentiškai. Šios paviršiuje vykstančios reakcijos eksperimentinio bandymo iššūkis – labai mažas reaktantų kiekis (pikogramų eilės). Mes siūlome kitą reakciją:

(2) HgCl<sub>2(ad)</sub> +O<sub>3(g)</sub> 
$$\rightarrow$$
 Hg<sub>(g)</sub>+ O<sub>2(g)</sub> + Cl<sub>2</sub>O<sub>(g)</sub>

Tokios reakcijos galimybė išnagrinėta atlikus struktūrinį modeliavimą (panaudotas DFT metodas (density functional theory), Gaussian programa). Modeliavimo pagrindinės išvados tokios:

Pasiūlyta (2) cheminė reakcija dujinėje fazėje yra egzoterminė ir gali vykti savaime esant įprastoms aplinkos sąlygoms. Ši reakcija vyksta keliom pakopom, pavaizduotom 1 pav. Modeliavimo metu nustatyta, kad ZrO<sub>2</sub> ir O<sub>3</sub> molekulės veikia kaip katalizatoriai sumažindamos reakcijos aktyvacijos energiją. Ši energija mažėja didėjant ozono koncentracijai.



Žaliai pavaizduoti Cl atomai, raudonai – deguonies, pilkai ir geltonai – Hg atomai. Pasiūlyta gyvsidabrio chlorido ir ozono reakcijos eiga. Reakcija vyksta praeinant kelias tarpines pakopas, kol galiausiai susidaro stabilūs reakcijos produktai.

Išvada: pasiūlyta ozono ir gyvsidabrio chlorido reakcija gali vykti įprastinėmis aplinkos salygomis tiek ore, tiek prie ZrO<sub>2</sub> paviršiaus, ZrO<sub>2</sub> ir ozonui veikiant kaip katalizatoriams (didėjant ozono koncentracijai katalitinis aktyvumas didėja). Pranešime aprašytas būdas, kaip tokią reakcijos eigą pativirtinti eksperimentiniu būdu.

Reikšminiai žodžiai: gyvsidabris, ozonas, atmosfera, tarša

- Drevnick Paul E., Carl H. Lamborg and Martin J. Horgan, Increase in mercury in Pacific yellowfin tuna. Environmental Toxicology and Chemistry, Vol. 34, No. 4, pp. 931–934, 2015.
- [2] Lyman, S.N., Jaffe, D.A., Gustin, M.S., 2010. Release of mercury halides from KCl denuders in the presence of ozone. Atmos. Chem. Phys., 10, 8197–8204.
- [3] Urba A., D. Valiulis, J. Šarlauskas, K. Kvietkus, J. Šakalys, A. Selskis. A pilot study of different materials applied for active sampling of gaseous oxidized mercury in the atmospheric air. Atmospheric Pollution Research, 8 (2017) 791-799.

# Stendinė sesija S2

Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos Nanomokslas ir nanotechnologijos

# Struktūrinių pokyčių lantano molibdato vandeniniuose mišiniuose tyrimas naudojant Ramano spektroskopijos metodą

# Structural changes in lanthanum molybdate aqueous mixtures using Raman spectroscopy method

Artūras Žalga<sup>1</sup>, Paulius Normantas<sup>2</sup>, Martynas Smolianskis<sup>2</sup>, Auksė Naruševičiūtė<sup>2</sup>, Lukas Jočionis<sup>2</sup>,

Edvinas Zacharovas<sup>2</sup>, Jonas Kausteklis<sup>3</sup>, Valdemaras Aleksa<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Naugarduko g. 24, LT-03225, Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>3</sup>Nacionalinis fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

valdemaras.aleksa@ff.vu.lt

Lantano molibdato (LAMOX) aukštatemperatūrinė beta-fazė (β-La<sub>2</sub>Mo<sub>2</sub>O<sub>9</sub>) pasižymi ypač didele deguonies vakansijų koncentracija bei greito (spartaus) joninio laidumo savybėmis, todėl turi potencialų pritaikymą kieto kuro elektrolitinėse celėse (SOFC) kaip kietasis deguonies jonų elektrolitas [1]. Šias savybes patvirtina ženkli LAMOX junginio fotonų sklaida ir žemas jos šiluminis laidumas [2]. Deja, kubinė β-La<sub>2</sub>Mo<sub>2</sub>O<sub>9</sub> fazė stabili tik virš 560 °C, o kambario temperatūroje ji virsta j monoklininę alfa-fazę ( $\alpha$ -La<sub>2</sub>Mo<sub>2</sub>O<sub>9</sub>). Todėl nuo pat šio junginio savitu savybiu atradimo, kuri atliko P. Lacorre su bendraautoriais, daugelio mokslininkų pagrindinė užduotis išlieka β-La2Mo2O9 fazės ir jos padidinto joninio laidumo stabilizavimas kambario temperatūroje. Šiam tikslui įgyvendinti dažniausiai lantanas ar molibdenas dalinai keičiami kitais elementais išlaikant patvaria La<sub>2</sub>Mo<sub>2</sub>O<sub>9</sub> kubine beta-fazės kristaline struktūrą. Tokiai užduočiai atlikti labiausiai tinka vandeninis zolių-gelių sintezės metodas, kurio pagalba atskiri elementai yra sumaišomi pasirinktame tirpiklyje dar atominiame lygmenyje, taip sutrumpinant tiek galutinio daugiakomponenčio oksido formavimosi kelią, tiek kaitinimo temperatūrą. Tokiu būdu atsiranda galimybė tirti įvairių metalų jonų prigimties ir jų frakcijų įtaką galutinių oksidinių fazių šiluminėms savybėms. Be to, šio dvikomponenčio oksido formavimosi ypatumai vaidina lemiamą vaidmenį jo kristalinės struktūros formavimuisi ir sukuriamoms joninio laidumo charakteristikoms. Todėl pradinių sintezės komponentų tarpusavio saveika vandeniniuose tirpaluose, geliacijos proceso eiga ir gautu tarpiniu junginių stabilumo tyrimai yra esminis raktas, kuris atveria plačias galimybes susiformuojančių galutinių keramikinių junginių savitų ypatybių aiškinimui. Tokiu būdu susidariusių junginių ar tarpinių produktų struktūriniai komponentai yra efektyviai nustatomi panaudojant tokius tyrimų metodus kaip Rentgeno spindulių difrakcija (XRD) ir Raman spektroskopija (RS). Žinant tai, jog vandeninių druskų tirpalų analizė nėra paprastas uždavinys, todėl Raman spektroskopija vra galingas irankis detaliai ivertinant vandeninio zolių-gelių metodo geliacijos eigoje vykstančius atskirų funkcinių grupių tarpusavio sąveikos struktūrinius vyksmus bei jų įtaką vandens molekulių koncentracijai. Tiesa, virpesinių modų identifikavimas yra pakankamai komplikuotas, kadangi susiformavusių komponentų

struktūros vra labai sudėtingos. Nepaisant to, vandeniniu lantano molibdato mišiniu (zoliu) Ramano sklaidos spektrų valentinių -OH funkcinių grupių srityje užregistruotų virpesinių juostu virpesiu parametrai suteikia struktūrinės informacijos apie vandeni ir jo molekulių poveikį gautiesiems polimeriniams dariniams. Tokie tyrimai padeda nustatyti dvikomponenčio galutinio  $La_2Mo_2O_9$ oksido susidarymo mechanizma bei optimizuoti esminius sintezės parametrus, kurie nulemia jo galutines fizikines savybes bei leidžia pagrįsti potencialias jo taikymo fundamentiniu, tiek pramoniniu galimybes tiek aspektais.

Šiame darbe RS metodu analizuojami naujai susintetintų lantano molibdato tartratinių zolių struktūros koncentraciniai pokyčiai vandeniniuose mišiniuose iš Ramano sklaidos spektrų virpesinių juostų parametrų 300-3900 cm<sup>-1</sup> srityje pokyčių (1 pav.).



1 pav. Skirtingų lantano molibdato vandeninių mišinių kietosios (a, d) ir skystosios (b, c) frakcijų Ramano sklaidos spektrai 300-1550 cm<sup>-1</sup> srityje.

*Reikšminiai žodžiai: lantano molibdatas, La*<sub>2</sub>*Mo*<sub>2</sub>*O*<sub>9</sub>, LAMOX, *Ramano sklaidos spektrai* 

- Lacorre P., Goutenoire F. O., Bohnke O., Retoux R. & Laligant Y. Designing fast oxide-ion conductors based on La<sub>2</sub>Mo<sub>2</sub>O<sub>9</sub>. Nature 404, 856–858 (2000). Doi:10.1038/35009069
- [2] Liu W., Pan W., Luo J., Godfrey A., Ou G., Wu H., Zhang W. Suppressed phase transition and giant ionic conductivity in La2Mo2O9 nanowires. Nat. Commun. 6:8354. (2015). Doi: 10.1038/ncomms9354

#### Priešįtampio įtaka bismuto cirkonato plonų sluoksnių savybėms

#### Bias influence on the properties of bismuth zirconate thin films

Gytis Banevičius, Aleksandras Iljinas

Kauno Technologijos Universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas gytis.banevicius@ktu.edu

Įvairios paskirties plonos dangos yra visų šiuolaikinių aukštųjų technologijų pagrindas. Jos naudojamos kompiuteriuose, sumaniuose įrenginiuose, saulės elementuose, lęšių optinių savybių gerinimui ir selektyviųjų langų gamyboje. Plonų dangų nusodinimui naudojami daug įvairiais fizikiniais reiškiniais veikiantys metodai, kuriuos sąlyginai galima suskirstyti į cheminius ir fizikinius nusodinimo metodus. Plačiausiai naudojami cheminio nusodinimo metodai: tai cheminis nusodinimas iš garų fazės ir įvairūs zolių-gelių nusodinimo metodai. Iš fizikinių metodų galima išskirti fizikinį nusodinimą iš garų fazės ir įvairius medžiagos dulkinimo metodus.

Reaktyvinis magnetroninis dulkinimas - vienas plačiausiai naudojamų fizikinių dangų auginimo metodų. Šiuo metodu galima užauginti ant įvairių padėklų (stiklas, plienas, silicis, plastikas) praktiškai visų kietų medžiagų oksidų dangas. Keičiant proceso parametrus: plazmos išlydžio galią, padėklo temperatūra, priešįtampį, deguonies ir argono dujų santykį dangos augimo metu galima gauti skirtingų fazių, struktūrų ir morfologijos dangas, kurios labai skirsis viena nuo kitos savo fizikinėmis ir cheminėmis savybėmis. Tas savybes galima keisti siekiant norimų savybių arba jų derinio optimizavimo. Nuo to priklauso kam gali būti naudojamos šios dangos. Ar kaip elektrinės dangos: dielektrikai, puslaidininkiai, ar kaip mechaninės: kietinančioji danga, antifrikcinė, arba atsparios korozijai ir cheminiams reagentams.

Šiame tyrime bismuto cirkonato plonos dangos buvo nusodinamos reaktyvinio magnetroninio nusodinimo metodu tik deguonies (1 Pa) aplinkoje, naudojant du magnetronus, kurių taikiniai buvo bismutas ir cirkonis atitinkamai. Dangos buvo auginamos naudojant teigiamą ir neigiamą 30 V bei impulsinį +30 V padėklo priešįtampius.

Bismuto cirkonatas yra mažai tyrinėta medžiaga. Tikėtina, kad paviršių padengus bismuto cirkonatu, reaktyvinio magnetroninio dulkinimo metodu, jis taptų didelio joninio laidumo, atsparia mechaniniams pažeidimams, dielektrine danga. Taip pat tikėtina, kad pastovaus ir impulsinio priešįtampio panaudojimas dulkinimo metu gali pagerinti dangos savybes. Darbe buvo tirta priešįtampio įtaka dangų morfologinėms, struktūrinėms ir optinėms savybėms. Užaugintų bandinių morfologija analizuota skenuojančiu elektronu mikroskopu. Cheminė sudėtis ištirta rentgeno spindulių energijos dispersijos spektrometrija. Kristalografinės sluoksnių struktūros nustatytos rentgeno spindulių difrakcijos metodu. Optinėms savybėms įvertinti buvo išmatuoti pralaidumo ir atspindžio spektrai UV-VIS-NIR spektrometru, kurie leido naudojant Tauco metodą apskaičiuoti optinės draustinės juostos plotį (1 pav.).



1pav. Bismuto cirkonato dangų Tauco grafikas

Teigiamas priešįtampis padidina draustinės juostos plotį, o panaudojus neigiamą priešįtampį draustinės juostos plotis nesikeičia nuo dangų užaugintų be priešįtampio. Visų užaugintų dangų paviršiai yra labai lygūs (2 pav.).



2 pav. Bismuto cirkonato dangos užaugintos su impulsiniu + 30 V priešįtampiu SEM nuotrauka.

Reikšminiai žodžiai: bismuto cirkonatas, reaktyvinis magnetroninis dulkinimas, priešįtampis.

### Nanostruktūrizuotos platinos elektrodai - vandenilio peroksido detekcijai

# Nanostructured Platinum Electrode Platform for Detection of Hydrogen Peroxide

<u>Aušra Baradokė</u><sup>1</sup>, Ignas Masilionis, Jurga Juodkazytė<sup>2</sup>, Rasa Pauliukaitė<sup>1</sup>, Ramūnas Valiokas<sup>1</sup> <sup>1</sup>Nanoinžinerijos skyrius, Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr.

231, LT-02300 Vilnius, Lietuva

<sup>2</sup>Elektrocheminės medžiagotyros skyrius, Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 5, LT-10221 Vilnius, Lietuva

ausra.baradoke@ftmc.lt

Elektrochemija yra daug žadantis ateities metodas greitai vėžio diagnostikai [1]. Elektrochemiškai aktyvios medžiagos gali būti taikomos reaktyvių deguonies formų (pvz.  $H_2O_2$ ), kaip vieno pagrindinių metabolitų vėžinėse ląstelėse, tyrimams. Platina pasižymi itin dideliu jautriu vandenilio peroksidui ir gali būti naudojama žemų koncentracijų  $H_2O_2$  detekcijai [2]. Vis dėl to, jutiklių gamyba žemų koncentracijų metabolitų detekcijai yra vis dar nemažas iššūkis, reikalaujantis didelio jautrio mikro-/nanostruktūrų.

Platinos mikroelektrodas kaip lustinis jutiklis buvo pagamintas, naudojant mikro kontaktinio anspaudavimo (angl. micro contact printing  $\mu$ CP) metodą. Savitvarkių molekulių sluoksnis kaip rezistas buvo padengtas ant švaraus 20 nm storio aukso naudojant PDMS struktūrizuotą spaudą. 40 µm pločio aukso linijos buvo išėsdintos naudojant cheminio ėsdinimo metodą. Jutiklis vandenilio peroksidui buvo suformuotas, po to kai nanostruktūrizuota platina buvo padengta ant ėsdintų aukso struktūrų elektrocheminio nusodinimo metodu.

Skenuojantis elektronų mikroskopas (SEM) su Rentgeno spindulių dispersinės analizės (EDX) ir atominių jėgų mikroskopas buvo naudojamas morfologiniams struktūrų tyrimams.

Nanostruktūrizuotos platinos elektrodo charasteristikoms ir jautriui vandenilio peroksidui analizuoti buvo naudojami elektrocheminiai metodai: ciklinė voltamperometrija ir chrono amperometrija. Šiame darbe mes parodėme, kad suformuota homogeniška, nanostruktūrizuota platina dėl didelio elektrochemiškai aktyvaus paviršiaus ploto yra daug žadanti vandenilio peroksido detekcijai, kuris gali būti taikomas ląstelių tyrimuose. Gauti rezultatai bus diskutuojami prezentacijos metu.



 pav. A- SEM mikrografa, po platinos nusodinimo ant kas antros 40 μm pločio periodinės ėsdino aukso struktūros, B- EDX mikrografa, raudona-aukso zona, žalia- nusodintos platinos zona.

Reikšminiai žodžiai: µCP elektrodų gamyba, nanostruktūrizuota platina, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> detekcija

- [1] S. Raha, B. H Robinson, Trends Biochem. Sci., 10, 502-508 (2000).
- [2] B. Rismetova, T. A. Ivandinia, E. S. Y. Einagab, Diamond and Relat. Material., 18, 88-95 (2014).
- [3] M. Gavutis, V. Navikas, T. Rakickas, Š. Vaitekonis and R. Valiokas, J. Micromech. Microeng., 26, 025016-025027 (2016).

# Šiluma aktyvuojamos uždelstosios fluorescencijos valdymas trifeniltriazino-karbazolo junginiuose

# Tuning of TADF properties of triphenyltriazine-carbazole derivatives

D. Banevičius<sup>1</sup>, P. Imbrasas<sup>1</sup>, T. Bučiūnas<sup>1</sup>, P. Baronas<sup>1</sup>, T. Matulaitis<sup>2</sup>, N. A. Kukhta<sup>2</sup>, J. V. Gražulevičius<sup>2</sup>,

K. Kazlauskas<sup>1</sup>, S. Juršėnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Applied Research, Vilnius University, Sauletekio 9-III, LT-10222 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Department of Polymer Chemistry and Technology, Kaunas University of Technology, Radvilenu pl. 19, LT-50254,

Kaunas, Lithuania

<u>dovydas@fidi.lt</u>

Organic light emitting diodes, OLEDs, are undergoing a breakthrough due to a recent discovery of a novel emission mechanism employing delayed fluorescence generated by thermal activation (TADF) allowing to reach 100% internal efficiency without implementing heavy metal atoms in emitter molecules [1], [2].

In the present study, the ability to control the delayed fluorescence properties of donor-acceptor triazinetriphenyl-carbazole derivatives as a function of varying para (**TpCZ**) or meta (**TmCZ**) position of carbazole substituents was investigated. DFT calculations revealed twisted molecular conformations (see Figure 1) for both compounds resulting in a substantial charge transfer (CT) character, and thus in a small singlet-triplet energy gap  $(\Delta E_{S-T}) - a$  key requirement for efficient TADF process. Investigation of singlet and triplet spectra revealed  $\Delta E_{S-T}$  of 0.21 eV and 0.13 eV for **TpCZ** and **TmCZ**, respectively.

Highly sensitive photoluminescence measurements allowed an in-depth study of the delayed fluorescence and its temperature dependence. Figure 1 shows luminescence transients of both derivatives. Although, **TpCZ** shows higher fluorescence efficiency, the contribution of delayed fluorescence is much smaller as compared to that of **TmCZ** emission, which mostly originates from TADF. Furthermore, temperature dependent measurements allowed to estimate activation energies  $E_A$  for the TADF process, which were found to be 0.20 eV and 0.07 eV for **TpCZ** and **TmCZ**, respectively.



Figure 1. Intensity decay transients of TADF emitters **TpCZ** (filled) and **TmCZ** (empty) as well as chemical structures of both compounds.

Since **TmCZ** showed much more prominent delayed fluorescence, it was chosen as an emitter for the fabrication of TADF OLED. The device structure was as follows: [ITO/m-MTDATA (10 nm)/NPB (15 nm)/mCP (10 nm)/5wt%-**TmCZ**:DPEPO (20 nm)/TPBi (45 nm)/LiF (0.8 nm)/Al (100 nm)], where m-MTDATA, NPB, mCP were used as hole injection and transport, hole transport, hole transport and exciton blocking layers, respectively. TPBi and LiF were used as electron transport and injection layers, respectively.

The device displayed electroluminescence (EL) spectra similar to the corresponding photoluminescence (PL) spectra of **TmCZ**, confirming that EL emission was generated from **TmCZ** via the same radiative decay process as in PL. The EL emission spectrum peak was found to be at 475 nm and the CIE color coordinates were calculated to be (0.16, 0.23), corresponding to a sky-blue emission color. The turn-on voltage of the OLED was found to be in the range of 5-6 V. The maximal obtained EQE for the device was 9.5%. The EQE and luminous efficacy versus current density as well as PL and EL spectra are shown in Figure 2.



Figure 2. EQE and luminous efficacy as a function of current density of the **TmCZ** OLED and the PL and EL spectra of **TmCZ**:DPEPO (dashed) and **TmCZ** OLED (solid), respectively (inset).

*Keywords: OLED, thermally activated delayed fluorescence* 

#### References

[1] Uoyama, H., Goushi, K., Shizu, K., Nomura, H. & Adachi, C. *Nature*, 2012, **492**, 234.

[2] Dias, F. B. et al. Adv. Mater., 2013, 25, 3707.

#### Multiferoiko švino ferito sintezė reaktyviojo magnetroninio nusodinimo metodu ir tyrimas

# Investigation and synthesis of multiferroic lead ferrite by reactive magnetron sputtering

Benas Beklešovas, Vytautas Stankus

Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT – 51368, Kaunas benas.beklesovas@ktu.edu

Multiferoikai – tai medžiagos pasižyminčios keliomis pirminėmis ferojinėmis savybėmis pvz., feroelektrinėmis ir feromagnetinėmis [1]. Šios savybės suteikia galimybę feroelektrinį reiškinį reguliuoti išoriniu magnetiniu lauku ir atvirkščiai, dėl to multiferojinės medžiagos laikomos puikiomis kandidatėmis magnetinių operatyviųjų atminčių, įvairių naujo tipo jutiklių gamyboje. Viena iš tokių medžiagų – švino feritas Pb<sub>2</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (PFO) [2].

Multiferojines struktūras galima formuoti įvairiais būdais – zolio-gelio metodu, cheminiu garų nusodinimu, cheminėmis tirpalų reakcijomis [3]. Atsižvelgiant į formuojamos struktūros tipą parenkamas metodas, šiuo atveju plonasluoksnės dangos visada pasižymėjo įdomiomis savybėmis, o vienas geriausių plonų dangų sintezės metodų yra reaktyvusis magnetroninis nusodinimas. Dėl sintezės metu naudojamo aukšto vakuumo, didelės temperatūros ir *in situ* sintezės metodo formuojamos dangos gaunamos labai kokybiškos.

Dangos buvo formuojamos ant platinuoto silicio padėklo Pt/Ti/SiO<sub>2</sub>/Si, kur atitinkamai storiai: 200 nm, 20 nm, 1 µm, 380 µm. Parinktas padėklo temperatūru intervalas siekė nuo 500 °C iki 600 °C, tyrimai parodė, kad esant žemesnėms padėklo temperatūroms nei 500 °C fazės nesusiformavo. Maksimali PFO padėklo temperatūra buvo apribota ties 600 °C norint išvengti švino desorbcijos. Dangos buvo formuojamos naudojant 3 magnetronų sistemą (kiekvienas magnetronas atskiram elementui) su plokščiaisiais, disko formos švino, geležies bei titano (naudojamas pasluoksniui) katodais, kurių grynumas siekia 99,95 %. Ant platinos elektrodo argono aplinkoje, kai darbinis slėgis 1,3 Pa ir esant 750 °C temperatūrai buvo suformuotas padėklo titano pasluoksnis, kurio storis siekia iki 10 nm. PFO danga buvo formuojama 3 temperatūros taškuose: 500 °C, 550 °C ir 600 °C, deguonies aplinkoje, kai darbinis slėgis 1,3 Pa, 1 valanda (1 lentelėje pateikiami magnetronų parametrai).

1	1 . 1.	å ·	•	1		
	lentele	Svino.	1r	geležies	magnetronu	narametra
1	ientere.	0 vino	11	gelezies	magnetrong	paramenai

Parametras	Švino katodas	Geležies katodas
Išlydžio srovė, (A)	0,38	2,00
Išlydžio įtampa, (V)	293,00	275,00

Dangos suformuotos parinktame temperatūrų intervale pasižymėjo feroelektrinėmis savybėmis. Geriausius parametrus demonstravo danga nusodinta esant 500 °C padėklo temperatūrai. Iš pateikto histerezių šeimos grafiko buvo nustatytas liekamasis poliarizuotumas  $P_r$ , kuris siekia ~54  $\mu$ C/cm<sup>2</sup>, o koercinio lauko  $E_c$  vertė ~68,6 kV/cm, kai išorinio elektrinio lauko stipris siekė 12,5 V, o dažnis 50 Hz (žr. 1 pav.). Kituose bandiniuose buvo pastebėtas dėsningas feroelektrinių savybių prastėjimas: kai sintezės temperatūra buvo 550 °C - P<sub>r</sub> ~49,6 µC/cm<sup>2</sup>, o E<sub>c</sub> ~42,9 kV/cm, o dangoje nusodintoje esant 600 °C temperatūrai - P<sub>r</sub> ~38 µC/cm<sup>2</sup>, E<sub>c</sub> ~22,6 kV/cm esant tokiems patiems išorinio elektrinio lauko parametrams.



1 pav. PFO nusodinto esant 500 °C padėklo temperatūrai histerezių šeima (išorinio lauko dažnis 50 Hz)

Reikšminiai žodžiai: švino feritas, multiferoikai, plonasluoksnės dangos, reaktyvusis magnetroninis nusodinimas

- Khomskii, D.I., Multiferroics: Different ways to combine magnetism and ferroelectricity. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2006. 306(1): p. 1-8.
- [2] Wang, M. and G. Tan, *Multiferroic properties of Pb2Fe2O5 ceramics*. Materials Research Bulletin, 2011. 46(3): p. 438-441.
- [3] Gil, D.M., et al., Lead nitroprusside: A new precursor for the synthesis of the multiferroic Pb2Fe2O5, an anion-deficient perovskite. Materials Chemistry and Physics, 2013. 141(1): p. 355-361.

#### Ultragarso sklidimo tyrimas PDMS/ZnO kompozituose

### Ultrasonic wave propagation in PDMS with ZnO nanoparticles

Jaroslavas Belovickis<sup>1</sup>, Jan Macutkevic<sup>1</sup>, <u>Vytautas Samulionis</u><sup>1</sup>, Šarūnas Svirskas<sup>1</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup>, Olga Shenderova<sup>2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>International Technology Center, Raleigh, NC 27715, USA

ational Technology Center, Raleign, NC 27715, USA

Vytautas.Samulionis@ff.vu.lt

The integration of nanoparticles within а polymer is widely used to create nanocomposites properties. Polymer with enhanced material nanocomposites attracted based have increasing attention because of their unique properties emerging from the combination of organic and inorganic materials [1]. Our nanocomposite includes polydimethylsiloxane (PDMS) which distinguishes from other organic silicones for its lowest glass-transition temperature (148 K) and good thermal stability, ZnO - a semiconductor with a relatively high longitudinal acoustic wave velocity (6027 m/s).

Investigation of mechanical relaxation over a wide range of temperature in PDMS-ZnO nanocomposites with different concentrations of ZnO nanoparticles (30 nm) (0, 1, 2, 5, 10 %) was performed in order to determine the interaction between the ZnO nanoparticles and PDMS polymer.

Figure 1 shows dependency of acoustic wave attenuation on the concentration of ZnO in the nanocomposite at room temperature. It can be observed from the figure that the height of the loss increases with addition of ZnO. We attribute this dependency to the additional elastic energy dissipation due to wave scattering from the dispersed ZnO particles similarly as it was observed in styrene-butadiene rubber with rigid polystyrene particles [2].



Fig.1. Experimental dependency of ultrasonic attenuation on ZnO content in PDMS nanocomposites

Keywords: PDMS, ZnO, ultrasonic, composites

#### References

[1] L. Bistricic, V. Borjanovic, L. Mikac, V. Dananic, Vib. Spectrosc. 68, 1-10 (2013)

[2] F. Faghihi, N. Mohammadi, M. Haghgoo, J. Polym. Sci., Part B: Polym. Phys. 48, 82-88 (2010)

#### Tarpsluoksninių įtempimų modifikavimas TUnS<sub>2</sub> kristaluose Erbio legiravimu

#### Modification of interlayer stresses in TlInS<sub>2</sub> crystals by Erbium doping

<u>Vytautas Grivickas</u><sup>1</sup>, Vitalijus Bikbajevas<sup>1</sup>, Olga Korolik<sup>2</sup>, and Alexander Mazanik<sup>2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT- 10257 Vilnius <sup>2</sup>Belarusian State University, Physics faculty, Nezalezhnastsi Av.4, 220030 Minsk, Belarus vitalijus,bikbajevas@ff.vu.lt

Thallium based dichalcogenides possess a number of unique optical, photoelectrical and ferroelectric properties due to specificity in their layered structure contrary to the bulk 3D semiconductors. Among the other dichalcogenide compounds  $TlInS_2$  attracted strong attention for promising potential applications [1]. Significant difference of physical parameters measured along the layer planes and normal to them is observed. Interaction between the layers and anisotropy of the crystals is very sensitive to the dislocations and/or planar stacking fault (PSF) defects and impurities accumulated in the region between layers. It has been proposed that in the similar layered crystal  $TlGaSe_2$  a stacking fault occurs about once every four planes on average [2].

This study is an attempt to investigate the changes of the interlayer stresses by doped the  $TlInS_2$  crystal with certain elements. The photoluminescence (PL) reflects peculiarities of electronic collective excitations in semiconductors. In spite of a great body of information about TllnS<sub>2</sub> there is a lack of works devoted to the PL study of such crystals and available data is contradictory. By means of the confocal microscopy which allows measurements on selected position of the layer plane as well as the lateral surface of the sample with changing excitation light polarization in respect to crystallographic axis the measures were carried out in a wide range of temperatures and energies of excitation. Three different experimental geometries were used for PL measurement. The wave-vector of the exciting radiation, **k**, was either parallel (**k** $\parallel$ **c**) or normal (**k** $\perp$ **c**) to the c-axis. In the case of  $\mathbf{k} \perp \mathbf{c}$ , the excitation light polarization could be set to be either parallel  $(\mathbf{E} \| \mathbf{c})$  or normal ( $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$ ) in respect to the **c**-axis while in the **k**||**c** case the polarization is always normal to the c-axis ( $\mathbf{E} \perp$ c). In this case, a configuration of exciting light incidence and polarization were obtained by rotating the sample.

Table 1. Position of PL peaks (in eV) in *TlInS*<sub>2</sub> single crystals for different configurations at 295K

for unfortent comparations at 2951t					
Dopant	klla	$k \perp c$ ,	$k \perp c$ ,		
	<i>к</i> // <i>С</i>	$E \perp c$	E//c		
Undoped	2.403	2.359	2.397		
Er-doped	2.395	2.348	2.384		

The extracted energies of Gaussian PL peaks at RT are outlined in the Table 1. In contrast to the PL of  $TlInS_2$  doped by Ag and B [3] the strong enhancement

due to the *Er* incorporation is clearly detected at all excitation configurations. The PL in *Er* containing sample is typically stronger by a factor of 3-10 at RT while it increases in 10-60 times at low temperatures.

The PL spectra of undoped and Er-doped  $TllnS_2$  measured at low temperature are presented in Fig. 1. They demonstrate a complex structure containing sharp high-energy components. Either of the two spectra was fitting by a set of Gaussian curves each of them suggests its own mechanism of photon emission. As one can see the incorporation of Er into  $TllnS_2$  significantly changes the PL spectrum. Furthermore, the Er doping of the sample enhances the emission intensity in the intrinsic PL band. It can be assumed that Er atoms reduced interlayer stress caused by PSF defects in layered structure.



Fig. 1. PL spectra of undoped and Er-doped  $TlInS_2$ crystal measured at 24 K in the excitation direction  $\mathbf{k} \parallel \mathbf{c}$ . Fitting by a set of Gausslines is given for the Er-doped sample

*Keywords:* TlInS<sub>2</sub>, layered semiconductor crystals, photoluminescence, Erbium doping.

#### Reference

- [1] A. M. Panich, J. Phys.: Condens. Matter 20, 3 (2008).
- [2] D. F. McMorrow, R. A. Cowley, P. D. Hattont, and J. Banys, J. Phys.: Condens. Matter 2, 3699 (1990).
- [3] O. V. Korolik, S. A. D. Kaabi, K. Gulbinas, N. V. Mazanik, N. A. Drozdov, V. Grivickas, J. Luminescence, 187, 507 (2017).

#### Skandžiu legiruotų plonasluoksnių cirkonio oksido dangų formavimas ir tyrimas

#### Formation and investigation of scandium doped zirconia thin films

Simona Vyčaitė, Giedrė Šlepetytė, Kristina Bočkutė, Giedrius Laukaitis

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

Išsivysčiusių ir besivystančių šalių energetikos politikoje vis svarbesnė vieta skiriama atsinaujinančių energijos išteklių plėtrai. Ji laikoma vienu svarbiausių valstybės energetikos politikos prioritetų. Atliekant mokslinius tyrimus vandenilio energetikos kryptyje didelis dėmesys yra kreipiamas į vandenilio kietakūnio oksido elektrolitų kuro elementus (liet. KOKE, angl. SOFC). KOKE sistema yra sudaryta iš trijų pagrindinių komponentų: elektronams laidžių anodo ir katodo, bei tarp jų esančio elektronams nelaidaus komponento elektrolito, kuris apsprendžia KOKE efektyvumą. Ypač didelio mokslinio susidomėjimo sulaukė kietakūnio oksido kuro elementai, kuriuose elektrolitas yra kietos fazės oksidas. Šių elementų darbinė temperatūra siekia 800 - 1200 °C. Didžiausia tokių kuro elementų praktinio panaudojimo problema yra jų aukšta darbinė temperatūra, kuri apriboja medžiagų pasirinkimą, o konstrukcinės metalinės detalės tokioje temperatūroje žymiai greičiau koroduoja. Klasikiniai ir iki šiol daugiausiai naudojami yra kietakūniai oksido kuro elementai su deguonies jonams laidžiu elektrolitu. Pagrindinė medžiaga tokių kuro elementų elektrolitams yra legiruotas cirkonio oksidas ZrO2. Cirkonio oksidas turi tris skirtingas kristalines struktūras: monoklininę, tetragoninę ir kubinę, priklausančias nuo temperatūros. Žemose temperatūrose ZrO<sub>2</sub> turi monoklininę gardelę, faziniai virsmai iš monoklininės į tetragoninę ir iš tetragoninės į kubinę gardelę įvyksta 1170 °C ir 2370 °C atitinkamai. Vis temperatūrose, dėlto, kubinė kristalografinė gardelė, kuri pasižymi aukštu joniniu laidžiu, gali būti stabilizuota žemose temperatūrose cirkonio oksida legiruojant metalų oksidais, tirpiais ZrO<sub>2</sub>. Šios priemaišos padidina deguonies vakansijų skaičių, tuo pačiu, deguonies jonu mobiluma ir jonini laidi. Retieji Žemės elementai, tokie, kaip Ce, Y, Yb, Gd, Sm, ir La, ar kiti metalai, tokie, kaip Ti, Cr, Mn, Ga, In, Bi, yra naudojami papildomam ScSZ legiravimui. Keletas mokslinių tyrimų nustatė, kad KOKE elektrolito mikrostruktūra taip pat turi įtakos faziniam elektrolito stabilumui.

Šio darbo tikslas yra ištirti plonasluoksnių funkcinių 10 mol% skandžiu stabilizuoto ZrO<sub>2</sub> (10ScSZ) ir 10 mol% skandžiu bei 1 mol% aliuminiu stabilizuoto ZrO<sub>2</sub> (10ScSZAl) dangų elektrines ir mikrostruktūros savybes. Dangos buvo formuojamos garinant elektronų spinduliu, skirtingais nusodinimo greičiais (0,2 nm/s, 0,4 nm/s, 0,8 nm/s, 1,2 nm/s ir 1,6 nm/s) naudojant Kurt J. Lesker EB – PVD 75 garinimo sistemą. Norint ištirti skirtingas medžiagos savybes, dangos buvo suformuotos ant skirtingų medžiagų: organinio stiklo (SiO<sub>2</sub>) ir geležies nikelio ir chromo (Fe – Ni – Cr) lydinio (Alloy 600). Suformuotų plonasluoksnių keraminių dangų struktūrinės ir morfologinės savybės buvo tiriamos rentgeno spindulių difraktometru (XRD), rentgeno spindulių energijų dispersijos spektroskopu (EDS), skenuojančiuoju elektronų mikroskopu (SEM). Skandžiu stabilizuoto cirkonio oksido plonų dangų elektrinės savybės ir šių dangų joninis laidumas buvo tiriami impedanso spektroskopijos metodu, esant 0,1 –1,0 MHz dažnių ir 200 °C –600 °C temperatūros riboms.

Nustatyta, kad, didėjant garinimo greičiui, didėja ir dangų šiurkštumas. Šiurkščiausios abiejų medžiagų dangos, gautos esant 1,2 nm/s garinimo greičiui. Esant tokiam greičiui, 10ScSZAl bandinių linijinis šiurkštumas yra 4,0 nm, o 10ScSZ – 4,3 nm. Taip pat pastebėta, kad bandiniai, kurių sudėtyje yra aliuminio priemaišų yra mažiau šiurkštūs nei bandiniai be aliuminio.

Atliekant mikromechaninių savybių tyrimą, buvo gautas Vikers'o kietumas, iš kurio nustatyta, jog dangos su aliuminio priemaiša yra kietesnės už dangas be aliuminio. Skandžiu ir aliuminiu stabilizuoto cirkonio oksido Vikers'o kietumas svyruoja nuo 639 iki 740 MPa ir didėja, didėjant dangos nusodinimo greičiui. Tuo tarpu tik skandžiu stabilizuoto cirkonio oksido kietumas yra nuo 472 MPa iki 657 MPa. Didžiausiu kietumu (740 MPa) ScSZAI dangos pasižymi, esant didžiasiam, t.y. 1,6 nm/s, garinimo greičiui, o ScSZ (657 MPa) esant 1,2 nm/s greičiui.

Nustatyta, kad joninis laidumas yra didesnis  $ZrO_2$ stabilizuotam 10 mol%  $Sc_2O_3$  ir 1 mol% Al, nei vien tik stabilizuotam 10 mol %  $Sc_2O_3$ . Papildomai aliuminiu legiruotose dangose joninis laidumas 600 °C kinta nuo 0,163 S/m iki 0,454 S/m ir didėja, didėjant nusodinimo greičiui. Taip pat nustatyta, kad esant 1 mol% Al, kristalitai susidaro mažesni. Pastebėta, kad joninis laidumas priklauso nuo kristalitų dydžio, temperatūros, priemaišinių elementų, jų koncentracijos, sudarant elektrolitines dangas garinant elektronų spinduliu, ir nuo sudarymo greičio. Aktyvacijos energija mažesnė taip pat elektrolitui su 1 mol% Al. Taigi, galime teigti, kad  $ZrO_2$ legiravimas papildomai 1 mol% aliuminiu pagerina jo elektrines savybes.

Reikšminiai žodžiai: stabilizuotas cirkonis, mikrostruktūra, kubinė cirkonio oksido fazė, plonasluoksnės dangos.

# Nuo kambario temperatūros fosforescencijos iki šiluma aktyvuojamos uždelstosios fluorescencijos pirimidinų - karbazolų dariniuose

# The conversion of room temperature phosphorescence towards thermally activated delayed fluorescence in carbazole – pyrimidine compounds

<u>Tadas Bučiūnas</u><sup>1</sup>, Tomas Serevičius<sup>1</sup>, Saulius Juršėnas<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universiteto Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius <u>tadas.buciunas@gmail.com</u>

Organinių technologijų tobulėjimas sukėlė perversmą optoelektronikos srityje. Viena sparčiausiai besivystančių krypčių yra organiniai šviesą spinduliuojantys diodai (angl., OLED) [1]. Siekiant užtikrinti efektyvią šviestukų veiką, būtina realizuoti tripletinių energijos lygmenų indėlį. Tai pasiekiama fosforescenciniuose ir šiluma aktyvuojamos uždelstosios fluorescencijos (angl., TADF) vyksmus demonstruojančiuose prietaisuose [2,3]. Šiame darbe nagrinėjami donor-akceptoriniai pirimidinų ir karbazolų dariniai, su skirtingo poliškumo pakaitais. Analizės metu siekiama užtikrinti perėjimo nuo kambario temperatūros fosforescencijos iki šiluma aktyvuojamos uždelstosios fluorescencijos valdymą ir įvertinti svarbiausius kinetinius ir spektrinius parametrus.



 pav. Analizuojamų pirimidinų ir karbazolų darinių fotoliuminescencijos spektriniai skirstiniai ZEONEX (kairėje) ir PMMA(dešinėje) matricose deguonies prisotintoje aplinkoje (juoda spalva) ir pašalinus deguonį (raudona spalva).

Atlikus darinių fotoliuminescencijos dinamikos tyrimą skirtingo poliškumo ir kietumo polimerinėse matricose (PMMA ir ZEONEX) oro ir inertinių dujų aplinkose nustatyti pagrindiniai konversijos tarp fosforescencijos ir TADF vyksmo reikalavimai (1 pav.). Išsiaiškinta, kad efektyvi fosforescencija kambario temperatūroje pasiekiama esant dideliam energijų skirtumui tarp tripletinių ir singuletinių energijos lygmenų (apie 0,5 eV) ir kietai molekulės struktūros konformacijai (1, 2 dariniai). Pašalinus deguonies poveikį registruojamas fosforescencijos signalas kambario temperatūroje. Tuo tarpu, našus TADF vvksmas realizuojamas molekulėse su mažu energijų skirtumu tarp tripletiniu ir singuletiniu būsenu (mažiau nei 0,2 eV) bei leidžiant molekulei patirti torsinius judesius sužadinimo metu (3,4 dariniai). Šiuo atveju fiksuojamas signalo išaugimas ties fluorescencijos spektro smaile pašalinus deguonies nulemtą tripletinių būsenų gesinimą. TADF vyksmo spektrinių ir kinetinių savybių tyrimas skirtingo poliškumo tirpikliuose atskleidė, kad šis vyksmas stipriai priklauso nuo aplinkos poliškumo dėl keičiamos vidujemolekulinės krūvio pernašos energijos lygmens padėties tripletinių energijos lygmenų atžvilgiu. Nustatyta, kad optimizavus molekulės donor-akceptorinės sistemos ir aplinkos poliškumą galima užtikrinti itin efektyvų TADF vyksma.

Taigi, molekulių pakaitų poliškumas ir struktūrinis išsidėstymas bei aplinkos poliškumas ir kietumas lemia fosforescencijos arba TADF vyksmo pasireiškimą.

Reikšminiai žodžiai: šiluma aktyvuojama uždelstoji fluorescencija, fosforescencija, interkombinacinė konversija.

- A. M. Bagher, "OLED display technology," American Journal of Optics and Photonics, 2.3: 32-36, 2014.
- [2] Z. Z. Yang, Z. Mao, Z. Xie, et al, "Recent advances in organic thermally activated delayed fluorescence materials." Chemical Society Reviews, 46.3: 915-1016, 2017.
- [3] S. Hirata, K. Totani, J. Zhang, T. Yamashita, H. Kaji, S. R. Marder, T. Watanabe, C. Adachi, "Efficient Persistent Room Temperature Phosphorescence in Organic Amorphous Materials under Ambient Conditions," Adv. Funct. Mater., 23: 3386–3397, 2013.

# Amorfinių nanokompozitinių anglies dangų formavimas naudojant švino pasluoksnį

#### Synthesis of amorphous nanocomposite carbon films using lead layer as catalyst

Marius Černauskas<sup>1,2</sup>, Liutauras Marcinauskas<sup>2</sup>, Pavels Onufrijevs<sup>3</sup>, Valdas Šablinskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup>Kauno technologijos universitetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas

<sup>3</sup>Riga Technical University, Faculty of Materials Science and Applied Chemistry, P. Valdena 3/7, LV-1048 Riga

marcernauskas@gmail.com

Amorfinės nanokompozitinės anglies dangos ir nanodariniai (nanovamzdeliai, nanokūgiai, fulerenai) dėka savo unikalių savybių yra plačiai taikomi jutiklių gamyboje, elektronikoje, biomedicinoje [1-2]. Dabartiniu metu vykdomi intensyvūs moksliniai tyrimai siekiant gauti naujus metodus ar pagerinti esamas, anglies nanostruktūrų formavimo technologijas. Anglies nanostruktūrų susidarymo procesuose didelį vaidmenį atlieka katalizatoriai, kurie leidžia padidinti cheminių reakcijų greitį, tuo pačiu metu sumažinant proceso vyksmo temperatūrą [3]. Pagrindinis darbo tikslas buvo naudojant plazma aktyvuoto cheminio nusodinimo iš garų fazės metoda iš  $C_2H_2$  plazmos, naudojant švino katalizatorių, suformuoti anglies nanokompozitus bei ivertinti sintezės temperatūros itaką gautų dangu struktūrai.

Formavimui buvo naudotas silicio (100) orientacijos padėklas, ant kurio magnetroniniu dulkinimu buvo nusodintas švino sluoksnis. Švino sluoksnio storis buvo 320-350 nm. Suformuotos švino dangos buvo atkaitinamos vakuuminėje kameroje, 40 Pa slėgio argono dujų atmosferoje, iki dangų formavimo temperatūros. Atkaitinimas ir anglies dangų formavimas buvo atliekamas 500 °C - 750 °C temperatūrų intervale. Amorfinių anglies dangų sintezei naudota acetileno dujų plazma, laikant dujų srautą 0,889 cm<sup>3</sup>/s. PECVD kameros darbinis slėgis kito 40-80 Pa ribose, bandinių priešįtampis buvo -300 V, formavimo laikas 90 s. Suformuotų dangų paviršius buvo tiriamas skenuojančiu elektroniniu (SEM) JEOL JSM6490LV, bei atominės jėgos NT-206 (AFM) mikroskopais. Elementinė sudėtis nustatoma Rentgeno spindulių energijos dispersijos spektrometrija (EDS). Dangų struktūros pokyčiai tirti Elmer) ir mikro-Ramano (RS) FTIR (Perkin spektroskopu (Renishaw inVia) naudojant 514 nm bangos ilgio ir 2 µm skersmens spindulį. Dangų optinės savybės buvo matuotos Gaertner L117 nulio elipsometru.



1 pav. Anglies dangų AFM nuotraukos (520 °C): a) be katalizatoriaus, b) su *Pb* katalizatoriumi.

Atlikti AFM tyrimai parodė, kad formuojant anglies dangą su švino sluoksniu, paviršiuje susiformuoja įvairaus dydžio salelės (1 pav.). Iš dangų AFM paviršiaus nuotraukų matome, kad 520 °C temperatūroje suformuotų dangų šiurkštumas ( $R_a$ ) - 70 ir 93 nm, o vidutinis dalelių aukštis 235 ir 674 nm. Didinant formavimo temperatūrą iki 700 °C, dangų, su *Pb* sluoksniu, šiurkštis sumažėja iki 11 nm. EDS matavimai parodė, kad didėjant formavimo temperatūrai *C/O* koncentracijos santykis dangose mažėja, t.y. deguonies kiekis anglies dangose didėja.





RS analizė parodė, kad visų dangų spektruose stebimos atskiros D ir G smailės. Kuomet dangos formuojamos ant *Si/Pb* padėklų, didinant padėklo temperatūrą nuo 520 °C iki 700 °C, G smailės padėtis slenkasi į mažesnių verčių sritį, o pusplotis padidėja nuo 33 cm<sup>-1</sup> iki 47 cm<sup>-1</sup>. D ir G smailių intensyvumų santykis (I<sub>D</sub>/I<sub>G</sub>) išauga nuo 0,76 iki 0,83. G juostos puspločio padidėjimas ir I<sub>D</sub>/I<sub>G</sub> santykio didėjimas rodo, kad keliant formavimo temperatūrą dangose mažėja struktūrų tvarkingumas ir *sp*<sup>3</sup> hibridizacijos anglies jungčių t.y. susiformuoja daugiau anglies jungčių su deguonimi [1]. RS spektrai parodo, kad galima efektyviai sumažinti  $C=C, C=O, CH_x$  ryšių kiekį dangoje naudojant švino katalizatorius, nors jo aktyvumą riboja susidaręs *PbO<sub>x</sub>*.

*Reikšminiai žodžiai: amorfinės anglies dangos,* nanokompozitai, *nanostruktūros, temperatūra, švinas.* 

- J. Robertson. Diamond-like amorphous carbon. Materials Science and Engineering, 37, 2002, 129–281 p.
- [2] V. Jourdain, C. Bichara. Current understanding of the growth of carbon nanotubes in catalytic chemical vapour deposition // Carbon. 2013. Vol. 58. 2–39 p.
- [3] N. Dwivedi, S. Kumar, H. K. Malik. Role of base pressure on the structural and nano-mechanical properties of metal/diamond-like carbon bilayers // Applied Surface Science. 2013. Vol. 274. 282–287 p.

#### Molecular spectroscopy of ultrathin polymer interfaces

Cordelia Zimmerer<sup>1</sup>, Gediminas Niaura<sup>2,3</sup>, Ieva Matulaitienė<sup>2</sup>, Valdas Sablinskas<sup>3</sup>, Gerald Steiner<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>Leibniz Institute of Polymer Research Dresden, Intitute Polymer Materials, Dresden, Germany,

<sup>2</sup>Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius, Lithuania

<sup>3</sup> Vilnius University, Faculty of Physics, Vilnius, Lithuania

<sup>4</sup> Dresden University of Technology, Faculty of Medicine, Clinical Sensoring and Monitoring, Dresden, Germany

The characterization of the molecular structures of the interphase between two or more different polymers is important as structural variations within interphase influence the stability of the polymer composite. This is in particular true for novel polymer surface modification techniques.

An example of surface modification is the covalent coupling of amines on the surface of bisphenol-A based polycarbonate (PC). PC is a widely used engineering polymer with excellent optical and mechanical properties. However, PC has a hydrophobic surface and is therefore less suitable for biochemical application. A primary amine, octadecylamine (ODA) can be used to modify surfaces of PC in order to alter hydrophobicity, wettability and to further prepare biocompatible surfaces. Due to the diffusion-controlled reaction regime the thickness of the PC - ODA interphase is in the range of a few nanometers. Vibrational spectroscopy, such as infrared (IR) and Raman spectroscopy, has the potential for identification and accurate determination of the molecular structure. Moreover, surface enhances Raman spectroscopy (SERS) allows a very sensitive characterization of the interface, even under in-situ conditions in a nondestructive way. In this case small metal particles have to be incorporated into the interface before the polymers come in reaction.

In this contribution we demonstrate that IR and SER spectroscopy along with the spectroscopic background information is a suitable technique to resolve and to identify reaction products of the PC - ODA interphase.

Briefly, the reaction of PC with ODA is a complex solid state reaction which leads to several reaction products. Experimental IR spectroscopy, performed on several PC – ODA test samples revealed that an interfacial link between both materials is mainly formed by urethane groups. However, beside urethane other reaction products and even degradation products are also formed. SERS was applied to study the reaction under in-situ conditions. The surface enhancement effect enables for the first time to characterize the reaction between both polymers in-situ and without destroying of the material.







Fig. 1 Simplified reaction scheme of PC with ODA.

# Grafeno sluoksnių sintezė ir savybių tyrimas

#### Synthesis and Characterization of Graphene Films

Erika Rajackaitė, Rimantas Gudaitis, Sigitas Tamulevičius

Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas erika.rajackaite@ktu.edu

Grafenas yra sintetinis dvimatis vieno atomo storio kristalas, pasižymintis ypatingomis elektrinėmis, magnetinėmis optinėmis bei termomechaninėmis savybėmis, todėl yra naujos kartos medžiaga galinti pakeisti daugelį kitų įvairiuose pritaikymuose nanoelektronikos srityje.

Grafeno dangų formavimui plačiai naudojamas pažangus mikrobangės plazmos aktyvuoto cheminio nusodinimo iš garų fazės (MW PACVD) metodas. Lanksti technologinių parametrų kontrolė suteikia galimybę suformuoti norimų ypatingų savybių, didelio ploto bei aukštos kokybės grafeno sluoksnius.

Naudoiant mikrobangės plazmos irengini CYRANNUS I-6 buvo suformuotos grafeno dangos ant skirtingų vario padėklų (katalizatorių): komercinės vario folijos bei PVD metodu suformuotos plonos vario dangos ant SiO<sub>2</sub>/Si plokštelės paviršiaus. Sintezės metu buvo naudojamas vandenilio (200 cm3/min) ir metano dujų (25 cm<sup>3</sup>/min) mišinys, kameroje palaikomas 30 mbar slėgis, 1,1 kW mikrobangų galia. Suformuotos grafeno dangos buvo perkeltos nuo laidžios vario folijos (naudojant FeCl2 ėsdiklį) ant skirtingų padėklų: SiO2/Si plokštelės paviršiaus, kvarco padėklo. Grafeno pernešimui nuo užgarintos vario dangos ant minėtų padėklų buvo pritaikyta speciali technologija: ant grafeno paviršiaus suformuojamas PMMA sluoksnis (300 nm storio), išėsdinami SiO2 (vandenilio fluorido rūgšties tirpale) bei Cu (FeCl2 ėsdiklyje) sluoksniai paeiliui, plaunama distiliuotu vandeniu, grafenas su PMMA sluoksniu perkeliamas ant dielektrinio padėklo, kaitinama 130 °C temperatūroje 20 min, ėsdinamas PMMA sluoksnis acetone.

Siekiant išvengti defektų, atsirandančių grafeno pernešimo metu, grafeno dangos buvo sėkmingai užaugintos tiesiogiai ant SiO<sub>2</sub>/Si plokštelės paviršiaus nenaudojant jokio katalizatoriaus.

Dangų struktūra ištirta Ramano spektrometru. Gauti rezultatai patvirtina grafeno prigimtį (1 pav.). Pagal apskaičiuotą G ir 2D smailių intensyvumų santykį  $I_{2D}/I_G$ nustatyta, kad buvo suformuotos vieno bei kelių sluoksnių grafeno dangos. Taip pat atlikti UV-VIS bei FTIR spektroskopiniai matavimai.



1 pav. a) Grafeno, perkelto ant SiO<sub>2</sub>/Si padėklo, Ramano sklaidos spektras; b) ant kvarco perkeltų grafeno sluoksnių, suformuotų tokiomis pačiomis sąlygomis, Ramano sklaidos spektrai



2 pav. Grafeno Nr.3 a) optinės mikroskopijos nuotrauka; b) *I*<sub>2D</sub>/*I*<sub>G</sub> santykio Ramano sklaidos topografinis vaizdas

Reikšminiai žodžiai: grafenas, mikrobange plazma aktyvuotas CVD, Ramano sklaidos spektroskopija.

#### Literatūra

[1] V. Komissarov et al., Beilstein J. Nanotechnol. 8 145-158 (2017).

# Mikrobangų detektoriams skirto epitaksinio puslaidininkinio darinio su dvimačių elektronų dujų sluoksniu fotoliuminescencijos ypatumai

# Photoluminescence peculiarities of epitaxial structure with 2DEG layer designed for microwave detectors

<u>Aurimas Čerškus</u><sup>1,2</sup>, Algirdas Sužiedėlis<sup>1,2</sup>, Andžej Lučun<sup>1</sup>, Maksimas Anbinderis<sup>1</sup>, Česlav Paškevič<sup>1</sup> <sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius <sup>2</sup>Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius aurimas.cerskus@ftmc.lt

Pastaraisiais dešimtmečiais spinduliuotės ir detekcijos technologijos pasistūmėjo nuo infraraudonosios iki terahercų srities. Šis dažnių intervalas turi didžiules taikymo galimybes pačiose įvairiausiose srityse. Tad stengiamasi esamų mikrobangų emiterių ir jutiklių darbinių dažnių juostą praplėsti iki terahercinių verčių.

Mes sukūrėme įvairialyčio darinio struktūrą su dvimatėmis elektronų dujomis ir pasižyminčią geromis detekcijos savybėmis. Šiame pranešime mes pristatysime nuostoviosios ir dinaminės fotoliuminescencijos tyrimo, rezultatus, plačiame temperatūros intervale nuo 3,6 K iki 300 K. Gesimo dinamika tirta naudojant laike koreliuotų pavienių fotonų skaičiavimo metodiką.



1 pav. Fotoliuminescencijos linijų gesimas, esant T = 3,6 K gardelės temperatūrai. Spektrai perstumti vertikaliai geresniam jų išskirimui.

Tiriamas darinys buvo užaugintas molekulinių pluoštelių epitaksijos metodu. Jį sudaro stipriai legiruoto  $(N_{\rm Si} = 4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}) n^+ - \text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  ir nelegiruotų Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As bei GaAs sluoksniai.

Dalis rezultatų pateikta 1 ir 2 paveiksluose. Taip pat pristatysime eksperimentinius rezultatus gautus iš fotoliuminescencijos priklausomybės nuo žadinančios šviesos intensyvumo tyrimo ir detaliau aptarsime spindulinės ir nespindulinės rekombinacijos ypatumus.



2 pav. Lazerio galia P kaip funkcija nuo integruoto fotoliuminescencijos intensyvumo  $I_{FL}$ .

Reikšminiai žodžiai: fotoliuminescencija, spinduliuotės gesimo trukmė, AlGaAs, dvimatės elektronų dujos.

#### Kryžminės poliarizacijos kinetika glicino milteliuose

#### Cross-polarization kinetics in glycine powder

Laurynas Dagys, Vytautas Balevičius Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius laurynas.dagys@ff.vu.lt

Branduoliu magnetinis rezonansas (BMR) daro vis reikšmingesnius proveržius kristalografijos srityje [1]. Nors difrakciniai metodai išlieka vieni patikimiausių, tačiau jie turi savų silpnybių. Bene svarbiausia iš jų, tai atomų, dažniausia vandenilių, tikslios lengvųjų lokalizacijos problema. Dėl šios priežasties BMR tyrimai rado dar vieną taikymo nišą. Kryžminė poliarizacija (CP) yra metodika sukurta ir paprastai naudojama kietojo kūno BMR spektrometrijoje siekiant pagerinti signalo ir triukšmo santykį ir taip paspartinti BMR eksperimentus. Iš kitos pusės, poliarizacijos pernaša yra nulemta sukinių sąveikos, taigi ir medžiagos struktūros. Todėl, per CP kinetiką ir sukinių sąveikos konstantų nagrinėjimą atsiranda galimybė tiesiogiai nustatyti lengvųjų atomų padėtis bei jų dinamiką [2, 3].

Šiame darbe buvo tyrinėjamos  ${}^{1}\text{H} \rightarrow {}^{13}\text{C}$  kryžminės poliarizacijos kinetikos glicino miltelių bandinyje. Matavimai buvo atlikti taikaint magiškojo kampo sukimo (MAS) techniką *Bruker AVANCE III HD* spektrometru 9,4 T magnetiniame lauke, kurį sukuria *Bruker Ascend 400WB* superlaidusis magnetas. Darbo metu atskiroms  ${}^{13}\text{C}$  spektrinėms smailėms buvo užregistruotos skirtingos kinetinės kreivės (1 pav.).



1 pav.  ${}^{1}H\rightarrow{}^{13}C$  kryžminės poliarizacijos kinetikos skirtingiems glicino anglies BMR signalams.

 ${}^{1}\text{H} \rightarrow {}^{13}\text{C}$  poliarizacijos pernaša vykdoma iš protonų posistemės (termodinamine prasme - rezervuaro), kuri, lyginant sukinių temperatūras, yra "šaltesnė", į "karštesnę"  ${}^{13}\text{C}$  sukinių posistemę. Aptiktos skirtingos CP kinetikos skirtingoms cheminėms glicino grupėms byloja apie lokaliuosius  ${}^{13}\text{C}$  branduolių apsupties ypatumus. Jie gali būti sietini su itin skirtingais protonų rezervuarų, bekontaktuojančių su  ${}^{13}\text{C}$ , netvarkos mastais. Medžiagos savo struktūra gali būti amorfinės, kristalinės, arba, kas yra itin aktualu šiuolaikinėje medžiagotyroje, – nanostruktūrizuotos. Todėl CP kinetikos aprašymui taikomas modelis turi būti pakankamai universalus ir lankstus. Darbe buvo panaudotas neklasikinis sukinių sąveikos modelis, kuris įskaito lokalių sukinių spiečių S–I<sub>N</sub> (glicino atveju tai būtų S = <sup>13</sup>C ir I = <sup>1</sup>H) susiformavimo galimybę. Tuomet CP signalo intensyvumas, kuris yra proporcingas makroskopiniam S sukinių posistemės įmagnetėjimui  $\langle S_z \rangle(t)$ , aprašomas išraiška [4]:

$$\langle S_z \rangle(t) = I_0 \left[ \exp\left(\frac{-t}{T_{1\rho}}\right) - \exp(-k_1 t)g_n(t) \right] + + I_0 \frac{N-1}{N+1} \left[ \exp\left(\frac{-t}{T_{1\rho}}\right) - \exp(-k_2 t) \right];$$
(1)

čia  $k_1$  ir  $k_2$  yra spartos konstantos, kurios siejasi su sukinių difuzijos trukme  $(T_{dif})$ :  $k_1 = 1/T_{dif}$  ir  $k_2 = 3/2 \cdot k_1$ , Nyra ekvivalenčių sąveikaujančių sukinių porų skaičius S–I<sub>N</sub> spiečiuje,  $T_{1\rho}$  yra I branduolių sukinio ir gardelės relaksacijos trukmė besisukančioje koordinačių sistemoje, o  $g_n(t)$  yra CP intensyvumo osciliacijas nusakanti funkcija. Tyrimo metu pagrindinis dėmesys buvo skiriamas būtent šiems parametrams, kadangi jie gali patvirtinti minėtą modelio lankstumą, o taip pat leidžia kur kas lengviau nustatyti sąsajas su mikroskopiniais sukinių dinamikos modeliais [2, 3].

Taikant šį modelį buvo gauta naujų duomenų apie glicino struktūrą ir sukinių dinamiką. Buvo nustatyta sukinių difuzijos sparta, relaksacijos trukmės, ir <sup>1</sup>H–<sup>13</sup>C sukinių spiečių stechiometrija. Gauti tokią infromaciją miltelių bandiniams būtų neįmanoma naudojant tradicinius, pvz. Rentgeno difrakcijos metodus. Dėl šios priežasties, šis darbas parodo, jog BMR spektrometrija gali būti labai efektyvus įrankis keblioms kristalografijos problemoms spręsti.

*Reikšminiai žodžiai: kryžminė poliarizacija, kinetika, nanostruktūros, kristalografija.* 

- NMR Crystallography, edited by R. K. Harris, R. E. Wasylishen, and M. J. Duer (Wiley, 2009).
- [2] V. Klimavicius, L. Dagys, V. Chizhik and V. Balevicius, Appl. Magn. Reson., 48, 7, 673-685 (2017).
- [3] L. Dagys, V. Klimavicius, V. Balevicius, J. Chem. Phys., 145, 11, 114202 (2016).
- [4] C. A. Fyfe, A. R. Lewis, J. M. Chézeau, Can. J. Chem. 77, 1984 (1999).

# Ca0,05Ba0,95Ce0,9Y0,1O3 ir BaCe0,9Y0,1O3 keramikų impedanso spektroskopijos tyrimai

# Impedance spectroscopy investigation of Ca<sub>0,05</sub>Ba<sub>0,95</sub>Ce<sub>0,9</sub>Y<sub>0,1</sub>O<sub>3</sub> and BaCe<sub>0,9</sub>Y<sub>0,1</sub>O<sub>3</sub> ceramics

Saulius Daugėla<sup>1</sup>, Algimantas Kežionis<sup>1</sup>, Tomas Šalkus<sup>1</sup>, Bartłomiej Lis<sup>2</sup>, Magdalena Dudek<sup>2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9/3, LT-10222 Vilnius, Lietuva <sup>2</sup>AGH University of Science and Technology, Faculty of Fuels and Energy, 30-059 Krokuva, Lenkija saulius.daugela@ff.vu.lt

Perovskito struktūros  $BaCe_{0,9}Y_{0,1}O_3$  ir  $Ca_{0,05}Ba_{0,95}Ce_{0,9}Y_{0,1}O_3$  [1, 2] milteliai buvo sintezuoti kietųjų fazių reakcijos metodu ir suspausti į tabletes 200 MPa slėgiu. Keramikos kepinimo temperatūra buvo 1550 K, o kepinimo trukmė – 2 h. Gautų keramikų tankiai siekė atitinkamai 5,25 g/cm<sup>3</sup> ir 5,85 g/cm<sup>3</sup>. Impedanso spektroskopijos matavimams ant cilindro formos bandinėlių buvo tepama platinos pasta ir atkaitinama esant 1100 K temperatūrai.

Kompleksinio laidumo ir kompleksinės dielektrinės skvarbos matavimai buvo atliekami dviejų [3] ir keturių [4] elektrodų metodais. Matavimai dviejų elektrodų metodu buvo atlikti temperatūrų intervale nuo 300 K iki 1000 K bei dažnių intervale nuo 10 Hz iki 10<sup>9</sup> Hz. Matavimai keturių elektrodų metodu buvo atlikti temperatūrų intervale nuo 300 K iki 740 K bei dažnių intervale nuo 10 Hz iki 2 MHz.

Realiosios laidumo dalies priklausomybėje nuo dažnio tiek  $BaCe_{0,9}Y_{0,1}O_3$ , tiek ir  $Ca_{0,05}Ba_{0,95}Ce_{0,9}Y_{0,1}O_3$ keramikoje yra stebimos relaksacinio tipo dispersijos, kurios yra susijusios su krūvio pernaša keramikos kristalituose aukščiausiųjų dažnių srityje, tarpkristalitinėse terpėse vidutinių dažnių srityje, bei keletas procesų, vykstančių keramikos ir platinos elektrodų sandūrose. Pastarieji su elektrodais susiję procesai nebuvo stebimi išmatavus keramikų elektrines savybes keturių elektrodų metodu, kuris leido teisingai nustatyti tarpkristalitinius keramikų laidumus.

 $\begin{array}{cccc} Kristalitiniai & BaCe_{0,9}Y_{0,1}O_3 & ir\\ Ca_{0,05}Ba_{0,95}Ce_{0,9}Y_{0,1}O_3 & laidumai buvo nustatyti iš\\ impedanso matavimų dviejų elektrodų metodu.\\ BaCe_{0,9}Y_{0,1}O_3 keramikos laidumas esant 300 K yra 1,6\cdot10^{-5} S/m, o Ca_{0,05}Ba_{0,95}Ce_{0,9}Y_{0,1}O_3 - 2,5\cdot10^{-6} S/m.\\ Temperatūrinės kristalitinio laidumo priklausomybės yra pavaizduotos 1 pav. Esant 1000 K temperatūrai pasiekiamos iki 2,5 S/m laidumų vertės. \\ \end{array}$ 

Temperatūrų intervale nuo 550 K iki 750 K BaCe<sub>0,9</sub>Y<sub>0,1</sub>O<sub>3</sub> kristalitinio laidumo aktyvacijos energija keičiasi nuo 0,43 eV, kai temperatūra 300-550 K, iki 0,59 eV, kai temperatūra didesnė nei 750 K ir Ca<sub>0,05</sub>Ba<sub>0,95</sub>Ce<sub>0,9</sub>Y<sub>0,1</sub>O<sub>3</sub> laidumo aktyvacijos energijos keičiasi nuo 0,47 eV, kai temperatūra 300-550 K, iki 0,54 eV, kai temperatūra didesnė nei 750 K. Aktyvacijos energijų kaita gali būti paaiškinta konkuruojančiais joninio deguonies vakansijų laidumo ir protoninio laidumo procesais.

Visame tirtame temperatūrų intervale nuo 300 K iki 1000 K dielektrinė skvarba didėja kaitinant keramiką. *e*' didėjimas kylant temperatūrai yra sąlygotas elektroninės poliarizacijos, gardelės virpesių ir jonų





Reikšminiai žodžiai: superjonikai, keramikos, impedanso spektroskopija.

- F. Giannici, A. Longo, F. Deganello, A. Balerna, A.S. Arico, and A. Martorana. Solid State Ionics 178, 587 (2007).
- [2] J. Tong, D. Clark, L. Bernau, A. Subramaniyan, and R. O'Hayre. Solid State Ionics 181, 1486 (2010).
- [3] A. Kežionis, E. Kazakevičius, T. Šalkus, and A.F. Orliukas. Solid State Ionics 188, 110 (2011).
- [4] A. Kežionis, P. Butvilas, T. Šalkus, S. Kazlauskas, D. Petrulionis, T. Žukauskas, E. Kazakevičius, A.F. Orliukas, Review of Scientific Instruments 84, 013902 (2013).

# Indžio-alavo oksido plonų dangų nusodinimas plazma aktyvuoto reaktyvaus terminio garinimo metodu

# Indium-tin oxide thin films deposition by reactive plasma assisted thermal evaporation

Paulius Dolmantas<sup>1</sup>, Ruslanas Ramanauskas<sup>1</sup>, Valerijus Marudinas<sup>1</sup>, Remigijus Kaliasas<sup>2</sup>, Aleksandras Iljinas<sup>1</sup> <sup>1</sup>Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas <sup>2</sup>Kauno technologijos universitetas, Panevėžio technologijų ir verslo fakultetas, Nemuno g. 33, LT-37164 Panevėžys Paulius.Dolmantas@ktu.edu

Elektros srovei laidžios ir skaidrios dangos plačiai naudojami daugumoje mikroelektronikos prietaisų, kuriuose reikalingi regimųjų elektromagnetinių bangų diapazone permatomi elektrodai: skystųjų kristalų ekranuose, elektros srove šildomuose stikluose ir saulės elementuose. Alavo priemaišų turintis indžio oksidas (ITO) yra plačios draustinės juostos n-tipo puslaidininkis  $(E_{g}=3.5-4.3 \text{ eV})$ , pasižymintis aukštu regimosios šviesos pralaidumu. ITO yra vienas labiausiai tiriamų ir naudojamu laidžiu ir skaidrių oksidu. Viena to priežasčiu yra maža paviršinė varža (5-500  $\Omega$ /sq). Elektrinės, struktūrinės optinės ir indžio-alavo oksido charakteristikos priklauso nuo metalų nusodinimo metodo ir jo parametrų [1-3].

Šiame tyrime buvo nusodinti ITO sluoksniai ant stiklo padėklų naudojant plazma aktyvuotą reaktyvųjį terminį garinimą O<sub>2</sub> aplinkoje (slėgis 4 Pa). Tam tikslui naudoti metalinio indžio ir alavo gabaliukai, kurie buvo garinami iš molibdeno lovelio vakuuminėje kameroje.



1 pav. ITO plono sluoksnio skersinio pjūvio SEM vaizdas

Sluoksniai formuoti ant 350 °C temperatūros stiklo padėklų. Plazma sukuriama tarp ekrano ir bandinio laikiklio, naudojant aukštos įtampos nuolatinės srovės šaltinį. Metalų garai iki padėklo keliauja per plazmą. Plazma aktyvuoto garinimo metodu nusodintos dangos pasižymi stipria adhezija, mažu porėtumu, atsparumu korozijai ir mechaniniam poveikiui [4]. Gautų bandinių morfologija analizuota skenuojančiu elektronų mikroskopu. Cheminė sudėtis ištirta rentgeno spindulių energijos dispersijos spektrometrija. Kristalografinės sluoksnių struktūros nustatytos rentgeno spindulių difrakcijos metodu. Paviršinės varžos ir savitosios varžos priklausomybės nuo temperatūros buvo matuotos keturių zondų metodu. Ši priklausomybė leido nustatyti ITO sluoksnių draustinės juostos plotį. Išmatuoti pralaidumo ir atspindžio spektrai UV-VIS-NIR spektrometru leido naudojant Tauko metodą apskaičiuoti optinės draustinės juostos plotį ( $E_g$ ). Tyrimų metu išaiškėjo, kad buvo



2 pav. ITO plono sluoksnio paviršiaus SEM vaizdas

suformuoti porėti koloninę struktūrą turintys ITO sluoksniai (1 pav., 2 pav.). Optimaliomis elektrinių ir optinių savybių deriniu pasižyminti danga, kurią pavyko suformuoti šiuo metodų ir užsiduotomis sąlygomis turi  $16.9 \cdot 10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$  savitąją ir 211  $\Omega$ /sq paviršinę varžą, o jos šviesos pralaidumas didesnis kaip 80 %. Draustinių juostų pločiai nustatyti Tauko ir varžos priklausomybės nuo temperatūros matavimo metodais atitinkamai lygūs 3.4 eV ir 3.5 eV. Rentgeno spindulių difrakcija parodė dangos polikristalinę struktūrą.

- Iljinas, A., et al., Growth of ITO thin films by magnetron sputtering: OES study, optical and electrical properties. Vacuum, 2009. 83, Supplement 1: p. S118-S120.
- [2] Chen, A., et al., A new investigation of oxygen flow influence on ITO thin films by magnetron sputtering. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2014. 120, Part A: p. 157-162.
- [3] Socol, G., et al., Pulsed laser deposition of transparent conductive oxide thin films on flexible substrates. Applied Surface Science, 2012. 260: p. 42-46.
- [4] Iljinas, A. and L. Marcinauskas, Formation of bismuth oxide nanostructures by reactive plasma assisted thermal evaporation. Thin Solid Films, 2015. 594, Part A: p. 192-196.

#### Formavimo temperatūros įtaka amorfinių anglies dangų struktūrai

### The effect of synthesis temperature on the structure of amorphous carbon coatings

<u>Vilius Dovydaitis<sup>1</sup></u>, Marius Černauskas<sup>1,2</sup>, Liutauras Marcinauskas<sup>1</sup>, Pavels Onufrijevs<sup>3</sup>, Arturs Medvids<sup>3</sup> <sup>1</sup>Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų 50, LT-51368 Kaunas <sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>3</sup>Riga Technical University, Faculty of Materials Science and Applied Chemistry, P. Valdena 3/7, LV-1048 Riga <u>viliusdovydaitislt@gmail.com</u>

Pastaraisiais metais amorfinės anglies dangos sulaukė didelio mokslininkų susidomėjimo dėl savo išskirtinių savybių. Priklausomai nuo to, kokie anglies ryšiai, C=C sp<sup>2</sup> ar C-C sp<sup>3</sup> vyrauja dangose, dangų savybės bei taikymas gali kisti labai plačiose ribose [1]. Temperatūra yra vienas iš svarbiausių veiksnių, kuri sukelia fazinius virsmus amorfinėse anglies dangose, t.y. sp<sup>3</sup> ryšių virsmą į sp<sup>2</sup> [2]. Valdant proceso temperatūra, dangų augimo metu, galima gana plačiame intervale keisti sp<sup>3</sup> ir sp<sup>2</sup> ryšių koncentraciją, vandenilio kiekį dangose ir gauti norimų savybių amorfines anglies dangas [1-3]. Pagrindinis darbo tikslas buvo suformuoti amorfines anglies dangas ir nustatyti formavimo temperatūros įtaką dangų paviršiaus morfologijai, elementinei sudėčiai bei vyraujantiems ryšiams.

Dangų auginimas buvo atliktas aukšto dažnio (13,56 MHz) indukcinio tipo reaktoriuje, sukonstruoto pramoninio įrenginio YBH–72M–2 pagrindu. Anglies dangos buvo formuojamos ant n tipo, (100) orientacijos silicio padėklų ant kurių buvo suformuotas nanometrinis nikelio sluoksnis. Dangų sintezei naudota acetileno dujų plazma (32,5–53,1 ml/min). Dangos buvo auginamos 90 s, palaikant 300 V priešįtampį ir 60–70 Pa slėgį. Dangos buvo formuojamos ant padėklų įkaitintų iki 300–550 °C temperatūros.

Suformuotų dangų paviršius buvo tirtas naudojantis Hitachi S–3400N skenuojančiu elektroniniu mikroskopu (SEM) bei Microtestmachines Co. firmos atominių jėgų mikroskopu NT–206 (AFM). Dangų elementinės sudėtis buvo nustatyta Bruker X FLASH QUAD 5040 Rentgeno spindulių energijos dispersijos spektroskopu (EDS). Dangų struktūros pokyčiai tirti Renishaw InVia90V727 mikro–Ramano spektrometru (RS). Matavimai buvo atlikti naudojant 514 nm, 633 nm ir 785 nm žadinančias lazerines spinduliuotes.

Paviršiaus morfologijos tyrimai parodė, kad dangos suformuotos 300 - 400 °C temperatūroje yra tolygios ir jų vidutinis šiurkštis (R<sub>a</sub>) siekia iki 2 nm (1 pav. a). 500 °C temperatūroje ant padėklo susiformuoja tolygiai pasiskirsčiusios submikroninės salelės, o dangos šiurkštis išauga iki ~5 nm (1 pav. b). Padidinus temperatūrą iki 550 °C salelių matmenys mažėja, kas lemia paviršiaus šiurkščio sumažėjimą iki ~3 nm.

Kadangi suformuotos anglies dangos buvo plonos (~100 nm), atliekant elementinės sudėties analizę, EDS spektruose be anglies ir deguonies buvo užfiksuotas dėl padėklo atsiradęs silicio ir nikelio signalas. Didinant formavimo temperatūrą nuo 300 °C iki 550 °C dangose sumažėja deguonies koncentracija. Nustatyta, kad anglies ir deguonies atominių koncentracijų santykis padidėja beveik 10 kartų (t.y. nuo 3,8 iki 36,6), padidinus temperatūrą nuo 300 iki 550 °C.



1 pav. Anglies dangų paviršiaus vaizdai: a) 300 °C ir b) 500 °C.

Didinant padėklo temperatūra, G smailės pusplotis sumažėja nuo 173 cm<sup>-1</sup> iki 48 cm<sup>-1</sup>, D smailė slenkasi į mažesnių verčių sritį (iš 1348 cm<sup>-1</sup> į 1336 cm<sup>-1</sup>), o G smailė į didesnių (iš 1584 cm<sup>-1</sup> į 1603 cm<sup>-1</sup>). Tai rodo, kad dangose mažėja polimerinės fazės koncentracija, didėja sp<sup>2</sup> ryšių kiekis ir anglies struktūrų tvarkingumo laipsnis [1]. RS tyrimų rezultatai rodo, kad suformuotos dangos, priklausomai nuo padėklo temperatūros yra dviejų rūšių. 300-350 °C temperatūrose buvo gautos polimerinės ir grafitinės anglies mišinio dangos, kuriose vyrauja C=C sp<sup>2</sup> ir CH<sub>x</sub> ryšiai. Esant formavimo 400 °C gaunamos temperatūrai  $\geq$ vra mikro-nanokristalinio grafito anglies dangos.

Reikšminiai žodžiai: anglis, nanokristalinis grafitas, mikro–Ramano spektroskopija, temperatūra.

- [1] J. Robertson, Mater. Sci. Eng. R 37(4), 129 (2002).
- [2] H. Li, et al., Thin Solid Films 515(4), 2153 (2006).
- [3] Z. Hong, et. al., Thin Solid Films 618, 21 (2016).

#### Naujų enaminų, gautų iš anilino darinių, krūvio pernašos savybės

### Charge transport properties of novel aniline-based enamines

<u>Juozas Getautis</u><sup>1</sup>, Deimantė Vaitukaitytė<sup>2</sup>, Egidijus Kamarauskas<sup>1</sup>, Artiom Magomedov<sup>2</sup>, Vytautas Getautis<sup>2</sup>, Vygintas Jankauskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup>Kauno technologijos universitetas, Cheminės technologijos fakultetas, Radvilėnų pl. 19, LT-50254 Kaunas

juozasget@gmail.com

Saulės celių kūrimo srityje naudojant organinį puslaidininkį Spiro-OMeTAD, jau yra pasiekti neblogi rezultatai. Tačiau ši medžiaga yra itin brangi, jos sintezė sudėtinga, o išeiga nedidelė ir siekia tik 40 % [1]. Todėl ieškoma naujų efektyvesnių junginių. Anilino, 4-metoksi(etoksi, heksil)- bei 3,5-dimetilanilino vienos pakopos reakcijose su 2,2-bis(4-metoksifenil)acetal-dehidu buvo susintetinti nauji enaminai su įvairiais pakaitais (1 pav.), kurie darė stiprią įtaką tiek jonizacijos potencialui, kuris kito nuo 5,04 iki 5,34 eV, tiek ir skylių dreifiniam judriui.



1 pav. Naujų organinių puslaidininkių struktūros

Krūvininkų pernaša tirta šių darinių 3-5 μm storio sluoksniuose. Judrios yra skylės ir visoms medžiagoms jų TOF signalas yra palyginti mažai dispersiškas, todėl galėjome patikimai nustatyti skylių lėkio trukmes (2 pav.).



3 pav. pateikiamos naujų enaminų skylių dreifinio judrio priklausomybės nuo elektrinio lauko stiprio. Geriausias judris yra stebimas V1091 medžiagoje  $(5\cdot10^{-3} \text{ cm}^2/\text{Vs}, \text{ esant } 6.4\cdot10^{-5} \text{ V/cm elektrinio lauko}$ stipriui). Aukštas skylių judris šioje medžiagoje gali būti aiškinamas didžiausia  $\pi$ -konjuguota molekule. Labai panašios struktūros junginyje **V1102** išmatuotas mažiausias krūvininkų judris. Matomai, prie benzeno žiedo prijungus dvi metilo grupes dėl erdvinių trukdžių molekulės struktūra pasidaro mažiau palanki krūvio pernašai. Skaičiavimai, optimizuojant struktūras DFT B3-LYP metodu, parodė, kad kampas tarp benzeno žiedo ir dvigubos jungties **V1091** junginio atveju yra 24,6°, o **V1102** junginio atveju jis padidėja iki 58,6° (4 pav.). Taigi, dėl to ženkliai pablogėja  $\pi$ -konjugacija tarp šių molekulės dalių. Tuo galime paaiškinti žymų skylių judrio sumažėjimą **V1102** junginyje (3 pav.).

Visumoje šie junginiai pasižymi gera skylių pernaša bei energetiniais lygmenimis tinkamais naudojimui dažais pajautrintose saulės celėse.







4 pav. Junginių V1091 ir V1102 erdvinės struktūros

Reikšminiai žodžiai: organinis puslaidininkis, skylių judris, jonizacijos potencialas, π-konjugacija.

#### Literatūra

[1] K. Rakstys et al., Angew. Chem. Int. Ed., 55, 7464 (2016).
## Plačiajuostė dielektrinė kobalto ferito ir švino cirkonio titanato kompozitų spektroskopija

## Broadband dielectric spectroscopy of cobalt ferrite and lead zirconium titanate composites

<u>R. Grigalaitis<sup>1</sup></u>, J. Banys<sup>1</sup>, A. Sakanas<sup>1</sup>, C.E. Ciomaga<sup>2</sup>, L. Mitoseriu<sup>2</sup>, S. Kamba<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Department of Radiophysics, Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio av. 9, Vilnius, LT-10222 Lithuania <sup>2</sup> Faculty of Physics, University "Al. I. Cuza", Iasi 700506, Romania

<sup>3</sup>Institute of Physics, Academy of Sciences of the Czech Republic, 182 21 Prague 8, Czech Republic

robertas.grigalaitis@ff.vu.lt

Multiferroics belongs to class of materials in which the ferroelectric and ferromagnetic ordering occurs simultaneously in the same temperature range. Some of them can exhibit also a coupling between these orders, i.e. posses a magnetoelectric effect. It is not surprising that multiferroics are promising as multifunctional materials for various sensors, actuators, transducers, four state memory devices, etc [1] and are being intensively studied at the present. The most interesting multiferroic materials at the moment are so-called two-phase multiferroic composites due to the possibility to realize the "product property" referring to effects present in the composites but not in the individual phases. Lead zirconate titanate PbZr xTi1-xO3 is the well known ferroelectric perovskite with excellent electromechanical properties while cobalt ferrite CoFe2O4 exhibit good ferromagnetic and magnetostrictive properties. These above mentioned properties allow combining them together to form composite exhibiting multiferroic behaviour. Due to the lack of high frequency dielectric investigations the applicability of such multiferroics in GHz and THz range is still limited and the present work is dedicated to the broadband dielectric spectroscopy results of Pb<sub>0.988</sub>(Zr<sub>0.52</sub>Ti<sub>0.48</sub>)<sub>0.976</sub>Nb<sub>0.024</sub>O<sub>3</sub> (PZTN) and CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>(CF) composite ceramics.

CF-PZTN composite ceramics with CF ratio of 10%, 20 % and 30% were prepared were prepared in situ by citrate-nitrate combustion by using PZTN-based template powders as described in [2]. Various devices and broadband dielectric spectroscopy methods were used in experiments to cover the wide range of temperatures and frequencies, spanning from 100 K to 500 K and from 20 Hz up to 50 GHz. Transmission mode time domain THz spectroscopy was employed in measurements of complex dielectric response in the range of  $5-50 \text{ cm}^{-1}$  with a resolution of 0.5 cm<sup>-1</sup> at 20 -800 K. In order to investigate phonon properties of composites, IR reflectivity and Raman spectra were collected of optically polished samples. Bruker IFS 113v Fourier-transform IR spectrometer was used in the range of 30 - 3000 cm<sup>-1</sup> at the room temperature, and up to  $\sim$ 700 cm<sup>-1</sup> in cooling and heating regimes with the resolution of 2 cm<sup>-1</sup>. For Raman measurements, RENISHAW RM-1000 micro-Raman spectrometer was used in back-scattering geometry in the range of 20 - $1200 \text{ cm}^{-1}$  with the spectral resolution below 2 cm<sup>-1</sup>.

The obtained results show a broad dielectric anomaly around the temperature of 630 K, whereas steady increase of dielectric loss above this temperature is observed as well. The peak of permittivity in the temperature dependencies can be associated with the paraelectric-ferroelectric phase transition in the morphotropic phase boundary (MPB) PZT material, in accordance to the phase diagram of lead zirconate-lead titanate system [3]. Comparing  $\varepsilon'$  and  $\varepsilon''$  temperature dependencies at a fixed frequency one can conclude that permittivity values decrease with an increase of cobalt ferrite concentration, as can be explained by a sum rule.

Dielectric spectra of (1-x)PZTN-*x*CF composites can be divided into three regions, where characteristic differences exist in each of them between soft and hard doped PZT.

At low frequencies dielectric spectra are governed by electrical conductivity phenomena while in the midrange, they show monotonic increase of dielectric permittivity upon decreasing the frequency. Generally, such dispersion is called *Universal Dielectric Response*, or *Logarithmic Dispersion* law and it is believed that it is the reason of the existence of disorder in the materials. The origin of the dielectric relaxation in GHz range is of piezoelectric nature and possibly is caused by grain or domain wall resonance.

In IR spectra characteristic phonons of ferroelectric morphotropic phase boundary PZT are dominated in all (1-x)PZTN-*x*CF composites. While it is known that phonon mode close to 80 cm<sup>-1</sup> is related to the ferroelectric behavior, the softening of central mode around 45 cm<sup>-1</sup> is observed in our case. Furthermore, this softening is disturbed by the increasing concentration of CF. It seems that cobalt ferrite effectively disturbs the softening of ferroelectric IR phonon modes.

#### References

- [1] W. Eerenstein, N. D. Mathur, and J. F. Scott, Nature 442 (2006).
- [2] A.R. Iordan, M. Airimioaei, M.N. Palamaru, C. Galassi, A.V. Sandu, C.E. Ciomaga, F. Prihor, L. Mitoseriu, A. Ianculescu, J. Eur. Ceram. Soc. 29, 2807 (2009).
- [3] B. Noheda, D.E. Cox, G. Shirane, R. Guo, B. Jones, and L.E. Cross, Phys. Rev. B 63, (2000).

## Bismuto-švino oksido sluoksnių nusodinimas plazma aktyvuoto garinimo metodu

## Synthesis of bismuth-lead oxide thin films by plasma assisted reactive evaporation

Aleksandras Iljinas<sup>1,2</sup>, Darius Virbukas<sup>1,2</sup>, Piotras Bachanovas<sup>1</sup>, Vytautas Stankus<sup>2</sup>,

<sup>1</sup>Kauno kolegija, Technologijų fakultetas, Pramonės pr. 20, LT-50468 Kaunas

<sup>2</sup>Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir Gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas aleksandras.iljinas@ktu.lt

Sumažinus kietakūnio oksido kuro elementų (KOKE, angl. k. SOFC - Solid Oxide Fuel Cells) darbinę temperatūrą iki vidutinių temperatūrų ~(600 – 800) °C, ženkliai sumažėja YSZ elektrolitų joninis laidis, kas riboja jų pritaikymo galimybes. Norint pagerinti KOKE efektyvumą yra ieškoma keramikų, kurios turėtų geresnį joninį laidį ir kuo mažesnę difuzijos aktyvacijos energiją. Buvo pradėtos tirti įvairių medžiagų tokių, kaip cirkonio, cerio, lantano, bismuto oksido deguonies jonų laidumo keramikos. Bismuto oksido elektrolitai pasižymi didžiausiu joniniu laidžiu. Pagrindinis šių elektrolitų trūkumas – metastabilios struktūros, kuriose, laikui bėgant, vyksta fazinis virsmas ir joninis laidis pradeda mažėti [1, 2].

Darbe bismuto-švino oksido sluoksniai buvo auginami plazma aktyvuoto garinimo metodu ant silicio ir stiklo padėklų. Padėklų temperatūra nusodinimo metu buvo 25 °C (kambario temperatūra) ir 500 °C. Sluoksnių morfologija ir fazinė sudėtis priklauso nuo padėklo temperatūros.

Sluoksnių rentgenostruktūrinė analizė rodo, kad ant kambario temperatūros stiklo padėklų auga amorfinės struktūros danga. Tuo tarpu ant 500 °C padėklų formuojasi gryna delta fazė (1 pav.). Aukštose temperatūrose (~500 °C) sluoksnių paviršiuje formuojasi bismuto-švino oksido nanodariniai (2 pav.).

Plonų sluoksnių elektrinių savybių tyrimui buvo naudojamas impedanso spektrometras (NorECs AS). Elektrinės keramikų savybės tirtos 1073–473 K temperatūrų ir  $10^{-1} \le f \le 10^6$  Hz dažnių intervaluose.

Elektrinio laidžio savybių tyrimai patvirtina (3 pav.) fazinį virsmą iš delta į beta fazę, mažinant matavimų temperatūrą.



1 pav. (Bi<sub>1-x</sub>Pb<sub>x</sub>)<sub>2</sub>O<sub>3</sub> plonų sluoksnių rentgeno spindulių difrakcijos rezultatai.



2 pav. (Bi<sub>1-x</sub>Pb<sub>x</sub>)<sub>2</sub>O<sub>3</sub> plonų sluoksnių SEM nuotraukos, esant skirtingai Pb koncentracijai ant Si padėklų.





Reikšminiai žodžiai: bismuto oksidas, plazma aktyvuotas garinimas.

- B. Sirota, J. Reyes-Cuellar, P. Kohli, L. Wang, M.E. McCarroll, S.M. Aouadi, Thin Solid Films 520 6118-6123 (2012).
- [2] Miael A. Khan, Timothy P. Comyn, Andrew J. Bell, Journal of the European Ceramic Society 28 591-597(2008).

# Dirbtinių morfotropinių fazių sandūrų beieškant: BaTiO<sub>3</sub>-KNbO<sub>3</sub> kompozitų dielektrinė spektroskopija

## In search for artificial MPBs: dielectric spectroscopy of BaTiO<sub>3</sub>-KNbO<sub>3</sub> composites

Maksim Ivanov<sup>1</sup>, Sergejus Balčiūnas<sup>1</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup>, Satoshi Wada<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup>Interdisciplinary Graduate School of Medical and Engineering, University of Yamanashi, Kofu, Yamanashi 400-8510,

Japan

<u>maksim.ivanov@ff.vu.lt</u>

High piezoelectric activity is of high demand for various applications. The desired properties are most often observed in solid solutions displaying the socalled Morphotropic Phase Boundary (MPB), when two different lattice structures are of similar energy, thus extrinsic stimulus leads to easy deformation. The coexistence of the phases is often observed in a broad temperature range, thus the electromechanical properties are enhanced in a region much broader than the ferroelectric phase transition, making the MPB the main feature to look for in a piezoelectric.

However, not all solid solutions exhibit the MPB, especially if lead-free materials are considered. There has been a substantial effort to engineer a lead-free piezoelectric material, which would be competitive with PZT, but the results are average at best. As a result artificial MPBs are of high interest, and they can be formed in ferroelectric composites with epitaxial interfaces between the phases.  $BaTiO_3$  (BT) and  $KNbO_3$ (KN) were selected as the starting members, as they are both lead-free ferroelectrics and have dissimilar lattice structures at room temperature. Furthermore, their solid solution does not form a MPB. Creating epitaxial interfaces with KN inside BT structure creates stresses that increases domain wall count and, as a result, enhanced piezoelectric coefficient can be expected in analogy with the conventional MPB materials.

Polyhedron BT particles (around 300nm) were pressed into low-density ceramics using a uniaxial press, then porous BT structure was heated up to 1000°C for 2 hours. KNBT composites were prepared by the solvothermal method. KN was epitaxially deposited into sintered and non-sintered BT structure forming 0.18KN-0.82BT (0.18KNBT) and 0.5KN-0.5BT (0.5KNBT) composites respectively.

Dielectric measurements were performed in 100 - 500 K temperature and  $10^2 - 10^{11}$  Hz frequency range. The specimen was polished and washed in acetone bath then parallel electrodes were made using silver paste. In frequency range from 100 to  $10^6$  Hz the complex impedance was measured using HP 4284A precision LCR meter. To obtain higher frequencies ( $10^6-10^9$ Hz) the coaxial line was terminated by a flat capacitor - reflection and phase were measured using Agilent 8714ET RF network analyser. For highest frequencies, dielectric rods were made. The sample was placed in waveguide system then reflection and transmission was measured using Elmika scalar network analyser R2400. Dielectric permittivity was obtained by solving optimization problem. All measurements were performed during cooling cycle at 1K/min rate.

In this presentation dielectric properties of BT-KN with different KN molar ratios will be presented. It was found, that the piezoelectric effect gives a significant contribution to the total dielectric permittivity. The main mechanism is piezoelectric coupling of the external field to intrinsic mechanical resonators formed by the aggregates in the necking structure of BT. The contribution is so big, that it might be useful in real-life devices, if the permittivity can be engineered to have a higher value with less frequency dependence. Impact of KN on the piezoelectricity of the strained BT was obtained from the piezoelectric contribution and compared with the pure material. Furthermore, the spontaneous polarisation of the movable domains was estimated based on the dielectric data, and it seems to be dependent on the strain induced by KN layer.

### Acknowledgement

This research was funded by a grant (No. LJB-3/2016) from the Research Council of Lithuania. This research was performed in cooperation with the University of Yamanashi.

### Literature

[1] T. Higuchi, Journal of mechanical science and technology, vol. **24**, pp. 13-18, (2010).

[2] I. Fujii, S. Shimizu, K. Yamashita, K. Nakashima, N. Kumada, C. Moriyoshi, et al., Applied Physics Letters, vol. **99**, p. 202902, (2011).

## Joninių skysčių Pyr14TFSI ir Pyr12O1TFSI statinės dielektrinės skvarbos tyrimai

## Static Dielectric Permittivity of Pyr14TFSI and Pyr12O1TFSI Ionic Liquids

Džiugas Jablonskas<sup>1</sup>, Maksim Ivanov<sup>1</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup>, Guinevere A. Giffin<sup>2,3</sup>, Stefano Passerini<sup>2,3</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Helmholtz Institute, Ulm, Germany <sup>3</sup>Karlsruhe Institute of Technology, Germany <u>dziugas.jablonskas@ff.vu.lt</u>

Ionic liquids (IL) have received significant research focus due to their unique set of properties that has allowed them to be used in numerous applications. [1], [2] To name a few, ILs have been used as media for organic synthesis, bioscience, chemical sensing, green chemistry including recycling of rare earth/heavy metals and in variety of different electrochemical and electromechanical applications such as electrodeposition of metals and semiconductors, biofuel cells, electromechanical actuators, lithium-ion and other applications, dye-sensitized battery solar cells, supercapacitors, etc. ILs, which are salts that are in a liquid state below room below 100°C (and in many cases at room temperature), have good thermal and chemical stability, low melting point, negligible volatility (and thus low flammability), high ionic conductivity, polarity, miscibility with many compounds and moderate viscosity. In addition to the many attractive properties of ILs, one interesting aspect of ILs is the dipolar dynamics. However, this investigation of the dipolar dynamics is not an easy task because of their inherent high ionic conductivity, which makes data extraction in the lower frequency region (f < 1 GHz) particularly challenging [3].

This work presents the dielectric spectroscopy of two ILs, N-butyl-N-methyl-pyrrolidinium bis-(trifluoromethanesulfonyl)imide (Pyr<sub>14</sub>TFSI) and N-(methoxyethyl)-N-methylpyrrolidinium

bis-(trifluoromethanesulfonyl)imide (Pyr<sub>12O1</sub>TFSI). These two ILs have been extensively studied as candidates to replace organic electrolytes in Li-ion batteries, primarily due to the enhanced safety offered by them. Conventional methods to analyze dielectric spectra of these ILs failed to give unambiguous results because of contact blocking phenomenon (or Maxwell-Wagner polarization), which obscures the static dielectric permittivity ( $\varepsilon_{DC}$ ) at low frequencies. An approach similar to the one described in [4] is presented here. It requires a recalculation of the dielectric spectra to give the specific resistance spectra, which allows parameters of dipolar dynamics, as well as static dielectric permittivity, of the ILs to be extracted. Using this approach, the aim of this work was to characterize the dipolar dynamics of these two materials - Pyr14TFSI and Pyr<sub>1201</sub>TFSI - and compare them to the dynamics of other known ILs.

The dielectric permittivity of  $Pyr_{14}TFSI$  and  $Pyr_{1201}TFSI$  ILs was measured in the frequency range of 40 MHz to 20 GHz and temperature range from 298 K

(room temperature) to 370 K. The measurements were performed during the heating cycle with 0.75 K/min temperature variation rate. The sample cell was a circular waveguide, which has a transition to a coaxial probe. The reflectance measurements were made using a vector network analyzer Agilent E8363B. The dielectric permittivity data was extracted from the reflectance according to a full-wave model of the waveguide configuration used for measurements. The temperature measurements were performed with a T-type thermocouple connected to a multimeter Keithley Integra 2700. This equipment and specific data analyzis allowed to obtain temperature dependence of static dielectric permittivity of Pyr<sub>14</sub>TFSI and Pyr<sub>1201</sub>TFSI ILs (figure 1)



Fig. 1 Temperature dependence of  $\varepsilon_{DC}$  of the Pyr<sub>14</sub>TFSI (black) and Pyr<sub>12O1</sub>TFSI (red) ionic liquids.

Key words: ionic liquid, dielectric spectroscopy, liquid phase.

#### References

[1] M. Armand, F. Endres, D. R. MacFarlane, H. Ohno, B. Scrosati, *Nat. Mater.*, 2009, No. 8, 621-629.

[2] D. R. MacFarlane *et al.*, *Energy Environ. Sci.*, 2013, No. 1,

232-250. [3] M. M. Huang, Y. Jiang, P. Sasisanker, G. W. Driver, H.

Weingartner, *J. Chem. Eng. Data*, 2011, No. 4, 1494-1499 [4] U. Kaatze, *Metrologia*, 2010, No. 2, S91-S113

## Superkristalizacija tirpale apspinduliuotame rentgeno spinduliais

### Supercrystallization in solution irradiated by X-rays

<u>A. J. Janavičius</u><sup>1</sup>, R. Rinkūnas<sup>2</sup>, R. Purlys<sup>2</sup> <sup>1</sup>Šiaulių universitetas, Vilniaus g. 88, LT-76285, Šiauliai <sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <u>AYanavy@gmail.com</u>

Vario sulfato pentahidratas (CuSO<sub>4</sub>×5H<sub>2</sub>O) tirpinamas destiliuotame vandenyje tol, kol yra gaunamos medžiagos nuosėdos ant dugno. Tokiu būdu gauname įsotintą tirpalą vandenyje susidedantį iš dvigubo teigiamo krūvio Cu<sup>2+</sup> ir dvigubo neigiamo krūvio SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> jonų. Tirpalas yra švitinamas rentgeno spinduliais naudojant rentgeno spindulių difraktometrą DRON-3M su Cu anodu, pasirenkant reikalingą įtampą ir srovės stiprumą. Tai turi didelę įtaką kristalizacijos procesams [1]. Tirpalo jonizacija minkštais rentgeno spinduliai vandenyje sukuria jonus ir metastabilius radikalus [2]  $H_3O^+$ 

$$H_2O^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + OH ,$$
  

$$H_3O^+ + OH^- \rightarrow 2H_2O$$
(1)

surenkančius neigiamus jonus SO42- ir todėl 4 kartus paankstinančius kristalizacijos pradžią prisodrinto CuSO<sub>4</sub>×5H<sub>2</sub>O tirpalo laše, esant spinduliuotės režimui 30 kV, 20 mA ir tirpalo apspinduliavimo trukmei 1 h. Dėl Ožė efekto vario Cu<sup>2</sup> jonas tampa triskart teigiamai užkrautas, kas padidina kristalizacijos greiti apytiksliai iki 10 kartų. Dėl minėtų priežasčių, NaCl ir KČl kristalizacijos prisodrintame apspinduliuotame vandens tirpale tūrinis greitis padidėja atitinkamai [1] milijoną ir [2] tūkstantį kartų gaunant mūsų atrastą superkristalizacijos [1] reiškinį. Rentgeno spinduliai generuoja Ožė efektą Cu atomuose ir jonuose esant fotonų energijai didesnei negu 8986 eV. Todėl naudojant pakankamas rentgeno difraktometro anodo įtampas bus efektyviau generuojamamas Ožė efektas Cu jonuose kai jos bus didesnės už 9 kV. Tą rodo 1 pav. pavaizduota augančių kristalų vidutinių dydžių laikinė priklausomybė nuo rentgeno vamzdžio apspinduliuojančio tirpalą anodo įtampų ir srovės stiprumo. Ožė efektas vyksta rentgeno spindulių fotonui pašalinant iš artimiausio branduoliui K sluoksnio elektroną sukeliant išorinių sluoksnių elektrono perėjimą į atsilaisvinusią kvantinę būseną ir antrinio fotono išspinduliavimą ko rezultate atomas arba jonas kristale perstumiamas į tarpmazgį sukuriant vakansiją. Tokiu būdu kristalizacija vyksta ne tik kristalo paviršiuje bet ir visame tūryje. Ožė efektas sieros atome arba jone vyksta esant rentgeno spinduliuotės fotonų energijai didesnei už 2476 eV. Todėl kristalizacijos greitis ir kristalo struktūra labai priklauso nuo rentgeno spinduliotės fotonų energijos. 1pav. matosi kristalėlių dydžio kitimo priklausomybė nuo laiko ir lašų tirpalų švitinimo parametrų. Tirpalo lašams ant stiklo garuojant auga vario sulfato pentahidratas , kurio kristalinė struktūra yra triklininė gardelė (a=0,5986, b=0,6141, c=1,0736) nm. Todėl c ašies kryptimi kristalas auga 1 pav. atrinkome nufotografuotus greičiausiai. kristalėlius, kurie augo greičiausiai - kristalėlių augimas vyko c ašies kryptimi.



1 pav. CuSO<sub>4</sub> kristalėlių dydžio kitimas tirpalui garuojant iš lašo. Pavyzdėliai: 1 – nešvitintas, 2 ir 3 – švitinti 1 h esant anodo įtampai 20 kV ir 30 kV ir srovei rentgenovamzdyje 20 mA.

Nešvitintame laše kristalėliai pradeda susidaryti po 800 s (1 pav., 1 kreivė) ir pradiniu momentu pasiekiamas didžiausias kristalėlio augimo greitis 0,2  $\mu$ m/s vėliau sumažėjantis iki 0,05  $\mu$ m/s. Apšvitintuose tirpaluose (režimai 20 kV, 30 kV ir 20 mA, 1 h.) kristalėliai pradeda augti atitinkamai po 400 s ir 200 s (1 pav., kreivės 2 ir 3) o pradiniai greičiai padidėjo iki 0,8  $\mu$ m/s ir 10  $\mu$ m/s.

Reikšminiai žodžiai: metastabilūs radikalai, Ožė efektas, vakansijos, superkristalizacija.

- [1] A.J. Janavičius, R. Purlys and R. Rinkūnas., Acta Phys. Pol. A 123, 777 (2013).
- [2] A.J. Janavičius, R. Rinkūnas and R. Purlys, Europhys. Lett. 116, 27001 (2016).

# Krūvininkų generacija, pernaša ir rekombinacija puslaidininkiniame anglies nanovamzdelių tinkle

# Carrier photogeneration, drift and recombination in a semiconducting carbon nanotube network

Vidmantas Jašinskas<sup>1</sup>, Valentas Bertašius<sup>1</sup>, Angela Eckstein<sup>1</sup>, Imge Namal<sup>2</sup>, Tobias Hertel<sup>2</sup>, Vidmantas Gulbinas<sup>1,3</sup>

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

<sup>2</sup>University of Würzburg, Physical Chemistry Department, Am Hubland, 97074 Würzburg, Germany

<sup>3</sup>Vilnius University, Department of General Physics and Spectroscopy, Saulėtekio al. 9-III, LT-10222 Vilnius, Lithuania <u>vidmantas.jasinskas@ftmc.lt</u>

The fact that single-wall carbon nanotubes (SWNTs), depending on diameter and chirality may be either metallic or semiconducting is of particular interest for many technological applications. Semiconducting nanotubes have potential for use as photoactive material in solar cells or light detectors [1]. The photoresponse in the IR spectral region also makes SWNTs particularly well suited for IR or photothermal detectors [2]. SWNTs were also tested for application in organic solar cells to enhance charge transport [3], as electron acceptors in blend with conjugated polymers [4], or as electron donors in heterojunctions with fullerene derivatives [5].

In many potential applications carbon nanotubes are expected to be used in the form of thin film percolation networks, forming conductive or semiconducting layers. The photoconductivity of such SWNT layers is a key for the performance of SWNT-based optoelectronic devices.

We used a combination of the steady state and transient photocurrent with time-delayed-collection field technique for an investigation of charge carrier generation, drift and recombination processes in networks of polyfluorene-wrapped (6.5) SWNTs blended with PCBM, following their optical excitation. Charge carrier generation takes place spontaneously by electron transfer from excited SWNT to PCBM. Generated holes create a transient photocurrent in SWNT network, which is controlled by the morphology of the network, rather than by carrier recombination or extraction. The transient photocurrent (Fig. 1) shows three characteristic decay regimes. An ultrafast phase, lasting less than 2 ns is attributed to hole transfer within single SWNTs while hole jumps between SWNTs take a few microseconds. The slowest photocurrent component is observed only at high PCBM concentrations and is attributed to electron transfer via PCBM. Electrons and holes residing on the same nanotube recombine within about 1 µs. In contrast, carriers located on different SWNTs can survive hundreds of microseconds.

The clear identification of several photocurrent phases in SWNT systems provides broader perspectives for their application in photoelectrical devices while providing new leads for the optimization of photocurrents. The ultrafast photocurrent component, which may be particularly useful in designing new ultrafast photodetectors may be further optimized by increasing nanotube lengths and by making networks with higher degree of nanotube alignment orientation. Additional improvements might be achieved if SWNTs were better isolated from one another so as to prevent intertube carrier jumps. Improvement of the SWNT network percolation, on the other hand, is a crucial requirement for the maximization of steady state photocurrents.



Fig. 1. Charge extraction kinetics from samples with different PCBM to SWNT ratios measured under excitation at 1064 nm by 16  $\mu$ J/cm<sup>2</sup> energy pulse under 2V applied voltage. For more clear presentation they are normalized to the equal intensity of the fast growth component and shifted vertically and horizontally

Keywords: carbon nanotube, PCBM, kinetics, photogeneration, recombination, charge extraction.

#### References

- [1] M. S. Arnold, J. L. Blackburn, J. J Crochet, S. K. Doorn, J. G. Dugue, A. Mohite and H. Telg, Phys. Chem. Chem. Phys., 2013, 15, 14896–14918.
- [2] K. Erikson, X. He, A. A. Talin, B. Mills, R. H. Hauge, T. Iguchi, N.Fujimura, Y. Kawano, J. Kono, and F. Léonard, Figure of Merit for Carbon Nanotube Photothermoelectric Detectors, ACS Nano, 2015, 9 (12), pp 11618–11627
- [3] T.Y. Lee, P. S. Alegaonkar and J.-B. Yoo, Thin Solid Films, 2007, 515, 5131–5135.
- [4] M. Lanzi, L. Paganin and D. Caretti, Polym. J., 2008, 49, 4942– 4948.
- [5] M.J. Shea and M.S. Arnold, Appl. Phys. Lett., 2013, 102, 243101.

# Molekulinis pirimidino metalų jonų jutimas, asistuojamas šiluma aktyvuojama uždelstąja fluorescencija

## Pirimidine based metal ion sensing, assisted by thermally activated delayed fluorescence

<u>Justina Jovaišaitė</u><sup>1</sup>, Tomas Serevičius<sup>1</sup>, Tadas Bučiūnas<sup>1</sup>, Jelena Dodonova<sup>2</sup>, Jonas Bucevičius<sup>2</sup>, Sigitas Tumkevičius<sup>2</sup>, Saulius Juršėnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Taikomųjų mokslų institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup>Organinės chemijos katedra, Naugarduko 24, LT-03225 Vilnius, Lietuva

justina.jovaisaite@tmi.vu.lt

Naujos kartos organinės fluorescencinės detektavimo sistemos, kuriamos į molekulę arba molekulių sistemą integruojant analitę atpažįstantįjį elementą ir signalinį optinį atsaką rodantį fluoroforą [1], sulaukia daug dėmesio dėl galimybės lengvai, greitai ir patogiai aptikti [2] bei realiu laiku stebėti metalų jonų koncentraciją įvairiose sistemose [3].

Akceptorinės-donorinės pirimidinų sistemos savo savybėmis atitinka jutikliams keliamus selektyvumo ir jautrumo reikalavimus. Apskritai, pirimidinų junginiai yra suderinami su biologinėmis sistemomis ir literatūroje žinomi dėl savo panašumo į DNR bei RNR nukleobazes [4] bei daugelio gydomųjų savybių [5]. Įgalinus tokius darinius selektyviai prijungti metalų jonus dimetilamino pakaitu, atsiveria plačios galimybės kurti fluorofororeceptoriaus pagrindu veikiančius metalų jonų atpažinimo prietaisus.

Darbe tiriama **P1** molekulė (1 pav.), ne tik geba formuoti kompleksus su gyvsidabrio jonais, kurių optinio atsako skirtumas gali būti efektyviai registruojamas, bet ir demonstruoja šiluma aktyvuojamą uždelstąją fluorescenciją (TADF).



1 pav. Molekulės P1 struktūrinė formulė.

TADF yra metodas, kuriuo tripletinės būsenos yra paverčiamos švienčiančiomis singuletinėmis būsenomis. Molekulės, kurioms būdinga šiluma aktyvuojama uždelstoji fluorescencija, dažniausiai pasižymi elektronų donorinėmis ir akceptorinėmis savybėmis, tokiose molekulinėse sistemose dominuoja krūvio pernašos būsenų (CT) fluorescencija. TADF koncepcija iki šiol yra sėkmingai taikoma didinant išorinį kvantinį našumą, siekiant gauti našius organinius šviestukus [6].

Šiame darbe pirmą kartą demonstruojame TADF metodo panaudojimą, aiškinant metalų jonų jutimo molekuliniais dariniais (**P1** molekule) mechanizmą bedeguonėje terpėje, siejamą su išaugusiu lokaliai sužadintosios (LE) ir mažėjančiu CT būsenų fluorescencijos našumu. *Reikšminiai žodžiai: azoto heterociklai, pirimidinas, gyvsidabrio jonai, TADF, jutimas* 

- A. P. de Silva *et al.*, "Signaling Recognition Events with Fluorescent Sensors and Switches.," *Chem. Rev.*, vol. 97, no. 5, pp. 1515–1566, Aug. 1997.
- [2] B. Valeur, "Design principles of fluorescent molecular sensors for cation recognition," *Coord. Chem. Rev.*, vol. 205, no. 1, pp. 3–40, Aug. 2000.
- [3] G. K. Walkup, S. C. Burdette, S. J. Lippard, and R. Y. Tsien, "A New Cell-Permeable Fluorescent Probe for Zn 2+," J. Am. Chem. Soc., vol. 122, no. 23, pp. 5644–5645, Jun. 2000.
- [4] S. Weerasinghe, P. E. Smith, and B. M. Pettitt, "Structure and stability of a model pyrimidine-purine DNA triple helix with a GC.cntdot.T mismatch by simulation," *Biochemistry*, vol. 34, no. 50, pp. 16269–16278, Dec. 1995.
- [5] I. M. Lagoja, "Pyrimidine as Constituent of Natural Biologically Active Compounds," *Chem. Biodivers.*, vol. vol 2, 2005.
- [6] C. Adachi, "Third-generation organic electroluminescence materials," Jpn. J. Appl. Phys., vol. 53, no. 6, p. 60101, Jun. 2014.

# Nanokompozitinių deimanto tipo amorfinės anglies dangų su sidabro nanodalelėmis abliacija femtosekundinio lazerio interferenciniu lauku

# Ablation of amorphous diamond-like carbon nanocomposite films with embedded silver nanoparticles by femtosecond laser interference field

<u>Aušrinė Jurkevičiūtė</u><sup>1</sup>, Linas Šimatonis<sup>1</sup>, Andrius Vasiliauskas<sup>1</sup>, Tomas Tamulevičius<sup>1</sup>, Jacek Fiutowski<sup>2</sup>, Horst-Günter Rubahn<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Materials Science, Kaunas University of Technology, K. Baršausko Str. 59, LT-51423 Kaunas, Lithuania <sup>2</sup>Mads Clausen Institute, University of Southern Denmark, Alsion 2, DK-6400 Sønderborg, Denmark ausrine.jurkeviciute@ktu.lt

Plasmonics are of great interest and numerous research are dedicated for investigation of localized surface plasmons of metallic nanostructures [1]. By choosing the right concentration and surface structures, plasmonic nanocomposites can be used as broadband anti-reflective and absorbing coatings, high sensitivity sensors, layers to increase efficiency of solar cells [2, 3], etc. Silver has strong plasmonic interactions, but it can easily get oxidised [4]. Thus various attempts are made to prevent this, such as embedding particles in a passivating matrix [5].

In this work we present thin films of silver nanoparticles embedded in amorphous diamond-like carbon matrix (DLC:Ag). The films are patterned employing femtosecond laser interference ablation.

DLC:Ag films were deposited on silicon and quartz substrates employing magnetron sputtering in direct current mode. A mixture of acetylene and argon gas as well as silver target were used. The gas flow of argon was 70-80 sccm, while of acetylene – 5.4-11.7 sccm. The supply current was up to 0.15 A and voltage up to 420 V. The deposition time varied between 178 s and 321 s.

One-dimensional (1D) periodic structures in DLC:Ag films were ablated using Yb:KGW femtosecond laser pulses (pulse duration 290 fs). Second harmonic laser wavelength of 515 nm was chosen for the microfabrication. The laser beam was separated into two using diffractive element and then overlapped with 4f lens system into one spot on the surface of the sample to create the interference pattern. The system was calibrated so that each of these beams would have the same power to get high interference contrast. The pitch of the pattern was altered by changing the angle of the incidence. To find best parameters of microfabrication the laser fluence was varied from 1 mJ/cm<sup>2</sup> to 27 mJ/cm<sup>2</sup>. The number of pulses was increased from 1 000 to 125 000 to observe the effect of accumulation. The total area of ablated pattern was  $300 \times 300 \,\mu\text{m}^2$ . For each pitch, the total of 25 patterns with different micromachining parameters were created

The ablated structures were investigated using scanning electron microscope (SEM, Hitachi S-4800) and helium ion microscope (HIM, Zeiss ORION NanoFab). From the microscope images (fig. 1) it was confirmed, that pitches of 1D structures are 1.32  $\mu$ m, 0.80  $\mu$ m and 0.58  $\mu$ m, respectively.



Figure 1. a) HIM image of 1.32 μm pitch 1D structure in DLC:Ag with 6.5 at.% silver content. Micromachining parameters: 1 mJ/cm<sup>2</sup> fluence, 27 000 pulses.
b) SEM image of 0.58 μm pitch 1D structure in DLC:Ag

with 15.3 at.% silver content. Micromachining parameters: 1 mJ/cm<sup>2</sup> fluence, 1 000 pulses.

It was determined, that 27 mJ/cm<sup>2</sup> fluence is too high for ablation for all pitches, since all of the surface is affected and where are no visible lines of nanoparticles on the surface. 17 mJ/cm<sup>2</sup> fluence is too high for smallest pitch (0.58  $\mu$ m) structures for the same reason. While for the bigger pitches at this fluence the structure is only visible after using 1 000 pulses ablation. The one-dimensional periodic structures are more pronounced in thin films with higher silver content (15.3 at%). In conclusion, femtosecond laser ablation by interference field is suitable for fabricating one-dimensional periodic structures of silver nanoparticles in amorphous diamond-like carbon matrix.

Acknowledgements. Aušrinė Jurkevičiūtė acknowledges ERASMUS+ scholarship for the internship at Mads Clausen Institute, University of Southern Denmark. *Keywords: silver nanoparticles, femtosecond laser ablation, interference field, helium ion microscopy* 

### Literature

- J. Vieaud, O. Merchiers, M. Rajaoarivelo, M. Warenghem, Y. Borensztein, V. Ponsinet and A. Aradian, Thin Solid Films 603, 452-464 (2016).
- [2] M. K. Hedayati, M. Abdelaziz, C. Etrich, S. Homaeigohar, C. Rockstuhl and M. Elbahri, Materials 9(8), 636 (2016).
- [3] Y. K. Zhong, S. M. Fu, W. Huang, D. Rung, J. Y.-W. Huang, P. Parashar and A. Lin, Optics Express 25(4), A124-A133 (2017).
- [4] C. Wu, X. Zhou and J. Wei, Nanoscale Research Letters 10, 354 (2015).
- [5] G. Schmidl, J. Dellith, H. Schneidewind, D. Zopf, O. Stranik, A. Gawlik, S. Anders, V. Tympel, C. Katzer, F. Schmidl, W. Fritzsche, Materials Science and Engineering B 193, 207-216 (2015).

# Plonasluoksnių cerio oksido dangų formavimas ir tyrimas Ramano spektrometrija Formation and Raman study of doped cerium oxide thin films

<u>Nursultan Kainbayev</u>, Mantas Sriubas, Živilė Rutkūnienė, Kristina Bočkutė, Giedrius Laukaitis Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368, Kaunas nursultan.kainbayev@ktu.edu

Naujų funkcinių medžiagų, kurių pagrindas yra oksidai (katalizatoriai, elektrocheminių prietaisų priešslėgio elektrodai, kietojo oksido kuro elementai), įskaitant cerio (IV) oksidą, sukūrimas yra perspektyvi mokslinių tyrimų sritis, atitinkanti prioritetinę pasaulio mokslo ir technologijų plėtros sritį "Technologijos funkcinių nanomedžiagų gamybai ir perdirbimui ". Cerio oksidas ((CeO)<sub>(2- $\delta$ )</sub>) turi fluorito struktūrą su Fm3m erdvine grupe. Kompozitinės medžiagos CeO<sub>2</sub>-Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ir CeO<sub>2</sub>-Sm<sub>2</sub>O<sub>3</sub> plačiai naudojamos pramonėje dėl cerio gebėjimo lengvai pakeisti valentinę būseną tarp oksiduoto ir redukuoto cerio Ce<sup>3+</sup>  $\rightleftharpoons$  Ce<sup>4+</sup>.

Ramano smailės poslinkis šviesos bangų ilgių skalėje priklauso nuo molekulinių – struktūrinių medžiagos savybių. Ramano smailė ties 465 cm<sup>-1</sup>, atitinkanti simetrišką Ce-O<sub>8</sub> vibraciją, yra jautri bet kokiems deguonies gardelės simetrijos pakitimams, įskaitant cerio dioksido deguonies stechiometrijos pakitimus. Smailės poslinkis daugiausia priklauso nuo deguonies vakansijų kiekio, kurį lemia priemaišos koncentracija.

Atlikus Ramano spektroskopijos analizę plonoms cerio oksido dangoms, suformuotoms garinant elektronų spinduliu, kurių kristalitų dydis yra nuo 4 nm iki 300 nm buvo nustatyta, kad pagrindinis poveikis, susijęs su kristalitų dydžio sumažėjimu, yra smailės ties 465 cm<sup>-1</sup> padėties kitimas, asimetriškumas ir jos platėjimas, atitinkantis trigubai išsigimusią  $F_{2g}$  aktyviąją modą. Šie rezultatai patvirtina, kad smailės pusplotis tiesiškai priklauso nuo kristalitų dydžio. Ramano smailės poslinkį į mažesnių energijų sritį lemia cerio oksido gardelės parametrų didėjimas, mažėjant dalelių dydžiui. Tuo pačiu, smailės pločio padidėjimą lemia nehomogeninės gardelės įtempiai.

Ploni Sm<sub>0,15</sub>Ce<sub>0,8</sub>O<sub>2</sub>, Sm<sub>0,2</sub>Ce<sub>0,8</sub>O<sub>2</sub>, Gd<sub>0,15</sub>Ce<sub>0,8</sub>O<sub>2</sub>, ir Gd<sub>0,2</sub>Ce<sub>0,8</sub>O<sub>2</sub> sluoksniai buvo suformuoti ant SiO<sub>2</sub>, Alloy 600 (Fe-Ni-Cr), Si(111), Si (100), ir Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> padėklų, juos prieš dangų formavimą nuvalius ultragarsu gryname acetone 10 minučių. Atsitiktiniai nešvarumai buvo pašalinti, naudojant Ar<sup>+</sup> jonų plazmą 10 minučių prieš dangų formavimą vakuuminėje garinimo elektronu spinduliu kameroje. Plonasluoksnės dangos buvo formuojamos keičiant technologinius parametrus: dangų nusodinimo greitį nuo 0,2 nm/s iki 0,8 nm/s ir padėklo temperatūrą garinimo metu nuo 20 °C iki 600 °C.

Suformuotų dangų struktūra buvo tiriama rentgeno spindulių difraktometru, naudojant  $\Theta/\Theta$  geometriją,  $20^{\circ} - 70^{\circ}$  kampų intervale (Cu K $\alpha$  spinduliuotė,  $\lambda = 0,154059$  nm). EVA programinė įranga ir PDF-2 duomenų bazė buvo naudojamos charakteringųjų difrakcijos smailių identifikavimui. Kristalitų dydis buvo nustatytas TOPAS programine įranga. Ramano spektrometrijos matavimai buvo atlikti naudojant konfokalinį Ramano spektrometrą Solver Spectrum NT-MDT su trimis lazeriais (633 nm, 532nm, 473 nm), trimis difrakcinėmis gardelėmis, suteikiančiomis skirtingą spektrinę skiriamąją gebą (1800/500, 600/600, 150/500) ir CCD kameros detektoriumi iDus (Andor). Detektorius buvo atšaldytas iki -65 ° C Peltier elementu. Atliekant Ramano tyrimą, smailių padėtys buvo nustatytos, sutapdinant duomenis į Lorenco linijos formą, naudojant naudojant kompiuterinę programą OriginPro.

Ramano smailių poslinkis į mažesnių energijos sričių ir žemesnių dažnių regioną yra susijęs su didėjančia priemaišų koncentracija. Gautoji priklausomybė sutampa su literatūros duomenimis. Ši priklausomybė labiau pasireiškia plonasluoksnėms cerio oksido dangoms su samario priemaišomis lyginant su dangomis su gadolinio priemaišomis (1 pav.), dėl dviejų priežasčių, t.y. dėl deguonies vakansijų kiekio padidėjimo legiruojant cerio oksidą žemesnio valentingumo priemaišomis ir dėl gardelės parametro  $\Delta$ a pokyčio susijusio su dažnio  $\Delta\omega$ pokyčiu:

$$\Delta \omega = -3\gamma \omega_0 \Delta a / a_0 \tag{1}$$

kur  $\omega_0$  yra Ramano dažnis,  $\Delta a$ , ir  $a_0$  yra CeO<sub>2</sub> gardelės parametrai,  $\gamma = 1,24$  Gruneiseno parametras.



1 pav. a) Skirtingos elementinės sudėties Gd ir Sm legiruotos cerio oksido plonasluoksnės dangos (GDC10, GDC20, SDC15 SDC 20) ant Alloy600 padėklo

Reikšminiai žodžiai: cerio oksidas, Ramano spektrometrija, plonasluoksnės dangos.

# Periodinių struktūrų formavimas silicio fotovoltiniams elementams metalu inicijuotu ėsdinimu

## Formation of the periodic structures for silicon photovoltaics by metal assisted etching

<u>Mindaugas Kamarauskas</u><sup>1</sup>, Marius Treideris, Audružis Mironas, Vladimir Agafonov, Arūnas Šetkus <sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius <u>mindaugas.kamarauskas@ftmc.lt</u>

Vienas pagrindinių XXI amžiaus pradžios uždavinių – atsinaujinančių energijos šaltinių praktinio pritaikymo plėtra. Fotovoltinių elementų (FV) technologija pritaikyta saulės celėms gaminti tiek, jog pagal energijos generavimo kaštus jau konkuruoja su tradicinėmis pramoninės energetikos rūšimis. Kol kas siliciu paremti saulės elementai yra labiausiai paplitę rinkoje. Nors moderniosios saulės elektrinės kaštuose elementams tenka tik trečdalis, tačiau aštri konkurencija tarp gamintoju vis dar skatina tiek mažinti procesu sąnaudas, tiek didinti elementų efektyvumą. 3D fotovoltinio elemento koncepcija [1], paremta silicio gilaus paviršiaus raižymo matrica ir reljefą atkartojanti p-n sandūra, ženkliai padidintų paviršiaus plotą, nekeičiant tūrio. Tai sumažintų gamyboje naudojamos medžiagos kiekį, elemento storį ir svorį. Dėl to, yra svarbu suderinti gilaus tekstūravimo sąlygas su sąlygomis aukštam elementų našumui gauti.

Periodinių gilaus profilio struktūrų formavimas yra vienas iš kelių reikalingų išspręsti technologinių uždavinių. Šiuo metu tai atliekama sausu ėsdinimu per litografijos metodu iš užgarinto metalo suformuotą kaukę [2]. Tačiau ši metodika yra per brangi elementų gamybai. Mūsų darbo tikslas pakeisti sausą ėsdinimą metalu inicijuotu cheminiu ėsdinimu ir per litografijos būdu specialiai suformuotą metalinę kaukę silicio padėkle gauti gilaus profilio periodinę struktūrą.

Periodinėms struktūroms formuoti buvo naudojami p-tipo, (100) orientacijos, 1-5  $\Omega$ cm varžos silicio padėklai. Litografijos būdu suformavus piešinį ant padėklų buvo magnetroninio dulkinimo metodika užgarinti 10 ir 80 nm storio sidabro, nikelio ar vario



1 pav. Periodinės struktūros formavimas naudojant metalu inicijuotą ėsdinimą

sluoksniai. Atlikus nukėlimo procedūra buvo suformuoti 2 μm skersmens metaliniai apskritimai išsidėstę periodiškai. Metalu inicijuotas ėsdinimas buvo atliekamas HF,  $H_2O_2$  ir  $H_2O$  mišinio ėsdiklyje (1 pav.). Optinės mikroskopijos metodika nustatyta kaip keičiasi struktūrų matmenys plokštumoje bei naudojant atominės jėgos mikroskopiją išmatuoti ėsdinimo gyliai bei struktūrų matmenys plokštumoje. Buvo įvertinta struktūrų parametrų po ėsdinimo priklausomybė nuo metalo sluoksnio storio, ėsdinimo laiko ir ėsdiklio sudeties.

Tipinė metalu inicijuotu cheminiu ėsdinimu suformuotos periodinė struktūra parodyta 2 pav.



2 pav. Periodinės struktūros silicio paviršiuje SEM nuotrauka (skalė 10 μm)

Atlikti tyrimai parodė, kad naudojant plonus metalo sluoksnius galima suformuoti periodines struktūras silicio paviršiuje. Tokių struktūrų parametrai priklauso nuo metalo sluoksnio, ėsdinimo trukmės bei ėsdiklio sudėties. Parenkant šiuos parametrus galima gauti kontroliuojamų parametrų matricą 3D elemento formavimui.

Reikšminiai žodžiai: metalu inicijuotas ėsdinimas, silicis, kontroliuojamas ėsdinimas

### Padėka

*Tyrimą finansuoja Lietuvos mokslo taryba (sutarties Nr. MIP-70/2015).* 

- [1] A. Setkus, I. Šimkiene, M. Treideris, V. Bukauskas, A. Reza, A Nano-Hole Array Based 3D C-Si Solar Cell with Enhanced Light Conversion Characteristics, 28th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition Proceedings, 312 – 315, 2013, doi:10.4229/28thEUPVSEC2013-1AV.2.20.
- [2] P. Wang, Z. Liu, K. Xu, D. J. Blackwood, M. Hong, A. G. Aberle, and I. M. Peters, IEEE J. Photovolt, 7(2), 493-501 (2017).

## Skandžio ir cerio oksidais stabilizuoto cirkonio oksido keramikų elektrinės savybės

## Electrical properties of scandia- and ceria-stabilized zirconia ceramics

Saulius Kazlauskas, Edvardas Kazakevičius, Algimantas Kežionis Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9/3, LT-10222 Vilnius saulius.kazlauskas@ff.vu.lt

Fluorito kristalinės struktūros deguonies jonų laidininkai yra naudojami kietųjų kūnų oksidų kuro elementuose, bei kituose elektrocheminiuose įtaisuose.

Skandžio oksidu stabilizuotas cirkonio oksidas vra vienas iš laidžiausių stabilizuoto cirkonio oksido junginiu. Tačiau esant 9-13 mol% Sc<sub>2</sub>O<sub>3</sub> koncentracijoms, šių medžiagų temperatūrai pasiekus mažaug 800-820 K, jose įvyksta struktūrinis fazinis virsmas iš romboedrinės į kubinę fazę [1]. Dėl struktūrinės fazės nestabilumo tokia medžiaga netinka praktiniams taikymams. Tačiau yra žinoma, kad šią medžiagą legiravus nedideliu kiekiu kitų oksidų, jos kubinę fazę galima išlaikyti iki kambario temperatūros [2]. Šiame darbe yra pristatomos 10 mol% Sc<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ir 1 mol% CeO<sub>2</sub> stabilizuoto cirkonio oksido (10Sc1CeSZ) elektrinės savybės. Jos bus lyginamos su anksčiau ištirto 10 mol% Sc2O3 stabilizuoto cirkonio oksido (10ScSZ) keramikų elektrinėmis savybėmis [1].

Keramikos iš 10Sc1CeSZ miltelių buvo sukepinamos 2h 1500 °C temperatūroje. Naudojant Rentgeno spindulių difrakcijos metodą nustatyta, kad pagamintos 10Sc1CeSZ keramikos kambario temperatūroje yra kubinės fazės. Jų elektrinių savybių tyrimai buvo atlikti matuojant pilnutinę kompleksinę varžą dažnių intervale nuo 1 Hz iki 10 GHz, 300-900 K temperatūrose [3].

Dažninėse pilnutinės kompleksinės varžos priklausomybėse buvo stebėtos dispersijos, susijusios su krūvininkų relaksacija elektriniame lauke. Relaksacijos trukmės turi tam tikrą pasiskirstymą, kurio forma, plotis ir kitos savybės suteikia informacijos apie krūvininkų dinamika medžiagoje. Rezultatų analizei buvo naudojamas specialus algoritmas, skirtas nustatyti krūvininkų relaksacijos trukmių pasiskirstymą (RTP) iš kompleksinės varžos priklausomybių. dažninių Krūvininkų RTP funkcija buvo randama skaitmeniškai sprendžiant integralinę lygtį [4]:

$$\frac{\tilde{z}(\omega)}{z_{\rm b}} = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\tau) \cdot \frac{1 - i\omega\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} d\lg(\tau). \tag{1}$$

Čia  $f(\tau)$  yra ieškomoji RTP funkcija,  $\tilde{z}(\omega)$  bandinio savitoji pilnutinė kompleksinė varža dažnyje  $\omega$ ,  $z_b$  - bandinio žemadažnė varža,  $\tau$  - relaksacijos trukmė, i - menamasis vienetas. Lygtis (1) yra vadinamasis nekorektiškasis uždavinys, kuris sprendžiamas uždedant papildomas (vadinamas reguliarizavimu) sąlygas. Tik labai tikslūs plačiajuosčiai  $\tilde{z}(\omega)$  matavimų duomenys leidžia surasti patikimą RTP funkcijos pavidalą.

Rezultatai parodė, kad 10ScSZ atveju krūvininkų RTP funkcija fazinio virsmo aplinkoje žymiai išplinta. O

10Sc1CeSZ atveju krūvininkų RTP augant temperatūrai tolydžiai ir monotoniškai siaurėja.



1 pav. Keramikų kristalitinių laidumų priklausomybė nuo atvirkštinės temperatūros

Keramikų kristalitinis laidumas buvo nustatytas iš savitosios varžos grafikų kompleksinėje plokštumoje  $\rho'' = f(\rho')$ . Kaip matyti iš 1 paveikslo, kaitinimo ir vėsinimo ciklų metu išmatuoti 10Sc1CeSZ keramikų kristalitiniai laidumai sutampa. Kai tuo tarpu kristalitinio laidumo priklausomybė nuo temperatūros 10ScSZ keramikoms turi histerezę. Taip pat matyti, kad visoms žemesnėms nei 820 K temperatūroms (kai 10ScSZ fazė yra romboedrinė) kristalitinis 10Sc1CeSZ laidumas yra 10 ar daugiau kartų didesnis už 10ScSZ kristalitinį laidumą. Taigi, šiuo atveju 1 mol% CeO<sub>2</sub> pridėjimas į 10ScSZ sustabdo mažesnio laidumo romboedrinės fazės atsiradimą žemose temperatūrose.

Reikšminiai žodžiai: pilnutinė kompleksinė varža, keramika, laidumas, relaksacijos trukmių pasiskirstymo funkcija.

- S. Kazlauskas, A. Kežionis, E. Kazakevičius, A.F. Orliukas, Electrochimica Acta 134, 176-181 (2014).
- [2] O. Yamamoto, Y. Arati, Y. Takeda, N. Imanishi, Y. Mitzutani, M. Kawai, Solid State Ionics 79(2), 137–142 (1995).
- [3] A. Kežionis, S. Kazlauskas, D. Petrulionis, A.F. Orliukas, IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques 62(10), 2456-2461 (2014).
- [4] S. Kazlauskas, A. Kezionis, T. Salkus, A.F. Orliukas, Solid State Ionics 231, 37 (2013).

# Indolo ir benzo[b]karbazolo dariniai – mėlyni spinduoliai nelegiruotiems organiniams šviesos diodams

## Indole and benzo[b]carbazole derivatives as blue emitters for non-doped light emitting diodes

Rasa Keruckienė<sup>1</sup>, Khrystyna Ivaniuk<sup>2</sup>, Dmytro Volyniuk<sup>1</sup>, Juozas Vidas Gražulevičius<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Radvilėnų pl. 19, LT-50254 Kaunas

<sup>2</sup>Lviv Polytechnic National University, Stepan Bandera 12, 79013 Lviv, Ukraine

rasa.keruckiene@gmail.com

Organic light emitting diodes have attracted considerable attention due to their great application potential in large area flat panel displays and solid state lighting [1]. The search for suitable materials for these devices is still a subject of interest. Unbalanced charge injection and transport is a major problem in blue or deep-blue OLEDs, especially in non-doped devices [2, 3]. Balancing the charge transport is one of the most important factors to obtain highly efficient OLEDs. Recently, bipolar materials containing electron donor and electron acceptor moieties were used to improve the balance of charge transport in OLEDs [4].

The selection of appropriate materials for each layer of OLED is of great importance. However, most of the methods used for the synthesis of electroactive materials suffer from the drawbacks such as low yields, prolonged reaction times, use of hazardous, expensive, moisture-sensitive reagents, harsh reaction conditions, tedious workup procedure, and difficulty in recovery, and reusability of the catalysts [5]. Therefore, there is a need to develop efficient and versatile methods for the synthesis of electroactive compounds with the balanced mobility values of holes and electrons.

In this work, regioselective acid-catalyzed reactions of 1H, 1-methyl, and 1-naphthylindole with o-phthalbenzaldehyde were employed for the synthesis of efficient charge-transporting and emitting materials.



non-doped OLEDs

The synthesized materials were characterized by NMR, IR and mass spectrometries. They form molecular glasses with glass transition temperatures ranging from 86 to 116 °C. Naphthyl- substituted derivatives of indolyl benzo[b]carbazole show high thermal stabilities with 5 % weight loss temperatures of 409 and 413 °C, while their methyl-substituted counterparts exhibit by ca. 90 °C lower 5 % weight loss temperatures. Their solutions exhibited blue emission with quantum yields up to 67 %.

The newly synthesized derivatives are electrochemically stable. Their ionization potential values estimated by cyclic voltammetry are in the range of 5.49-5.65 eV, while the values obtained using photoelectron emission spectrometry are in the range of 5.16-5.28 eV. The layers of the compounds exhibit ambipolar charge transport with time-of-flight charge drift mobility values well exceeding  $10^{-3}$  cm<sup>2</sup>/(Vs) at high electric fields. The non-doped naphthylindole and benzo[b]carbazole-based device B emitted deep-blue light (Figure 1) with the emission maximum at 410 nm and CIE of (0.21, 0.16), and it exhibited a maximum EQE of 4.7 %.

*Keywords: OLED, indole, benzocarbazole, bipolar charge transport.* 

- [1] R. Xu, Y. Li and J. Tang, J. Mater. Chem. C 4, 9116 (2016).
- [2] Q. Wang, B. Sun, and H. Aziz, Adv. Funct. Mater. 24, 2975 (2014).
- [3] X. L. Yang, X. B. Xu, and G. J. Zhou, J. Mater. Chem. C, **3**, 913 (2015).
- [4] Yuan Y, Chen J-X, Lu F, Tong Q-X, Yang Q-D, Mo H-W, et al. Chem Mater, 25, 4957 (2013).
- [5] Charles R.K. Changunda, Adriaan E. Basson, Sandy F. van Vuuren, Amanda L. Rousseau, Moira L. Bode, Tetrahedron, 73, 137 (2017).

### Kumuliacinis magnetinio srauto prasiskverbimas į II rūšies superlaidininko plonąjį sluoksnį

## Cumulative magnetic flux penetration into II-type superconductor thin film

<u>Oleg Kiprijanovič</u>, Steponas Ašmontas

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

<u>oleg.kiprijanovic@ftmc.lt</u>

Po aukštatemperatūrinio superlaidumo atradimo praėjo jau daugiau nei 30 metų. Superlaidumas yra jautrus reiškinys, suardomas viršijus kritinę temperatūrą, kritinį magnetinį lauką ar kritinę srovę. Puslaidininkių fizikos institute tyrimų intensyvumas susilpnėjo šio amžiaus pradžioje, bet liko ir neišaiškinti klausimai, kaip magnetinio srauto prasiskverbimo į plonąjį sluoksnį, taip ir į superlaidžių bandinių tūrį, ypatumai.

Institute naudojant nanosekundinės trukmės impulsus buvo nagrinėjami plonieji YBaCuO sluoksniai. Įtampos atsiradimo momentu buvo registruojama kritinė srovė. Suardymo srovė nustatoma, kai didėjant srovei, sluoksnis suardomas siauru kanalu skersai juostelės. Plonose 200-400 nm storio juostelėse buvo pasiekti kritinės srovės tankiai artimi maksimaliai reikšmei 107 A/cm<sup>2</sup> [1]. Eksperimentai parodė, kad augant kritinės srovės tankiui, t.y., kai superlaidžios S būsenos kokybė gerėja, sluoksnio suardymo srovės reikšmė vis artėja prie kritinės srovės reikšmės. Buvo aišku, kad šis reiškinys surištas su sūkuriu, II rūšies superlaidininko magnetinio srauto kvantų, kraštinio barjero nugalėjimu ir įsiskverbimu į juostelę. Sūkuriai įsiskverbia iš priešingų juostelės kraštų taškų ir išnyksta viduryje. Remdamiesi fizikiniais dėsniais pateiksime aukšto kritinio tankio juostelių suardymo priežasčių analizę, iš kurios bus aprašytas srauto prasiskverbimo mechanizmas.

Nagrinėjant suardytų superlaidžių sluoksnių elektronu skenuojančio mikroskopo nuotraukas, nustatyta, kad srauto prasiskverbimo metu neilgas plyšys atsiranda statmenai srovės linijoms. Pagal plyšių krypčių keitimą galima atstatyti srovės linijų krypčių keitimą. Iš šių nuotraukų paaiškėjo, kad srovės judėjimo metu pasireiškia kumuliacinis efektas. Šis efektas pasireiškia tik kai kampu susiduria nesuspaudžiamos terpės ir susiformuoja kumuliacinė čiurkšlė. Pvz., kai lašelis kritęs į vandenį formuoja įdubą, kuriai kolapsuojant čiurkšlė juda į viršų.

Juostelėms įvestas  $\lambda_L^2/d$  efektyvus prasiskverbimo gylis. Čia d – juostelės storis, o  $\lambda_L$  – Londono prasiskverbimo gylis. Mūsų atveju toks gylis yra 1.1-1.3 µm ir kumuliaciniai įvykiai nuotraukose palyginami su šiuo dydžiu. Taigi riboje tarp S ir normalios N būsenų efektyvus prasiskverbimo gylis su Meisnerio srovėmis turi nesuspaudžiamumo savybes.

Darbe [2] parodyta, kad į ploną sluoksnį gali įsiskverbti ne tik pavieniai sūkuriai, o ir kaip padidinto tankio, artimo antrajam kritiniam laukui  $H_{c2}$ , sūkurių ryšulys. Jeigu ryšulys dėl stipraus Meisnerio efekto neįsiskverbs į sluoksnį, juostelės krašte susiformuos pusiau elipsinės formos N būsena. Nagrinėsime situaciją, pavaizduotą 1 pav., kai dėl lokalaus srovės linijų išlinkimo prie krašto, Lorenco jėga  $F_L$  traukianti srautą į vidų turės dedamąją išilgai transportinės srovės *I*. Dėl to N sritis iš abiejų pusių apeina didžiausio pasipriešinimo kryptį. Šio judėjimo metu išsiskiria energija ir čia yra kritinės srovės požymis. Augant kuproms, S srovė įdubos centre mažės. Mažės ir išstūmimo jėga.



Katastrofu teorijoje [3] nagrinėtas strypo perpliauškinimo uždavinys. Jame, jei sulenktame žemyn strype pridedama nedidelė jėga iš apačios į viršų, strypas katastrofiškai perpliauškinamas į viršų. Mūsų atveju kolapso momentu atsiranda kumuliacinė čiurkšlė dėl S-N ribos nesuspaudžiamumo savybių. 1 pav. S-N ribos padėtis po kolapso pavaizduota raudonai. Užštrichuota akies formos sritis yra tipinis suardyto sluoksnio tekstūros elementas. Aprašytas atvejis charakteringas suardymo srovės pasiekimui. Kumuliacinės čiurkšlės greitis tuo didesnis, kuo stipresnis Meisnerio efektas. Jos judėjimo metu viršūnėje koncentruojasi srovė ir lokaliai gali viršyti ne tik kritine, bet ir suardymo srove.

Tokiu būdu geros kokybės sluoksniuose magnetinio srauto įsiskverbimo metu pasireiškia kumuliacinis efektas. Kumuliacinės čiurkšlės poveikis, jos greitis ir stiprus srovės didėjimas jos viršūnėje veda prie sluoksnio suardymo. Tuo ir paaiškinama tai, kad suardymo srovės reikšmės vis artėja prie kritinės srovės reikšmių. Turint tokį kokybinį modelį, galima tiksliau paruošti eksperimentą.

Reikšminiai žodžiai: II rūšies superlaidinikas, plonas sluoksnis, magnetinio srauto kvantai, Meisnerio efektas, kumuliacinis efektas, magnetinio srauto prasiskverbimas

- S. Balevičius, F. Anisimovas, R. Butkutė, A. Čenys, V. Jasutis, A. Jukna, O. Kiprijanovič, V. Lisauskas, B. Vengalis, Lietuvos Fizikos Žurnalas, 36, 233-235 (1996).
- [2] V. Pyragas, S. Balevičius, O. Kiprijanovič, A. Jukna, Vacuum technology and equipment, Publishing of Moscow state university, 3-4 (1999).
- [3] T. Poston, I. Stewart, *Catastrophe Theory and Its Applications* (New York, Dover, 1998).

# Žemo slenksčio sustiprinta savaiminė spinduliuotė organiniuose fluoreno darinių kristaluose

# Low threshold amplified spontaneous emission in organic crystals based on fluorene derivatives

<u>Gediminas Kreiza<sup>1</sup></u>, Paulius Baronas<sup>1</sup>, Edvinas Radiunas<sup>1</sup>, Povilas Adomėnas<sup>1</sup>, Chihaya Adachi<sup>2</sup>, Karolis Kazlauskas<sup>1</sup>, Saulius Juršėnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Applied Research, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup> Center for Organic Photonics and Electronics Research (OPERA), Kyushu University, 744 Motooka, Nishi, Fukuoka

819-0395, Japan

gediminas.kreiza@tmi.vu.lt

Organic single crystals have attracted a lot of interest in recent years for solid-state laser applications because of their high chemical purity and long range order [1]. High fluorescence quantum yield values and high radiative decay rates are one of the main factors determining amplified spontaneous emission (ASE) threshold. At this point controlling of these properties in crystalline state not only by molecular design but also by intermolecular interactions becomes of crucial importance [2].

In this work two fluorene derivatives (FpF and F2pF) were designed to possess twisted molecular structure comprising of singly bonded phenyl and fluorene chromophores with out-of-plane sticking dimethyl moieties for reduced intermolecular coupling, and thus for enhanced fluorescence and ASE properties in the solid state. The flexible molecular backbone also facilitated increased electron-vibronic coupling implying large Stokes shift (0.5 eV) and thereby reduced reabsorption of emission, which resulted in demonstration of fluorescence quantum yields up to 90% and radiative decay rates up to  $1.3 \times 10^9$  s<sup>-1</sup> in a dilute polystyrene matrix.

Both fluorene derivatives showed superior fluorescence properties (high quantum yields and high radiative decay rates) not only in a dilute polymer matrix but also in single crystals grown by physical vapor transport in nitrogen atmosphere which was determined by weak intermolecular interactions. The high radiative rates accompanied by excellent waveguiding properties, favorable orientation of transition dipole moments as well as non-overlapping excited-state absorption and gain regions enabled achieving extremely low ASE thresholds (1.8 kW/cm<sup>2</sup> for FpF and 0.7 kW/cm<sup>2</sup> for F2pF) in these fluorene-based single crystals. The achieved low threshold values encourage employment of rationally designed molecules in organic crystals for solid state lasing applications.







Keywords: organic single crystals, fluorene derivatives, ampified spontaneous emission.

#### Literature:

- H.-H. Fang, J Yang, J. Feng, T Yamao, S Hotta, H.-B. Sun, Laser & Photonics Reviews, 1, 687 (2014).
- [2] P.M. Boersenberger, D.S. Weiss, Organic Photoreceptors for Imaging Systems (New York, Besel, Hong Kong, 1993).

## Fluorinto etileno propileno polimero mechaninių savybių tyrimas

# Mechanical properties testing of fluorinated ethylene propylene

Mantas Lukauskas<sup>1</sup>, Brigita Abakevičienė<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas

<sup>2</sup>Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas

mantas.lukauskas@ktu.edu

Plonasluoksnėmis plėvelėmis galima laikyti medžiagas, kurių geometrinis storis yra nuo kelių nanometrų iki keliasdešimt mikrometrų. Plonasluoksnės dangos per pastaruosius metus yra vis labiau praktiškai taikomos, kadangi vystantis įvairioms pramonės šakoms - optikai, informatika, jos gali suteikti tai, ko negali masyvios medžiagos. Fluoropolimerai šiuo metu yra panaudojami daugelyje sričių: automobilių pramonėje, aviacijoje, medicinoje ir kitose [1]. Paskutiniu metu fluoropolimerai pradedami taikyti ir mikroelektronikos gamyboje, kur šių polimerų naudojimas gali pakeisti, brangesnes medžiagas, pavyzdžiui, silicio dioksidą (angl. Fused silica) [2]. Taip pat vienos iš plačiai vystomų fluoropolimerų panaudojimų sričių yra nanostruktūrizuoti kuro elementai [3].

Plonasluoksnių polimerinių plėvelių mechaninių savybių tyrimams, buvo naudojamas mikrotempimo įrenginys [4].(žr. 1 pav.). Naudojamos sistemos parametrai: taškų poslinkio matavimo tikslumas 50 nm; matuojamos jėgos intervalas nuo 0 iki 2,5 N; jėgos matavimo tikslumas 0,01 N; maksimalus galimas pailgėjimas 200 µm.



1 pav. Mikrotempimo įrenginys: 1- įrenginio judančioji plokštė; 2- bandinio laikiklis; 3- įrenginio pagrindas; 4pjezokeraminė pavara (strypas); 5- tvirtinimo strypai; 6tvirtinimo spyruoklė; 7- tenzojutiklis; 8- bandinys [4]

Šiame darbe mechaniniams bandymams buvo naudojamos 25 µm storio "dog-bone" formos fluorinto etileno propileno (FEP) plėvelės. Šios plėvelės buvo veikiamos UV poveikiu, temperatūriniu ir temperatūriniu *in situ* poveikiu. Iš LabView programoje gautų rezultatų buvo apskaičiuojami įtempiai  $\sigma$  bei deformacijos  $\varepsilon$ . Iš nepaveiktos plėvelės įtempių deformacijų kreivės tiesinės dalies nustatytas Jungo modulis E=584±12 MPa. Polimerinėms medžiagoms laikoma, kad plastinė deformacija prasideda nuo 3%, nustatyta takumo riba yra  $\sigma$ =10,72±0,41 MPa. Apskaičiavus FEP plėvelės Jungo modulio ir takumo ribos vertes šios vertės buvo gautos atitinkamai 554±9 MPa ir 10,68±0,33 MPa. Atlikus mikrotempimo tyrimus su UV spindulių poveikiu paveiktais bandiniais gauti rezultatai parodė Jungo modulio ir takumo ribos verčių padidėjimą. Jungo modulio vertė šių bandinių 669±14 MPa, o takumo ribos vertė 13,91±0,53 MPa.

Taip pat buvo atliekamas temperatūrinis *in situ* poveikis, kurio metu bandinys buvo kaitinamas tempimo metu. Tyrimo metu gauti rezultatai paveikiami žemiau esančioje lentelėje (žr. 1 lentelė).

1 lentelė. *In situ* temperatūrinio poveikio FEP polimerinėms plėvelėms rezultatai

	FEP	
Temperatūra	E (MPa)	σ <sub>0,2</sub> (MPa)
24 °C (kambario temperatūra)	584 (±12)	10,72 (±0,41)
40 °C	446 (±14)	9,24 (±0,28)
50 °C	384 (±9)	7,01 (±0,54)



2 pav. FEP bandinio įtempio-deformacijos kreivės, polimerą veikiant temperatūra *in situ* 

Reikšminiai žodžiai: fluoropolimerai, plonosios plėvelės, mechaninės savybės, mikrotempimo tyrimas

#### Literatūra

[1] T. Hongxiang. Overview of the Development of the Fluoropolymer Industry, Applied Science. [interaktyvus] 2012, 2, 496-512. Prieiga per: doi:10.3390/app2020496

[2] S.H.Penny ir kiti. *Micropatterning of fluoropolymers*, Applied Surface Science [interaktyvus] 2006, 252, 2217–2228. Prieiga per: doi:10.1016/j.apsusc.2005.03.228

[3] S. Renaud ir B. Amedury. *Functional fluoropolymers for fuel cell membranes*, Progress in Polymer Science. [interaktyvus] 2005, 644–687. Prieiga per: doi:org/10.1016/j.progpolymsci.2005.03.004

[4] B. Abakevičienė. Processes of Deposition and Testingo of Mechanical Properties of Polymers and Metal Coated Polymers. Daktaro disertacija. Poitiers universitetas, 2008

## (Bi<sub>x</sub>Na<sub>1-x</sub>)(Mn<sub>y</sub>Nb<sub>1-y</sub>)O<sub>3</sub> keramikų fazinė diagrama

### The phase diagram of (Bi<sub>x</sub>Na<sub>1-x</sub>)(Mn<sub>y</sub>Nb<sub>1-y</sub>)O<sub>3</sub> ceramics

<u>Jan Macutkevič</u><sup>1</sup>, Juras Banys<sup>1</sup> and Andrzej Molak<sup>2</sup> <sup>1</sup>Vilnius university, Physics faculty, Saulėtekio av. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup> Institute of Physics, University of Silesia, ul. Uniwersytecka 4, PL-40-007 Katowice, Poland jan.macutkevic@gmail.com

Sodium niobate (NaNbO<sub>3</sub>) is an oxygen perovskite with the largest number of phase transitions [1]. The phase transition in sodium niobate can be induced by temperature, electric field and particle size [2]. The material gained new attention in the last years due the increased interest in environmental protection, since it is an end member of a number of solid solutions with good piezoelectric properties (for example Na<sub>0.5</sub>K<sub>0.5</sub>NbO<sub>3</sub>) which could replace the widely used lead-based perovskites. NaNbO3 co-doped with N and Mn ions attracts attention for photocatalytic studies [3]. BiMnO<sub>3</sub> is well known antipolar ferromagnet, earlier claimed as multiferroic [4]. In this presentation results of broadband dielectric investigations of mixed (Bi<sub>x</sub>Na<sub>1-x</sub>)  $(Mn_vNb_{1-v})O_3$  (x=0, y=0; x=1, y=1, and x=0.06, y=0.04) ceramics in wide temperature region (25-730 K) are presented. Five phase transitions were observed in NaNbO<sub>3</sub> ceramics on cooling by broadband dielectric investigations in temperature range from 25 K to 1000 K. Despite that  $T_1$ - $T_2$  and S- $T_1$  phase transitions are non polar, they are clearly expressed in dielectric properties of ceramics due the corresponding conductivity anomalies. At higher temperature (above 600 K) the electrical conductivity dominates in the dielectric spectra of ceramics. The electrical conductivity have peculiarities close to  $T_1$ - $T_2$ , S- $T_1$ , P-R phase transitions temperatures. In mixed (Bi<sub>x</sub>Na<sub>1-x</sub>)(Mn<sub>v</sub>Nb<sub>1-v</sub>)O<sub>3</sub> with x=0.06 and y=0.04 the antiferroelectric phase transitions P-Q and Q-R are clearly expressed in dielectric properties, most of phase transitions are shifted to higher temperatures (Fig. 1). At lower temperatures (below 100 K) domains wall dynamics dominate in the dielectric spectra of both composites and the freezing temperature was calculated. At higher x values ( $x \ge 0.5$ ) no ferroelectric phase transition was observed. The microscopic origin of phase transition will be discussed in presentation. The possible multiferroic behaviour for x=04 will be also discussed in the presentation. The dielectric properties of BiMnO<sub>3</sub> are dominated by the huge electrical conductivity and Maxwell-Wagner relaxation. The conductivity activation energy non evenly decreases on heating and due substitution  $Na \rightarrow Bi$  and  $Nb \rightarrow Mn$ . The variation in activation energy relates to the level of ionization of oxygen vacancies and to effects of the high temperature annealing. The electrical properties will be also discussed in terms of the complex impedance and the distribution of relaxation times. The small polaron mechanism of conduction is proposed.



Fig. 1 Phase diagram of (Bi<sub>x</sub>Na<sub>1-x</sub>)(Mn<sub>y</sub>Nb<sub>1-y</sub>)O<sub>3</sub> ceramics

*Keywords: ferroelectrics, ceramics, dielectric permittivity.* 

#### References

[1] H. D. Megaw, Ferroelectrics 7, 87 (1974).

[2] J. Koruza, J. Tellier, B. Malic, V. Bobnar, and M. Kosec, Journal of Applied Physics **108**, 11 (2010).

[3] A. Molak, M. Pilch, Journal of Applied Physics **119**, 204901 (2016).

[4] V. Goian, S. Kamba, M. Savinov, D. Nuzhnyy, F. Borodavka, P. Vanek, A. A. Belik, Journal of Applied Physics **112**, 074112 (2012).

## Nubraukimo ašmenimis metodo pritaikymas formuojant fosforescencinį organinį šviestuką

# Utilization of blade coating method for fabrication of phosphorescent organic light emitting diode

Justina Malakauskaitė, Gediminas Kreiza, Karolis Kazlauskas, Saulius Juršėnas Taikomųjų mokslų institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius justina@fidi.lt

Organinių šviestukų (OLED, angl. organic light emitting diode) technologija - sparčiausiai besivystanti optoelektronikos kryptis. Neribotos galimybės sintetinti naujus organinius junginius bei įvairūs daugiasluoksnių prietaisų gamybos būdai skatina ieškoti tinkamų medžiagų bei efektyvių technologinių sprendimų. Derinant skirtingas technologijas galima optimizuoti OLED gamybą bei žymiai sumažinti jų savikainą taikant taupesnius sluoksnių formavimo metodus. Dėl organinių medžiagų bei tirpiklių ypatumų, ne visos technologijos yra tinkamos pagaminti šviestuką nuo pirmo iki paskutinio sluoksnio. Itin pigi ir taupi nubraukimo ašmenimis technologija yra netinkama formuoti funkcinius sluoksnius iš vandens pagrindo tirpalų dėl jų didelio paviršiaus įtempimo, tačiau puikiai tinka formuoti sluoksnius iš tolueno ar chlorbenzeno pagrindo tirpalų. Taikant besisukančio padėklo, nubraukimo ašmenimis bei vakuuminio garinimo metodus buvo pagaminti organiniai šviestukai, savo parametrais prilygstantys besisukančio padėklo ir vakuuminio garinimo metodais pagamintiems šviestukams. Nubraukimo ašmenimis metodo įdiegimas formuojant spindulinį sluoksnį leidžia 80-85% sumažinti medžiagų sąnaudas palyginus su vienu populiariausių plonų organinių sluoksnių formavimo būdu - besisukančio padėklo metodu.

Šiame darbe OLED buvo suformuotas taikant besisukančio padėklo, nubraukimo ašmenimis ir vakuuminio garinimo metodus. Skylių injekcinis sluoksnis PEDOT:PSS formuojamas besisukančio padėklo metodu, emisinis sluoksnis iš tripletinio spinduolio FIrpic bei PVK:OXD – 7 (8:2) matricos formuojamas nubraukimo ašmenimis metodu, elektronų pernašos medžiaga TPBi bei LiF ir Al kontaktai suformuoti vakuuminio garinimo metu. Pagaminto OLED šviestuko energetinė schema pavaizduota 1-ame



1 pav. OLED energetinių lygmenų schema

paveiksle.

Keičiant tripletinio spinduolio koncentracija emisiniame sluoksnyje buvo sukurta serija šviestukų. Ištirtos jų voltamperinės bei elektroliuminescencinės charakteristikos leido palyginti šiuos šviestukus tarpusavyje bei su literatūroje aptariamais OLED. Didžiausia nustatyta išorinio kvantinio našumo (EQE, angl. external quantum efficiency) vertė siekė 2,1% (2 pav.), kas prilygsta panašių struktūrų šviestukų, suformuotu iprastais gamybos metodais, demonstruojamiems parametrams [1].



2 pav. OLED, su skirtingomis FIrpic koncentracijomis, EQE priklausomybė nuo srovės tankio

Reikšminiai žodžiai: organinis šviestukas, funkciniai organiniai sluoksniai, nubraukimo metodas.

### Literatūra

 Kozhevnikov V N, Zheng Y, Clough M, Al-attar H a, Gri G C, Abdullah K, Raisys S, Jankus V, Bryce M R and Monkman, Chem. Mater. 25 2352–8

## Naftalimido junginių fotofizikinių savybių tyrimas tirpaluose ir plonuose sluoksniuose

## The investigation of photophysical properties of naphtalimide derivatives

Karolina Maleckaitė<sup>1</sup>, Dalius Gudeika<sup>2</sup>, Juozas V. Gražulevičius<sup>2</sup>, Arūnas Miasojedovas<sup>1</sup>, Steponas Raišys<sup>1</sup>, Karolis Kazlauskas<sup>1</sup>, Saulius Juršėnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Taikomųjų mokslų institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Kauno technologijos universitetas,

Radvilėnų pl. 19, LT- 50254, Kaunas

karolina.maleckaite@tmi.vu.lt

Organiniai puslaidininkiai plačiai taikomi šiuolaikiniuose optoelektronikos prietaisuose, tokiuose kaip organinės saulės celės, organiniai šviestukai, jutikliai ir kituose. Vienas didžiausių organinių junginių privalumų yra galimybė lengvai kontroliuoti fotofizikines junginių savybes modifikuojant molekulių cheminę struktūrą. pasižymi dariniai Naftalimido išskirtinėmis fluorescencinėmis savybėmis, kurias galima keisti plačiame intervale prijungiant skirtingo poliškumo pakaitus [1]. Jie plačiai taikomi medicinoje, biologijoje, dažų gamyboje, organinės optoelektronikos prietaisuose, metalu jonu jutikliuose bei kitur [2,3]. Tačiau šiu junginiu taikymams optoelektronikoje yra reikalingi detalūs fluorescencijos savybių tyrimai.

Šiame darbe buvo atlikti šešių 1,8-naftalimido junginių serijos, kurios junginiai tarpusavyje skyrėsi prijungto pakaito tipu, sisteminiai fotofizikinių savybių tyrimai. Šių junginių fluorescencijos savybės buvo nustatomos matuojant sugerties ir fluorescencijos spektrus, fluorescencijos kvantinius našumus bei fluorescencijos laikines priklausomybes skirtingo poliškumo tirpaluose bei keičiant molekuliu koncentraciją polimeriniuose sluoksniuose.

Eksperimentu rezultatai demonstravo fluorescencijos savybes keičiant solvatochromines prijungiamo pakaito poliškumą. Stebėtas naftalimido darinių tirpalų sugerties ir fluorescencijos spektrų plitimas bei Stokso poslinkio didėjimas yra nulemtas molekulių konjuguotos sistemos išplitimo dėl pakaitų didėjimo ir akceptorinių-donorinių jų savybių. Taip pat pademonstruota, kad bifenilo ir naftaleno pakaitai, prijungti prie naftalimido kamieno per acetileno jungti leidžia molekulėms išlaikyti aukšta fluorescencijos kvantinį našumą (daugiau kaip 36 %) plačiame terpės poliškumo intervale. Junginių su bifenilo, naftaleno ir anizolo pakaitais kvantinio našumo vertės išlieka stabilios molekulių koncentraciją padidinus net šimtą kartų (0,1% - 10% m. d.), o tai rodo, kad šiems junginiams koncentracinis fluorescencijos gesinimas yra minimalus (1 pav.). Pažymėtina, kad toluene ir polimetilmetakrilato matricoje (iki 4% m. d.) įterptų junginių fluorescencijos kinetikoms būdinga tokia pati dominuojanti gesimo trukmės vertė, o tai parodo, kad spinduliavimas tokiomis sąlygomis vyksta iš tų pačių elektroninių būsenų. Įvertinus tyrimo rezultatus nustatyta, kad šie junginiai galėtų būti pritaikyti jutikliams terpės poliškumui nustatyti bei kaip spinduoliai organiniuose šviestukuose.



1 pav. Naftalimido junginių fluorescencijos kvantinio našumo priklausomybė nuo molekulių koncentracijos polimeriniuose sluoksniuose.

Reikšminiai žodžiai: organinė optoelektronika, naftalimidai, solvatochrominis poslinkis, koncentracinis fluorescencijos gesinimas.

- D. Gudeika, J. V. Grazulevicius, G. Sini, A. Bucinskas, V. Jankauskas, A. Miasojedovas, and S. Jursenas, Dyes Pigments 106, 58–70 (2014).
- [2] K.-R. Wang, F. Qian, R.-X. Rong, Z.-R. Cao, X.-M. Wang, and X.-L. Li, RSC Adv. 4, 47605 (2014).
- [3] S. Thavornpradit, J. Sirirak, and N. Wanichacheva, J. Photochem. Photobiol. Chem. 330, 55–63 (2016).

# Aukštos galios baltiems šviestukams skirtų dvikomponenčių silikatinių stiklų, legiruotų Ce, Dy, Eu ir Tb jonais liuminescencija

# Luminescence in two-component silicate glass doped with Ce, Dy, Eu, and Tb ions for high-power white light sources

Vaida Marčiulionytė<sup>1</sup>, Augustas Vaitkevičius<sup>1</sup>, Ekaterina Trusova<sup>2,3</sup>, Mikhail Korjik<sup>2</sup>, Gintautas Tamulaitis<sup>1</sup> <sup>1</sup>Semiconductor Physics Department and Institute of Applied Research, Vilnius Universty, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius. Lithuania <sup>2</sup>Research Institute for Nuclear Problems, Bobruiskaya str.11, 220030 Minsk, Belarus <sup>3</sup>Belarusian State Technological University, Sverdlova str. 13a, 220006 Minsk, Belarus

vaida.marciulionyte@ff.stud.vu.lt

Reliable high-power white and monochromatic light sources are on increasing demand. Currently, blue LEDs and downconverting YAG:Ce phosphors encapsulated in silicone is the conventional method for producing solid state white light sources. However, this approach suffers from strong thermal degradation at high emission power and poor color rendering. Fortunately, glass phosphors have superior thermal properties and good prospects for appropriate color conversion. Glass phosphors exhibit also better chemical and thermal stability. Color rendering properties of glass phosphors can be quite easily improved by modifying the composition or doping the glass host. Due to these properties, glass phosphors are potentially good candidates for commercial production of high-power white LEDs.

We investigated heat-treated two-component silicate glasses with compositions CaO-SiO<sub>2</sub>, BaO<sub>2</sub>-SiO<sub>2</sub>, and SrO-SiO<sub>2</sub> doped with Ce, Dy, Eu, and Tb activators. The doping concentration of all the samples was 1 at.%. The samples were produced at the Belarusian State Technical University.

The light emission properties of the samples under were investigated by measuring study their photoluminescence (PL) spectra. The measurements were performed using the WITech Alpha 300S microscope system operated in confocal mode. PL emission spectrum was recorded using a spectrometer with a thermoelectrically cooled CCD camera. PL excitation was performed by a CW laser diode emitting at 405 nm (ALPHALAS) as well as by a He-Cd laser emitting at 442 nm. The photoluminescence at different excitation power densities and in various sample depths was investigated. All the measurements were performed at room temperature.

The PL results show that different rare earth ions are affected by their surroundings in different ways. This is illustrated in Fig. 1, where the spectra of cerium and europium are presented in the samples with three glass matrixes. For cerium ions, the variation of their environment due to the different glass matrix composition has a weak effect. Only in the sample of  $BaO_2$ -SiO<sub>2</sub> glass the emission band is redshifted by 15 nm in respect to the position in the spectra of Ce in other two glasses. Meanwhile, the shape of the PL band remains unchanged. The influence of the glass matrix is more pronounced for europium ions. Europium doped glass contains both  $Eu^{2+}$  and  $Eu^{3+}$  ions. The higher energy emission band is associated with  $Eu^{2+}$  ions and is significantly more sensitive to the glass matrix than the bands due to optical transitions of  $Eu^{3+}$  ions. As seen in Fig. 1, the high energy band is hardly detectable in  $BaO_2$ -SiO<sub>2</sub>, and SrO-SiO<sub>2</sub> glasses but is clearly visible in CaO-SiO<sub>2</sub> glass.



Fig. 1 Photoluminescence spectra of CaO-SiO<sub>2</sub>, BaO<sub>2</sub>-SiO<sub>2</sub>, and SrO-SiO<sub>2</sub> glasses doped with Ce or Eu ions (indicated).

To test the applicability of the rare earth doped glasses for light conversion in white LEDs, color coordinates of all the samples were calculated. The results show that this material system is easily tunable by variation of the glass composition and has potential for solid state lighting with laser excitation.

Keywords: luminescence, glass, phosphor, white LED

Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ir Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-grafito dangų suformuotų plazminiu purškimu tribologinės savybės

# The tribological properties of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-graphite coatings deposited by plasma spraying

Jacob Shiby Mathew<sup>1</sup>, Liutauras Marcinauskas<sup>1,2</sup>, Mindaugas Milieška<sup>2</sup>, Balakumaran Thanigachalam<sup>3</sup>, Alja Kupec<sup>4</sup>, Romualdas Kėželis<sup>2</sup>, Ramūnas Česnavičius<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Kaunas University of Technology, Department of Physics, Studentų str. 50, LT- 51368 Kaunas, Lithuania

<sup>2</sup>Lithuanian Energy Institute, Breslaujos str. 3, LT-44403 Kaunas, Lithuania

<sup>3</sup> Kaunas University of Technology, Department of Mechanical Engineering, Studentų str. 56, LT-51424 Kaunas,

Lithuania

<sup>4</sup>Laboratory for Tribology and Interface Nanotechnology, Bogišićeva 8, 1000 Ljubljana, Slovenia jacob.mathew@ktu.edu

Nowadays it is quite common to see degeneration of metallic surfaces arising from continuous use and is quite perilous [1]. Ceramic coatings have been widely used in industries for their inertness toward erosive environments, making them a potential candidate for anti-wear applications. Among the ceramic materials employed in plasma-sprayed wear-resistant coatings, alumina is widely used [2]. The properties of alumina coatings and composites depend pretty much on the process parameters and the chemical composition of feedstock powders [2-4]. The purpose of this study was to determine the tribological properties of  $Al_2O_3$  and  $Al_2O_3$ -graphite coatings.

The coatings were deposited on stainless steel substrates using the technique of atmospheric plasma spraying [4]. Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-10 % graphite powders were used for the deposition. The flow rates of air and hydrogen were set at 4.7 g/s and 0.1 g/s, respectively. The torch powers were  $\sim 37.3$ ,  $\sim 40.4$  and  $\sim 43.1$  kW. The surface morphology was examined using a scanning electron microscope (SEM) Hitachi S-3400N. The elemental composition of the coatings was determined by energy dispersive X-ray spectroscopy (EDS) Bruker Quad 5040 spectrometer. The surface roughness was measured using a Mitutoyo Surftest-SJ-210-Ver2.00 profilometer. Structural characterization of the coatings was carried out using X-ray diffractometry. The tribological properties of the samples were measured using a CETR-UMT-2 reciprocating-sliding ball-on-disc tribometer.

The surface roughness investigations indicated that in the case of  $Al_2O_3$  coatings, with increase in torch power the surface roughness increased from 3.79 µm to 4.56 µm and with the incorporation of graphite, the variation was from 3.17 to 3.45 µm. It could be seen from the SEM images that with increase in torch power, the surface disorder had increased and with addition of graphite, sphere-like globules were formed. In the case of  $Al_2O_3$  coatings, with increase in torch power it could be noticed from EDS measurements that the normalized atomic percentage of oxygen had increased from 54.3 at.% to 55.8 at.% and of aluminium from 32.3 at.% to 33.9 at.% whereas with  $Al_2O_3$ -graphite coatings, the oxygen content had varied from 31.8% to 35.9% and aluminium from 11.4% to 11.9%. The XRD measurements demonstrated that the dominant phase in the coatings was  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.



Fig. 1. Coefficient of friction measured at 0.8 N load.

Considering the tribological properties of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> coatings at 0.8 N load, the friction coefficient (COF) decreased from 0.746 (at ~37.3 kW) to 0.723 (at ~43.1 kW) and with addition of graphite, the COF increased from 0.383 (at  $\sim$ 37.3 kW) to 0.468 (at  $\sim$ 43.1 kW). In the case of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> coatings at 1 N load, the COF increased from 0.719 to 0.73 and with the incorporation of graphite, the COF also increased from 0.404 (at ~37.3 kW) to 0.519 (at ~43.1 kW). The normalized wear rate (NWR) of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> coatings at 0.8 N had decreased from 4.55 x  $10^{-5}$  mm<sup>3</sup>/Nm (at ~37.3 kW) to 3.88 x  $10^{-5}$  $\text{mm}^3/\text{Nm}$  (at ~43.1 kW) and with the addition of graphite, the NWR also decreased from 5.47 x  $10^{-5}$  mm<sup>3</sup>/Nm (at ~37.3 kW) to 2.41 x  $10^{-5}$  mm<sup>3</sup>/Nm (at ~43.1 kW). When load was taken at 1 N, with increase in torch power, the NWR had decreased from 1.23 x  $10^{-4}$  mm<sup>3</sup>/Nm to 8.17 x  $10^{-5}$  mm<sup>3</sup>/Nm, but with the incorporation of graphite, the NWR increased from 2.59 x  $10^{-5}$  mm<sup>3</sup>/Nm to a complete wear-out of the coating from the substrate.

*Keywords: plasma spraying, alumina, coatings, tribological properties.* 

### Reference

- [1] W. Deng, et al., Mater. Lett. 193, 199 (2017).
- [2] M.J. Ghazali et al., Tribol. Int. 93, 981 (2016).
- [3] V.P. Singh, A. Sil, R. Jayaganthan, Mater. Des. 32, 854 (2011).
- [4] L.Marcinauskas, et al., Surf. Interface Anal., 48, 552 (2016).

## Radiotechninis modelis bangos sklaidos įpjautų žiedelių gardele

## Transmission line model of the wave scattering by the lattice of split ring resonators

Algirdas Matulis, Dalius Seliuta, Gediminas Šlekas, Žilvinas Kancleris

Fizinių ir technologijų mokslo centro Puslaidininkių fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, 10222 Vilnius

algirdas.matulis@ftmc.lt

Pradėjus sistemiškus meta-medžiagų tyrimus buvo susidomėta įpjautų metalinių žiedelių gardelėmis, kurios demonstruoja neigiamus dielektrinės ir magnetinės skvarbos analogus ribotoje dažnių srityje. Tai stimuliavo pačių tokių gardelių tyrimus elektrodinaminiais metodais, tame tarpe elektromagnetinės bangos sklaidos jomis [1]. Buvo nustatyta, kad bangos praėjimo pro tokias gardeles tikimybė demonstruoja įvairius rezonansinius ypatumus. Norint suprasti bei prognozuoti elektromagnetinių tyrimų rezultatus, verta išanalizuoti paprastus elektromagnetinės bangos sklaidos modelius, vienas iš kurių yra radiotechninės sutelktų parametrų gardelės, dažnai naudojamos, kaip ekvivalentinės periodinių metalinių konstrukcijų schemos [2]. Beje, tokios gardelės pasitarnavo taip pat geresniam meta-medžiagų supratimui [3].

Šio tyrimo tikslas yra išanalizuoti 1 paveiksle parodyta sutelktų parametrų gardele plintančios bangos sklai-



1 pav. Sutelktų parametrų gardelė.

dą vienmate periodine dvipolių grandinėle, įjungtų statmenai bangos krypčiai (parodyta pilku stačiakampiu), ir nustatyti tos sklaidos sąsajas su grandinėlės parametrais.

Sklaidos uždavinio invariantiškumo transliacijos išilgai dvipolių grandinėlės atžvilgiu dėka jį pasiseka performuluoti į sklaidos uždavinį juostelėje su vienu dvipoliu ir periodine kraštine sąlyga.



2 pav. Išsklaidytų bangų energijos srautų priklausomybė nuo dažnio santykiniais vienetais.

Tipiškas rezultatas parodytas 2 paveiksle. Čia ištisine kreive parodytas praėjusios bangos energijos srautas, brūkšniuota – atspindėtos ir taškine difragavusių bangų, kurie tokie patys tiek pirmyn, tiek atgal. Matome du praėjusios bangos energijos srauto ypatumus: neigiamą smailę (visišką energijos srauto blokavimą) prie mažų dažnių ir visišką energijos srauto praėjimą pro dvipolių grandinėlę esant tam tikram didesniam dažniui.

Neigiama smailė siejasi su individualia dvipolio charakteristika, nes ji yra artimoje rezonansinio dvipolio dažnio aplinkoje ir nepriklauso nuo atsumo tarp gretimų dvipolių (grandinėlės konstantos).

Antro charakteringo praėjimo kreivės ypatumo – maksimumo su lūžiu – padėtis sutampa su slenkstiniu difragavusios bangos (sužadintosios modos) dažniu neperturbuotos gradelės spektre. Pastarasis yra tiesinė atvirkštinio juostelės pločio (grandinėlės konstantos) funkcija, kas rodo, kad tai yra ne individualaus dvipolio, bet kolektyvinė visos jų grandinėlės savybė.

Kai grandinėlėje dvipoliais yra pakeistas ne kas antras kondensatorius, bet rečiau, juostelė yra platesnė ir ji turi daugiau sužadintų modų. Visų jų slenksčius atitinka analogiški praėjimo kreivės maksimumai, kurių dažniai (kaip ir dažniai tarp jų esančių minimumų) demonstruoja tas pačias tiesines priklausomybes nuo atvirkštinės gardelės dydžio.

Reikšminiai žodžiai: Sutelktų parametrų gardelė, periodinė dvipolių grandinėlė, rezonansai įpjautų metalinių žiedelių gardelėse

- D. R. Smith, W. J. Padilla, D. C. Vier, S. C. Nemat-Nasser, and S. Schultz, Phys. Rev. Lett. 84, 4184 (2000).
- [2] A. Sanada, C. Caloz, and T. Itoh, IEEE Trans. Micr. Th. and Tech, 52, 1252 (2004).
- [3] G. V. Eleftheriades, A. K. Balmain, Negative-Refraction Metamaterials: Fundamental Principles and Applications (Wilwy-IEEE Press, New Jersey, USA, 2005).

## Kompozitų su daugiasieniais anglies nano vamzdeliais žemo dažnio triukšmo charakteristikos

## Low frequency noise characterisation of multi-walled carbon nanonubes composites

Sandra Pralgauskaitė<sup>1</sup>, Marina Tretjak<sup>1</sup>, Jan Macutkevič<sup>1</sup>, Jonas Matukas<sup>1</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup>, Polina Kuzhir<sup>2</sup>, Evgeni Ivanov<sup>3</sup>, Rumiana Kotsilkova<sup>3</sup>

> <sup>1</sup>Vilnius University, Physics Faculty, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Research Inst. for Nuclear Problems, Belarusian State University, Minsk, Belarus <sup>3</sup>OLEM, Institute of Mechanics, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria

> > sandra.pralgauskaite@ff.vu.lt

Composite materials with carbon nanotubes (CNTs) attract great attention as novel electromagnetic material. CNTs have a number unique structural and physical properties, what makes them a promising candidate for various applications: nanoscale bioelectronic devices, nano-sized FETs, nanoscale terahertz devices, microscale inductors, sensors, etc. [1-3].

Carbon nanotube composites can be seen as conductive particles in dielectric matrix, and they are disordered materials. Electromagnetic properties of such materials are greatly dependent on nanotubes dimensions, density, orientation and distribution in the matrix [4]. Electrical conductivity studies in disordered solids are a topic of considerable interest. Noise spectroscopy is an informative method that reveals physical processes in various materials and structures and provides valuable information on charge carrier transport and conduction mechanisms. In this work, we present comprehensive investigation of low frequency noise and resistivity characteristics in composite materials with multi-walled carbon nanotubes (MWCNTS) with different surface treatment. The aim of the investigation was to determine the charge carrier transport mechanisms in such materials and to clear up the influence of the MWCNT's surface treatment to the material conduction.

Investigated materials were composed from multiwalled CNTs in polymer matrix. Two types of materials were investigated: epoxy-grafted (MWCNTs were mechanically dispersed in liquid epoxy resin (D.E.R. 321 (Dow Chemical) was chosen as polymer matrix)) and (MWCNTs were amino-grafted dispersed in polyethylene polyamine (PEPA) hardener) [5]. Solid composites were then fabricated by curing of the irradiated dispersions with the addition to them of the appropriate amount of the second component (hardener and epoxy resin, respectively) at the molar ratio 70:30 (D.E.R.321:PEPA). The percolation threshold of the obtained materials is in the range of 0.03-0.05 wt.% for epoxy-grafted, and 0.05-0.08 wt.% for amino-grafted samples [5]. Results for materials with 0.08 wt.% and 0.3 wt.% of MWCNTs are presented here.

The low-frequency noise characteristics were measured under constant current operation in frequency range from 10 Hz to 20 kHz and temperature range from 73 K to 380 K.

As expected for the materials with conductive fillers the resistivity of the investigated materials is Ohmic at low electrical field (in the voltage range 10 mV – 0.1 V at room temperature), but starts to decrease at higher voltage (above 1 V). Conduction mechanisms that can be found in composite materials are tunneling, transport through defects' centers, and hopping. It is found that the resistivity of epoxy-grafted materials is larger comparing to the amino-grafted ones: amino-grafted MWCNTs have larger density of charge carrier states at the nanotube's surface, what increases probability of electron tunneling. Below ~275 K the resistivity is proportional to the reciprocal cube root of temperature. Therefore, at low temperature the carrier transport occurs due to electrons hopping inside MWCNTs cluster and tunneling between clusters.

The low frequency noise spectra are  $1/f^{\alpha}$ -type at room slightly deviates temperature and from this proportionality - influence of individual Lorentzians is noted - at particular temperatures for both types of the investigated materials. The spectral density of voltage fluctuation is proportional to the squared voltage, what is characteristic for resistance fluctuations caused by the charge carrier capture and release processes in localized states. The Mott's hopping between carbon nanotubes controlled by the charge carrier capture in localized states between them determines the conductivity in investigated materials and leads to the observed noise characteristics.

The spectral density of voltage fluctuations for amino-grafted material is about an order of magnitude larger comparing to epoxy-grafted one: CNTs' surface treatment with polyethylene polyamine leads to the larger number of charge carrier capture centers.

MWCNTs' surface treatment with liquid epoxy resin and polyethylene polyamine hardener does not change the dominant conduction mechanisms in the investigated composites. But this treatment influences the density of the MWCNTs' surface states, what leads to the different value of resistivity and different low frequency noise intensity.

*Key words: carbon nanotube, composite, fluctuation, noise.* 

- [1] T. Kawaharaa et al., Appl. Surface Science 267, 101-105 (2013).
- [2] B. S. Sreeja, Microelectronics J. 45, 196-204 (2014).
- [3] T. Li et al., Microelectronic Engineering 119, 55-158 (2014).
- [4] A. K. Ghavidel et al., J. Appl. Polym. Sci. 132, 42671 (2015).
- [5] R. Kotsilkova et al., Composites Scien. Technol. 106, 85-92 (2015).

# Fenantroimidazolo junginių fluorescencijos spektroskopija ir taikymai organiniuose šviestukuose

# Spectroscopy and Applications of Phenanthroimidazole Derivatives for Organic Light-Emitting Diodes

Edvinas Radiunas<sup>1</sup>, Karolis Kazlauskas<sup>1</sup>, Steponas Raišys<sup>1</sup>, Juozas Gražulevičius<sup>2</sup>, Saulius Juršėnas<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 5, LT-10221 Vilnius <sup>2</sup>Kauno technologijų universitetas, Cheminės technologijos fakultetas, Radvilėnų pl. 19, LT-50254 Kaunas eradiunas(@gmail.com

Vis sparčiau besivystanti organinės optoelektronikos pramonė dažnai siejama su unikaliomis prietaisų savybėmis, kurias galima pasiekti tikslingai pritaikius modernias molekulių inžinerijos subtilybes. Estetiškai patrauklūs, skaidrūs ir lankstūs prietaisai, kurių pagrindą sudaro organiniai junginiai užima vis didesnę dalį elektronikos rinkos, dėl gan paprastų ir pigių masinės gamybos technologijų [1]. Viso regimo spektro organinių (OLED) vaizduoklių ir apšvietimo šviestukų technologijų kokybė stipriai priklauso nuo mėlynos spalvos išgavimo. Sudėtinga realizuoti organinius pasižyminčius efektyvia spinduliuote junginius violetinio-mėlyno spektro srityje, dėl didelio draustinio juostos tarpo, mažo kvantinio našumo, prasto krūvininkų balanso ir prasto energinių būsenų suderinamumo su kitais organinio prietaiso sluoksniais [2].

Kokybiškam mėlynos spalvos šviestuko realizavimui vis daugiau tiriamos molekulės savyje turinčios elektronų donorinius ir elektronų akceptorinius fragmentus (D-A), nes tokioje struktūroje galimi būdai valdyti spinduliuojamą šviesą derinant molekulinius energetinius lygmenis, draustinį juostos tarpą bei valdyti pernešamų krūvininkų balansą.

Šiame darbe tirtos šešios fenantroimidazolo ir indolo (pirmos serijos) arba fentiazino (antros serijos) fragmentus turinčios molekulės. Fenantroimidazolo junginiai pasižymi trumpa molekulės konjugacija ir efektyvia fluorescencija violetinėje-mėlynoje spektro dalyje. Priklausomai nuo molekulės struktūros fenantroimidazolo fragmentas gali būti tiek silpnas elektronų donoras, tiek silpnas elektronų akceptorius.

Detaliai ištirtos junginių fotofizikinės savybės skirtingose terpėse parodė, kad abiejų serijų junginiai praskiestuose tirpaluose demonstravo spinduliuotę trumpabangėje spektro srityje (atitinkamai 418nm ir 485 nm bangos ilgio spinduliuotė pirmai ir antrai serijai). Nors tirpaluose pirmos serijos junginiams kvantinis našumas (~40%) buvo mažesnis nei antros serijos (~55%), priešinga situacija stebėta junginius patalpinus į kieto polimero matricą, kurioje pirmos serijos junginiai demonstravo kvantinio našumo išaugimą galimai siejamą su vidumolekulinių virpesių apribojimais. Gryname sluoksnyje fenantroimidazolo dariniu kvantinis našumas krito nuo 2 iki 20 kartu lyginant su praskiestu tirpalu, dėl molekuliu agregacijos sukeltu nespinduliniu procesu išaugimo. Parinkus polimero aplinkoje našiausiai šviečiantį ( $\Phi_{FL}$ =74,4%) fenantroimidazolo ir indolo jungini, liejimo būdu pagaminti 6 šviestukai (1pav. a), kurie tarpusavyje skyrėsi spinduolio koncentracija ir naudojama matrica (NPB arba PVK). Mažos NPB molekulės matrica demonstravo pranašesnes savybes OLED struktūroje nei polimeras PVK (1pav. b). Bandinyje su 1% įterpta tiriamąja medžiaga ir NPB matrica pasiektas 0,62% išorinis kvantinis našumas, iki 1200 mA/cm<sup>2</sup> srovės tankis, ir ~50 cd/m<sup>2</sup> skaistis su CIE koordinatėmis (0,153, 0,078). Tuo tarpu esant 1% medžiagos PVK matricoje našumas buvo mažesnis (0,41%), o nustatytos spalvinės CIE koordinačių vertės (0,171, 0,078).



 pav. Iš tirpalo paruoštų OLED elektriniai ir šviesiniai parametrai: a – šviestukų elektroliuminescencijos spektrai, b - srovės tankio priklausomybė nuo prijungtos įtampos. Įklijoje atvaizduota skaisčio priklausomybė nuo srovės tankio

Reikšminiai žodžiai: Organiniai šviestukai, fenantroimidazolas, liejimo technologija, fotofizikiniai tyrimai.

- [1] Z. Bao, J. A. Rogers, and H. E. Katz, J. Mater. Chem. 9, 1895 (1999).
- [2] S. Kumar, M. Singh, J.-H. Jou, and S. Ghosh, J Mater Chem C, 4, 6769 (2016).

# Tripletinių eksitonų anihiliacijos sąlygotos šviesos konversijos našumo didinimas panaudojant fluorescuojančias singuletinių eksitonų gaudykles

# Efficiency enhancement of triplet-triplet annihilation-based light upconversion via utilization of fluorescent singlet exciton traps

<u>Steponas Raišys</u><sup>1</sup>, Karolis Kazlauskas<sup>1</sup>, Yoan Simon<sup>2</sup>, Saulius Juršėnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Scool of Polymers and High Performance Materials, The University of Southern Mississippi, 118 College Drive,

Hattiesburg, Mississippi 39406, United States of America

steponas.raisys@tmi.vu.lt

Šviesos konversija vykstanti dėka tripletinių eksitonų anihiliacijos, kuomet iš mažesnės energijos fotonų generuojami didesnės energijos fotonai, sulaukia ypatingo dėmesio dėl galimybės ją pritaikyti saulės celių ir organinių šviestukų našumui didinti, fotokatalizės reakcijoms inicijuoti bei biologiniu objektu eksitonų vaizdavime [1]. Tripletinių anihiliacijos šviesos konversijai realizuoti salvgotai pakanka nekoherentinės, santykinai mažo žadinimo galios tankio (~10 mW/cm<sup>2</sup>) spinduliuotės, kas suteikia galimybę panaudoti saulės spinduliuotę kaip žadinimo šaltinį. Šiuo metu šviesos konversijos našumas tirpaluose siekia 26% [2], tačiau kietame būvyje konversijos našumas drastiškai sumažėja [3]. Manoma, kad taip yra dėl apriboto molekulių judėjimo kietoje matricoje sąlygojančio mažą tripletinių eksitonų susitikimo tikimybę ir atitinkamai sumažėjusį konversijos efektyvumą.

Siekiant išsiaiškinti tripletinių eksitonų difuzijos įtaką šviesos konversijos našumui polimeriniuose sluoksniuose, šiame darbe yra pristatomi singuletinių ir tripletiniu eksitonu difuzijos polimeriniuose sluoksniuose tyrimu rezultatai. Polimeriniai sluoksniai pagaminti terminio lydimo metodu [4] buvo sudaryti iš polimetilmetakrilato (PMMA) matricos, spinduolio -9,10-difenilantraceno (DPA) ir platinos oktaetilporfirino (PtOEP) atliekančio tripletiniu eksitonu sensibilizatoriaus difuzijos funkciją. Eksitonų paremtas spinduliuotės gesinimo nustatymas yra DPA/PtOEP/PMMA efektyvumo matavimais sluoksniuose esant skirtingai gesiklių koncentracijai. Pasinaudojus Monte Karlo modeliavimu bei Šterno Folmerio formalizmu buvo apskaičiuoti singuletinių ir tripletinių eksinonų difuzijos nuotoliai [5,6].

Konversijos kvantinio našumo matavimai esant skirtingoms DPA koncentracijoms parodė, kad ties maža koncentracija eksitonų difuzija ir energijos pernaša iš PtOEP į DPA molekules yra nepakankamai efektyvi našiai konversijai pasiekti, tuo tarpu esant per didelei DPA koncentracijai pasireiškia koncentracinio gesinimo efektas, kuris taip pat mažina konversijos našumą. Nustatyta, kad optimali DPA koncentracija, atitinkanti maksimalų šviesos konversijos našumą, yra apie 25%. Parinkus optimalią sensibilizatoriaus koncentraciją buvo pasiektas maksimalus konversijos kvantinis našumas siekiantis ~1,8%. Taip pat buvo nustatyta, jog sensibilizatorius itin efektyviai gesina DPA singuletinius eksitonus kartu mažindamas konversijos efektyvumą.

Eksitonų difuzijos nuotolio tyrimai parodė, kad singuletinių eksitonų difuzija išmatuota sluoksniuose be tripletinių eksitonų sensibilizatoriaus stipriai priklauso nuo DPA koncentracijos, o difuzijos nuotolis išauga nuo 24 nm iki 42 nm padidėjus DPA koncentracijai nuo 20% iki 35%, atitinkamai. Tuo tarpu singuletinių eksitonų difuzijos nuotolis mažai priklauso nuo DPA koncentracijos ir siekia ~15 nm sluoksniuose esant 0,05 % sensibilizatoriaus koncentracijai.

Pademonstruota, kad įterpus į polimerinius sluoksnius gerai fluorescuojančias singuletinių eksitonų gaudykles galima sugaudyti ilgą eksitonų difuzijos nuotolį turinčius singuletinius eksitonus ir šviesos konversijos efektyvumą padidinti iki 2,7%.

Reikšminiai žodžiai: šviesos konversija, eksitonų anihiliacija, kvantinis našumas, difuzijos nuotolis, eksitonų gaudyklės.

- J. Zhou, Q. Liu, W. Feng, Y. Sun, F. Li, Chem. Rev. 135, 19056 (2013).
- [2] A. Monguzzi, R. Tubino, S. Hoseinkhani, M. Campione, and F. Meinardi, Phys. Chem. Chem. Phys. 14, 4322 (2012).
- [3] D. Dzebo, K. Börjesson, V. Gray, K. Moth-Poulsen, and B. Albinsson, J. Phys. Chem. C 120, 23397 (2016).
- [4] S. H. Lee, J. R. Lott, Y. C. Simon, C. Weder, J. Mat. Chem. C 1, 5142 (2013).
- [5] O. V. Mikhnenko, H. Azimi, M. Scharber, M. Morana, P. W. M. Blomad, M. A. Loi, Energy and Environmental Science 5, 6960 (2012).
- [6] H. Y. Hsu, J. H. Vella, J. D. Myers, J. Xue, K. S. Schanze, J. Phys. Chem. C 118, 24282 (2014).

## Femtosekundinių UV impulsų įtaka ZnO sluoksnio drėkinimo savybėms

Femtosecond UV pulses influence to ZnO layer wetting properties

<u>Vytautas Sabonis</u>,<sup>1, 2</sup>, Arnas Naujokaitis<sup>1</sup>, Jonas Nekrasovas<sup>1</sup>, Kęstutis Arlauskas<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>UAB "Altechna RnD", Mokslininkų 6a, LT-08412 Vilnius <u>vytautas.sabonis@gmail.com</u>

Drėkinimas yra svarbi medžiagų savybė nulemta paviršiaus energijos ir paviršiaus geometrinės struktūros [1]. Vandens ir medžiagos kontaktinis kampas nusako ar paviršius yra hidrofilinis (<90°), ar hidrofobinis (>90°). Kuomet kampas didesnis nei 150° paviršius vadinamas superhidrofobiniu ir ši savybė pritaikoma daugelyje sričių, tokių kaip savaime išsivalantys paviršiai [2]. Drėkinimo kampas mažesnis nei 90° gali būti pritaikomas siekiant paviršių tolygiai padengti plonu sluoksniu [3]. ZnO yra skaidrus regimajame šviesos spektro diapazone, netoksiškas, chemiškai stabilus, todėl taikytinas biojutikliuose, optoelektronikoje [4,5],

Tyrimu siekiama įvertinti galimybę struktūrizuoti kompaktinio ZnO sluoksnio paviršių femtosekundiniais ultravioletiniais impulsais ir ištirti paviršiaus formavimo parametrų įtaką drėkinimo kampui.

Eksperimentams atlikti naudotas Yb:KGW ("Šviesos femtosekundinis lazeris "PHAROS" Konversija GmbH", Lietuva). Lazerio impulso trukmė yra  $\tau$ =280 fs, bangos ilgis yra  $\lambda$ =1064 nm. Trečioji harmonika ( $\lambda$ =343 nm) gauta naudojant harmoniku modulį. Bandinio pozicionavimui XY ašimis naudoti "ANT130" tiesiniai stalai ("Aerotech" JAV). Fokusavimo lęšis f=100 mm montuojamas ant Z ašies. Programinė įranga "SCA" ("Altechna RnD" Lietuva) naudota sudaryti ir vykdyti lazerinio formavimo algoritmus. Poveikio lazeriu eksperimentai atlikti "Altechna RnD" laboratorijoje. Lazeriu suformuotos struktūros atvaizduotos naudojant skenuoianti elektronini mikroskopa. 1 pav. pateikiamas lazeriu suformuotų paviršinių struktūrų pavyzdys.



1 pav. Lazeriu suformuotos ZnO paviršinės struktūros atvaizduotos naudojant skenuojantį elektroninį mikroskopą. Lazerinio proceso pagrindiniai parametrai: 1000 impulsų į milimetrą, *E*=0,25 uJ.

Didinant energijos tankį - keičiant impulso energiją, o impulsų tankį milimetre laikant pastovų, stebimas ZnO sluoksnio paviršiaus morfologijos kitimas.

Distiliuoto vandens lašą užlašinus ant paruošto paviršiaus buvo stebimas statinis drėkinimo kampas. Didėjant spinduliuotės energijai, kuria paveiktas ZnO sluoksnis, matyti drėkinimo kampo mažėjimas. Drėkinimo kampo matavimų rezultatas pateiktas 2 paveiksle.



2 pav. Lazeriu paveikto ZnO paviršiaus drėkinimo kampas nuo lazerinės spinduliuotės impulso energijos. Atidėtos priklausomybės stebint drėkinimo kampą praėjus atitinkamam laiko tarpui nuo lašo ir paviršiaus kontakto momento.

Reikšminiai žodžiai: ZnO, drėkinimas femtosekundiniai impulsai.

- [1] Hui, M.; Blunt, M. J. J. Phys. Chem. B 2000, 104, 3833
- [2] Shibuichi, S.; Onda, T.; Satoh, N.; Tsujii, K. J. Phys. Chem. 1996, 100, 19512
- [3] Wang, R.; Hashimoto, K.; Fujishima, A.; Chikuni, M.; Kojima, E.; Kitamura, A.; Shimohigoshi, M.; Watanabe, T. Nature 1997, 388, 431.
- [4] V. Khranovskyy, G. R. Yazdi, G. Lashkarev, A. Ulyashin and R. Yakimova, Physica Status Solidi A 2 05 (2008) 144-149.
- [5] L. Selegard, V. Khranovskyy, F. Söderlind, C. Vahlberg, M. Ahren, P.-O. Käll, R. Yakimova and K. Uvdal, ACS Appl. Materials and Interfaces, 2 (2010) 2128.

### Metalas-grafenas struktūrų kontaktų analizė

## **Investigation of metal-graphene contacts**

Andrius Sakavičius, Algimantas Lukša, Gvidas Astromskas, Virginijus Bukauskas, Viktorija Nargelienė, Arūnas Šetkus Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius andrius.sakavicius@ftmc.lt

Kuriant prietaisus bei naudojant dvimates (2D) medžiagas yra labai svarbu suvaldyti kontaktinius reiškinius, t. y. kiek įmanoma labiau optimizuoti kontaktinę sritį tarp tiriamos medžiagos ir metalo. Nemažiau svarbu yra užtikrinti, kad dvimatės medžiagos sritis tarp kontaktų bus kokybiškai užauginta, homogeniška ir nebus pažeista perkėlimo metu, kadangi tai gali stipriai lemti krūvininkų judrį. Šiame darbe kaip laidų 2D sluoksnį naudojame grafeną, tuo tarpu kontaktų optimizavimui pasirinkome Au ir Ni. Iškaitinant kontaktines struktūras gavome, kad kontaktinė varža sumažėjo dėl sumažėjusio atstumo tarp metalo ir grafeno, tuo tarpu grafeno sluoksnio varža sumažėjo dėl padėklo legiravimo įtakos.

Optimizuojant pagal CTLM metodiką suformuotos grafenas-metalas struktūros buvo iškaitintos 4, 64 ir 124 min Ar dujų sraute bei 300°C temperatūroje. Kontaktiniai ir sluoksnio pokyčiai buvo analizuojami matuojant kontaktines ir sluoksnio varžas bei struktūrą tiriant Ramano spektroskopija.



1 pav. Bandinių struktūra. (a) Ant izoliuojančio  $SiO_2$  padėklo iš metalo suformuojamos CTLM sritys su kintamu atstumu *d*. Grafenas užnešamas ant metalo paviršiaus. (b) Žiedinės struktūros vaizdas iš viršaus, kur pavaizduotas užneštas grafenas.

Dėl sąveikos su padėklu, grafeno sluoksnis yra įtempiamas ir legiruojamas. Iš Ramano mikroskopijos analizės gauname, kad grafenas, esantis ant SiO<sub>2</sub> sluoksnio, iškaitinimo metu yra legiruojamas p tipo krūvininkais. Tuo tarpu grafenas, esantis ant metalinių kontaktų, iškaitinimo metu patiria stiprius sluoksnio įtempimus. Eksperimentiniai rezultatai, kaip kinta 2D smailės padėtis nuo G smailės padėties, pateikti 2 pav., kur (a) paveiksle pateikti grafeno sluoksnio, esančio ant SiO<sub>2</sub>, matavimai, (b) paveikslėlyje – grafeno, esančio ant metalinių kontaktų.



2 pav. (a) Grafeno, esančio ant SiO<sub>2</sub> padėklo, 2D smailės padėties kitimas nuo G smailės padėties (žadinimo bangos ilgis – 633 nm). Au/Grafenas struktūra – užpildyti simboliai, Ni/Grafenas struktūra – neužpildyti simboliai. (b) Grafeno, esančio ant metalinio kontakto, 2D smailės padėties kitimas nuo G smailės padėties. Au/Grafenas struktūra – užpildyti simboliai, Ni/Grafenas struktūra – neužpildyti simboliai. Iškaitinimo trukmės – 0, 4, 64 ir 124 min. Raudonos ir juodos linijų polinkiai, nurodantys įtempimo arba legiravimo dominavimą, pritaikyti pagal [1].

Reikšminiai žodžiai: grafenas, kontaktinė varža, sluoksnio, Ramano spektroskopija.

### Literatūra

[1] Y. Duhee, Y.-W. Son, and H. Cheong. Phys. Rev. Lett. 106, 15 155502 (2011).

### Argirodito tipo Cu<sub>7</sub>PS<sub>6</sub> kristalų struktūra ir elektrinės savybės

## Structural and electrical properties of argyrodite-type Cu<sub>7</sub>PS<sub>6</sub> crystal

Tomas Šalkus<sup>1</sup>, Algimantas Kežionis<sup>1</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup>, Vitalii Yu. Izai<sup>2</sup>, Artem I. Pogodin<sup>2</sup>, Oleksandr P. Kokhan<sup>2</sup>,

Vasyl I. Sidey<sup>2</sup>, Marijan Yu. Sabov<sup>2</sup>, Ihor P. Studenyak<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilnius University, Faculty of Physics, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Uzhhorod National University, 46 Pidhirna Str., 88000 Uzhhorod, Ukraine

tomas.salkus@ff.vu.lt

Cu<sub>7</sub>PS<sub>6</sub> compound belongs to argyrodite-type solid electrolytes [1]. Phase diagram of a quasibinary  $Cu_2S-P_4S_{10}$  system was studied in [2].  $Cu_7PS_6$ compound is formed with a large excess of S<sup>2-</sup> anions and in a simplified case its structure can be viewed as a  $Cu_2S$  matrix containing isolated  $[PS_4]^{3-}$  ions. Its high-temperature modification contains disordered subsystem of metal ions that are characterized by high ionic conductivity due to a considerable mobility of monovalent cations while with cooling an ordered phase is formed. In Cu<sub>7</sub>PS<sub>6</sub> a phase transition is observed at 515 K from the high-temperature phase with  $F\overline{4}3m$ symmetry to the low-temperature phase with P213 symmetry. Calorimetric studies of Cu<sub>7</sub>PS<sub>6</sub> showed no phase transitions in the temperature range of 100-400 K, the linear temperature dependence of specific heat capacity being an evidence for strong anharmonicity [3].

To our knowledge, no detailed studies of the crystal structure and charge transport in  $Cu_7PS_6$  have been carried out so far. Therefore, a detailed investigation of the structural and electrical properties of  $Cu_7PS_6$  argyrodite-type superionic conductor is of great interest.

Cu<sub>7</sub>PS<sub>6</sub> crystals were grown using direct crystallization from melt (Bridgman-Stockbarger technique). The synthesis of Cu<sub>7</sub>PS<sub>6</sub> compound was performed in the following way: heating at a rate of 50 K/h to  $673 \pm 5$  K, ageing at this temperature for 24 h, then heating to  $973 \pm 5$  K, ageing at this temperature for 72 h, further heating of the melting zone up to  $1380 \pm 5$  K that is by 50 K above the melting temperature with 24 h ageing. The ageing resulted in nucleation. The annealing of the formed seeds was performed for 48 h. The growth rate was kept at 3 mm/day. The annealing zone temperature was 973 $\pm$ 5 K and the annealing duration was 48 h. As a result, Cu<sub>7</sub>PS<sub>6</sub> crystals with the length of 45–50 mm and 10– 2 mm in diameter were obtained.

Cu<sub>7</sub>PS<sub>6</sub> was investigated using X-ray powder diffraction technique. Cu<sub>7</sub>PS<sub>6</sub> crystallizes into cubic structure (space group P2<sub>1</sub>3 (No.198), lattice parameter a = 9.6706(1) Å, Z = 4), which is identical to  $\beta$ -Cu<sub>7</sub>PSe<sub>6</sub>. The crystal structure of the Cu<sub>7</sub>PS<sub>6</sub> contains cation–anion coordination shell of four different types: [PS<sub>4</sub>], [CuS<sub>4</sub>], [CuS<sub>3</sub>], and [CuS<sub>2</sub>]. The split position of a copper atom, resulting in two 12b positions (Cu2 and Cu3) with partial site occupancies was determined.

Electrical parameters of Cu7PS<sub>6</sub> crystal were studied in the frequency range  $10-10^{10}$  Hz and temperature interval 296–351 K by coaxial line impedance spectrometer set-up [1]. Two relaxation processes were found in the spectra of Cu7PS<sub>6</sub> crystal electric properties. The conductivity dispersion regions are related to these processes. The first one is observed in the frequency range from about 10 kHz up to about 100 MHz, while the other dispersion was found above 3 GHz frequency. Both dispersions reveal themselves as maxima of the complex resistivity imaginary part. The maximum of imaginary part of complex resistivity corresponds to relaxation frequency, which increases with increasing temperature. In the frequency range from about 10 MHz up to 1 GHz a well-defined dispersion of dielectric permittivity was found, while in the frequency ranges below 10 MHz and above 1 GHz dielectric permittivity decrease slightly with increasing frequency. A gradual decrease of high frequency  $\varepsilon'$  from 26.3 to 23 was observed in the studied temperature range. At room temperature and at 1 kHz frequency the conductivity value is  $1.77 \cdot 10^{-3}$  S/m while at high frequency of 1 GHz the conductivity reaches 5 S/m. The corresponding conductivities' activation energies were found to be 0.17 eV and 0.08 eV, respectively. Cu<sup>+</sup> ions and electrons/holes contribute to the conductivity in Cu<sub>7</sub>PS<sub>6</sub> crystal.

*Keywords: crystal growth, X-ray diffraction, impedance spectroscopy, charge transport.* 

### Acknowledgement

This work was financially supported by the Research Council of Lithuania (project No. TAP-LU-15-005).

### Literature

- W. F. Kuhs, R. Nitsche, K. Scheunemann, Mater. Res. Bull. 14, 241 (1979).
- [2] H. Andrae, R. Blachnik, J. Alloys and Compounds 189, 209 (1992).
- [3] S. Fiechter, E. Gmelin, Thermochimica Acta 87, 319 (1985).
- [4] A. Kezionis, S. Kazlauskas, D. Petrulionis, A.F. Orliukas, IEEE Trans. Microw. Theory Tech. 62, 2456 (2014).

# SrRuO<sub>3</sub> paviršinio sluoksnio struktūros nustatymas kampui jautrios fotoelektronų spektroskopijos metodu

## Determination of SrRuO<sub>3</sub> surface layer structure by angle-resolved XPS

Mindaugas Senulis, Sergej Grebinskij, Sigitas Mickevičius, Andrius Maneikis Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius mindaugas.senulis@ftmc.lt

Laidūs feromagnetinių SrRuO<sub>3</sub> oksidų sluoksniai pasižymi geru cheminiu stabilumu ir perovskitine struktūra, todėl yra perspektyvi medžiaga funkcinių perovskitinių struktūrų kūrimui. Tačiau jame, kaip ir kituose stroncio junginiuose dažnai stebima paviršinė stroncio segregacija [1]. Magnetroninio dulkinimo būdu užgarintų SrRuO<sub>3</sub> sluoksnių paviršinė struktūra buvo tirta kampui jautrios fotoelektronų spektroskopijos (ARXPS) metodu, leidžiančiu neardžiai nustatyti paviršiaus savybes [2].

Siekdami nustatyti SrRuO3 sluoksnio struktūrą mes tyrėme Sr 3d, Ru 3p ir O 1s spektrų priklausomybę nuo elektronų surinkimo kampo. Sr 3d dupleto spektrai, išmatuoti skirtingiems registravimo kampams  $\alpha$  (1a pav.) sudaryti iš dviejų reikšmingų dedamųjų, nurodančių skirtingą atomų cheminę aplinką. Dėl neelastinės sklaidos fotoelektrony spektrai esant mažam registravimo kampui  $\alpha$  yra labiau sąlygoti paviršiaus. Siauresnis žemų ryšio energijų (BE) dupletas (Sr 3d<sub>5/2</sub> BE = 132.2 eV) gali būti priskirtas tūriniams, o platus (Sr 3d<sub>5/2</sub> BE = 133.2 eV) – paviršiniams stroncio junginiams (tikėtinai stroncio hidroksidui) [3]. Analogiškai, O 1s spektruose (1b pav.) siauras spektras gali būti priskirtas kristaliniam deguoniui, o platus - paviršiuje absorbuotiems oksidams (CO, H<sub>2</sub>O, (OH)<sup>-</sup>...)[4].



1 pav. O 1s ir Sr 3d ryšio energijų spektrai išmatuoti esant skirtingiems fotoelektronų registravimo kampams

Skirtingai nuo Sr ir O spektrų, Ru 3p smailė praktiškai nepriklauso nuo registracijos kampo. Tai leidžia manyti, kad paviršinis ir tūrinis rutenis yra vienoduose cheminiuose junginiuose.

Spektro paviršinės ir tūrinės dedamųjų priklausomybės nuo kampo buvo analizuojamos naudojant dalinai padengto paviršiaus modelį. Derinimo rezultatai pavaizduoti 2 pav. Nagrinėtoms Sr 3d ir O 1s linijoms elektronų laisvojo lėkio ilgis (IMFP) -  $\lambda$  lygus atitinkamai ~4.1 ir ~3.7 nm esant hv = 3000 eV žadinančių fotonų energijai [5]. Tuo pasinaudojus gaunamas vienodas paviršinio stroncio ir deguonies junginio sluoksnio storis (~1.6 nm).



2 pav. Tūrinės dalies santykinio fotoelektronų signalo logaritmo priklausomybė nuo surinkimo kampo. Taškai atitinka eksperimentinius rezultatus, o linijos – derinimo naudojant dalinai padengto paviršiaus modelį rezultatai;  $\delta = d/\lambda$ , kur d – paviršinio sluoksnio storis ir a – tuo sluoksniu padengto ploto dalis.

Nustatyta, kad  $SrRuO_3$  sluoksnio paviršiuje formuojasi Sr praturtintų junginių danga. Modelio parametrai, aprašantys Sr ir O paviršiniame sluoksnyje yra labai artimi, todėl galima tarti, kad jie yra vienos prigimties, greičiausiai sąlygoti  $Sr(OH)_2$  įtakos.

Reikšminiai žodžiai: sinchrotroninė spinduliuotė, kampui jautri fotoelektronų spektroskopija, paviršiaus struktūra.

#### Literatūra

[1] R. Bertacco, J.P. Countour, A. Barthelemi and J. Olivier, Surf. Sci. **511**, 366 (2002).

- [2] J. M. Grimal and P. Marcus, Surf. Sci. 249, 171 (1991)
- [3] R. P. Vasquez, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **56**, 217 (1991).
- [4] M. Mlynarczyk, K. Szot, A. Petraru, U. Poppe, U. Breuer, R.
- Waser, and K. Tomala, J. Appl. Phys. 101, 023701 (2007).

[5] P. J. Cumpson and M. P. Seah, Surf. Interface Anal. 25, 430 (1997).

# Tripletų anihiliacija 9,10-difenilantraceno dariniuose: interkombinacinės konversijos bei eksitonų difuzijos įtaka

# Triplet – triplet annihilation in 9,10 – diphenylanthracene derivatives: the role of intersystem crossing and exciton diffusion

Tomas Serevičius<sup>1\*</sup>, Regimantas Komskis<sup>1</sup>, Povilas Adomenas<sup>1</sup>, Ona Adomeniene<sup>1</sup>, Andy Monkman<sup>2</sup> and Saulius

Juršėnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Applied Research, Vilnius University, Sauletekio 3, 10257, Vilnius, Lithuania <sup>2</sup>Department of Physics, Durham University, South Road, Durham, DH1 3LE, UK tomas.serevicius@ff.stud.vu.lt

Triplet - triplet annihilation (TTA) is an attractive way to boost the efficiency of conventional fluorescent OLEDs. TTA-active anthracene derivatives are often considered as state-of-the-art emitters due to the proper energy level alignment and high fluorescence efficiency. Here we present two different methods to enhance the TTA efficiency. We show that the intensity of TTA-based delayed fluorescence directly depends on the intersystem crossing (ISC) rate. This ISC rate can be significantly enhanced in more conjugated compounds due to the resonant alignment of  $S_1$  and  $T_2$  energy levels. While enhanced ISC rate slightly quenches the intensity of prompt fluorescence, the rise of the triplet population boosts the intensity of resultant delayed fluorescence. Secondly, the triplet annihilation rate can be significantly enhanced by optimization of triplet exciton diffusion regime in the films of anthracene derivatives (see Fig. 1).



Fig.1 a) Log – log scale decay transients of 50 wt% Zeonex films of DPA compound 2 prepared by drop-casting on glass at room temperature (circles) and 80°C (squares). b) and c) Fluorescence microscopy images of 50% wt Zeonex films of DPA compound 2 drop – casted at room temperature and 80°C, respectively.

We show that the proper layer preparation technology has a crucial influence on uniformity and energetic disorder of the film. This enhances the non-dispersive triplet diffusion and increases the resulting delayed fluorescence intensity. The variation of TTA properties was showcased in a several series of highly fluorescent anthracene compounds decorated with various aryl and alkyl fragments at C-2, C-9 and C-10 positions.

Keywords: anthracene, triplets, annihilation, OLEDs.

## Fazinis virsmas 0.83PbMg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>O<sub>3</sub>-0.17PbTiO<sub>3</sub> kristale

## Relaxor to ferroelectric phase transition in 0.83PbMg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>O<sub>3</sub>-0.17PbTiO<sub>3</sub> single crystal

<u>Š. Svirskas<sup>1</sup></u>, J. Banys<sup>1</sup> and S. Kojima<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio al. 9/IIIb., LT-10222 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup> Graduate School of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba, Tsukuba, Ibaraki 305-8573, Japan

sarunas.svirskas@ff.vu.lt

Lead based relaxor ferroelectrics are technologically important materials. The compositions consisting of canonical relaxor and normal ferroelectric exhibit morphotropic phase boundary (MPB). The compositions in the vicinity of MPB show superior piezoelectric and dielectric properties.

One of the most popular system is lead magnesium niobate – lead titanate ( $PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3$ -PbTiO<sub>3</sub> – PMN-PT) which besides excellent properties show very interesting crossover from purely relaxor behaviour to normal ferroelectric. The intermediary compositions have a spontaneous 1st order phase transition from relaxor to normal ferroelectric phase. These phase transitions are very interesting from the point of view of lattice dynamics.

This work is devoted to the study of dielectric properties of PMN-17PT single crystals in a broad frequency (20 Hz - 120 GHz) and temperature (100 - 500 K) interval. These studies allowed us to thoroughly investigate the dynamics of this peculiar relaxor to ferroelectric phase transitions.

The 1st order phase transition was detected by the dielectric spectroscopy. It will be shown that PMN-17PT single crystal has a broad relaxor-like dispersion above 1 MHz frequency. The dielectric spectra were described by the empirical formulas and the temperature dependence of mean relaxation time was extracted from the approximations.

The thorough studies of temperature and frequency dependences revealed interesting features about dipole dynamics in PMN-17PT. The main scope of this work is to present the dynamics of this phase transition and reveal some controversies which were observed. Figure 1 represents the temperature dependence of complex dielectric permittivity.



Fig 1. Temperature dependence of complex dielectric permittivity at different frequencies.

Keywords: relaxors, phase transitions, PMN-PT

### Grafeno monosluoksniai lankstiems elektrochrominiams prietaisams

## Graphene monolayers for flexible electrochromic devices

<u>Asta Tamulevičienė</u><sup>1,2</sup>, Rimantas Gudaitis<sup>1</sup>, Erika Rajackaitė<sup>1</sup>, Šarūnas Meškinis<sup>1</sup>, Sigitas Tamulevičius<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas <sup>2</sup>Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas asta.tamuleviciene@ktu.lt

Lanksčios elektronikos prietaisų paklausa smarkiai prisidėjo prie lanksčių elektrodu, kurie galėtų atlaikyti ivairias deformacijas (tempimas, lenkimas. suvyniojimas), vystymo. Grafenas dėl savo įspūdingų judris), elektriniu (didelis krūvininkų optiniu (skaidrumas optiniame intervale >97%) ir mechaninių (Jungo modulis siekia 1100 TPa) savybių pritraukia vis daugiau dėmesio kaip perspektyvi lanksčių elektrodų medžiaga. Todėl grafeno pritaikymas elektriniuose prietaisuose, tokiuose kaip organiniai fotoelementai, baterijos, tranzistoriai, jutikliai yra plačiai tyrinėjamas [1].

Grafenas gali būti formuojamas eile metodų, pvz. mechaninis grafito sluoksniavimas, epitaksinis nusodinimas, cheminis nusodinimas iš garų fazės ir kt. Verta paminėti, jog cheminis nusodinimas iš garų fazės yra vienas dažniausiai naudojamų metodų dėl galimybės atlikti grafeno nusodinima dideliame plote. Dažniausiai nusodinimas yra atliekamas ant įvairių metalų (pvz. Ni, Cu) folijos, kuri atlieka katalizatoriaus vaidmenį grafeno sluoksnio formavime. Užaugintas grafeno sluoksnis gali būti perneštas (ištirpinant metalo folija) ant praktiškai bet kokio pagrindo, įskaitant ir polimerus kas leidžia panaudoti šiuos sluoksnius lanksčių prietaisų kūrimui [2].

Šiame darbe grafeno sluoksniai buvo formuojami ant vario folijos mikrobangų plazma aktyvuotu cheminiu nusodinimu iš garų fazės (2,45 GHz IPLAS CYRANNUS). Nusodinimas vykdomas dviem etapais: 1) atkaitinimas vandenilio aplinkoje (galia - 1,3 kW, slėgis – 30 mbar, H<sub>2</sub> srautas – 200 sccm, proceso trukmė – 30 min, pagrindo temperatūra 440 °C); 2) auginimas (galia – 1,1 kW, slėgis – 30 mbar, H<sub>2</sub> srautas – 200 sccm, CH<sub>4</sub> srautas – 25 sccm, proceso trukmė – 10 min, pagrindo temperatūra 440 °C). Grafeno pernešimui ant skaidrių polietileno ir kvarcinio stiklo pagrindų, vario folija buvo ištirpinta geležies chlorido (FeCl<sub>3</sub>) tirpale.

Grafeno sluoksnių, nusodintų ant vario folijos ir perneštų ant skaidrių pagrindų, apibūdinimui buvo panaudota Ramano sklaidos spektroskopija (Renishaw inVia spektrometras, bangos ilgis 532 nm, 50x objektyvas), kuri yra plačiai naudojama kaip nedestruktyvus grafeno apibūdinimo metodas. Optinės suformuotų sluoksnių savybės buvo tirtos 190-1000 nm intervale naudojant Avantes spektrometrą. Paviršiaus morfologija ištirta atominių jėgų mikroskopu JPK, NanoWizard®3.

1 paveiksle pateiktas grafeno, nusodinto ant vario folijos ir pernešto ant kvarco, Ramano sklaidos spektrai. Spektre stebimos trys smailės: G smailė ties 1592 cm<sup>-1</sup>  $(sp^2$  ryšiais susijungusių anglies atomų virpesiai plokštumoje), D ir D' smailės atitinkamai ties 1345 cm<sup>-1</sup> ir 1620 cm<sup>-1</sup> (grafene stebimos dėl susidariusių taškinių defektų), bei 2D smailė ties 2681 cm<sup>-1</sup>. Analizuojant 2D smailės formą galima nustatyti kiek grafeno sluoksnių sudaro suformuotą struktūrą [3]. Šiuo atveju 2D smailė buvo aproksimuojama vienu Lorencianu, ir gautas smailės pusplotis ~46 cm<sup>-1</sup>.



1 pav. Grafeno, suformuoto ant vario folijos ir pernešto ant kvarco, Ramano sklaidos spektras

Remiantis Ramano sklaidos spektroskopijos rezultatais (2D smailė aproksimuojama vienu Lorencianu, o pusplotis 46 cm<sup>-1</sup>, G smailė yra ties 1592 cm<sup>-1</sup>) galima teigti, jog suformuotas grafeno monosluoksnis. Šie sluoksniai bus panaudoti formuojant organinius elektrochrominius prietaisus.

Reikšminiai žodžiai: grafenas, elektrochrominiai prietaisai, plazma aktyvuotas cheminis nusodinimas iš garų fazės.

- [1] J. W. Jo, J. U. Lee, W. H. Jo, PolymInt 64, 1676 (2015).
- [2] H. Chang, H. Wu, Adv. Funct. Mater., 23, 1984 (2013).
- [3] N. Woehrl, O. Ochedowski, S. Gottlieb, K. Shibasaki, S. Schulz, AIP Adv. 4, 047128 (2014).

## Retųjų žemių elementų jonais legiruotų naujų stiklų ir granatų tyrimas

## Investigation of novel glasses and garnets doped with rare earth ions

Augustas Vaitkevičius<sup>1</sup>, Vaida Marčiulionytė<sup>1</sup>, Ekaterina Trusova<sup>2,3</sup>, Yauhen Tratsiak<sup>2</sup>, Mikhail Korjik<sup>2</sup>,

Gintautas Tamulaitis<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Semiconductor Physics Department and Institute of Applied Research, Vilnius University,

Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Research Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University, Bobruiskaya str.11, 220030 Minsk, Belarus <sup>3</sup>Belarusian State Technological University, Sverdlova str. 13a, 220006 Minsk, Belarus

Augustas.vaitkevicius@ff.vu.lt

Due to their low price and unsophisticated production method two component glasses are an attractive material platform for rapid prototyping of novel scintillators. The amorphous structure of glass also enables reaching high doping concentration leading to efficient excitation transfer and short emission decay lifetimes. Meanwhile, garnets are a very flexible class of materials that allows for engineering of the excitation transfer process and luminescence properties by creating solid solutions with lighter cations. The garnets composed of lighter ions are preferable for harsh radiation environments in high energy physics experiments.

Two sets of samples were investigated in this study. The first set consists of two-component silicate glasses doped with different rare earth ions. Cerium, terbium, dysprosium, and europium were used to dope barium, lithium, calcium, and strontium glasses. The influence of heat treatment on luminescence properties of glass samples was investigated. The second set of samples consists of modified cerium-doped yttrium aluminum garnets. Magnesium or calcium atoms were used to partially substitute yttrium atoms in the base garnet, meanwhile germanium was used to partially substitute aluminum atoms: Y<sub>2</sub>MgAlGe(AlO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>:Ce and Y<sub>2</sub>CaAlGe(AlO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>:Ce.

Confocal photoluminescence (PL) spectroscopy was used to study the samples. A WITec Alpha 300 S microscope system coupled via fiber to a thermally cooled CCD camera and 405 nm and 442 nm laser light sources were used. Equipping the microscope system with a high-numerical-aperture objective allowed us to perform spatially-resolved measurements with sub-micron in-plane resolution. Measurements of photoluminescence excitation spectra and XRD crystal structure investigation were also performed.

The results of studying the first set of samples showed that different rare earth ions are affected by composition of the glass matrix in different ways. Europium-doped glasses strongly depend on the composition of the glass matrix, while cerium-doped glasses show little sensitivity to the matrix composition. The emission spectra of other combinations of rare earth ions and glass hosts are also presented and discussed.

Investigation of garnet samples revealed that the partial substitution of yttrium by magnesium or calcium and aluminum with germanium does not result in any significant distortion of the crystal lattice (Fig. 1).



Fig. 1. XRD patterns of YAG:Ce garnets with Mg, Ca and Ge substitution and YAG:Ce for reference.

The study of emission spectra with spatial resolution revealed that all the aggregates exhibit similar PL spectra. This is an indication of good structural quality of the novel garnets. We observed that incorporation of magnesium into the garnet structure results in a red shift of the cerium ion emission by 7 nm in respect to that in garnets where calcium was used instead of magnesium. Thus, the emission wavelength of cerium is tunable by garnet composition, while the incorporation of magnesium and calcium does not result in formation of structural phases other than the garnet-type single crystal, provided that the growth conditions are optimized.

Keywords: glass, garnet, luminescence, XRD

## 10<sup>16</sup>-10<sup>17</sup> cm<sup>-2</sup> neutronų įtėkiu paveikto Si fotolaidumas ir magnetovaržinis judris

# Photoconductivity and magnetoresistance mobility in the irradiated to 10<sup>16</sup>-10<sup>17</sup> cm<sup>-2</sup> neutron fluence Si

Juozas Vaitkus, Algirdas Mekys, Vilius Vertelis

Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, ir Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

juozas.vaitkus@ff.vu.lt

Tirti labai dideliu neutronų įtėkiu (10<sup>16</sup>-10<sup>17</sup>cm<sup>-2</sup>) paveikti silicio monokristalai, kas reiškia, kad neutronų skaičius patekęs į kristalo kvadratinį centimetrą viršija paviršiaus atomų skaičių 10-100 kartų. Yra įvertinta [1], kad neutronas, pateikęs į Si branduolį, jam perduoda tokį judesio kieki, kad išjudintas Si atomas judėdamas kristalu sukuria klasterius, ir įtėkis 1e14 cm<sup>-2</sup> sukuria defektų apie 1e14 cm<sup>-3</sup>. Eksperimentiškai yra gauta, kad klasteriai yra pagrindiniai rekombinacijos centrai apšvitintame hadronais Si [2], ir jų koncentracija proporcinga įtėkiui 1e12-3e16 cm<sup>-2</sup> įtėkių intervale. Klasteriai gaudo krūvininkus kaip įelektrintos priemaišos, todėl tokiais įtėkiais paveiktame Si krūvininkų judris turi mažėti didėjant klasterių koncentracijai. Pasirinktas tyrimui įtėkių intervalas yra aktualus Didžiojo hadronų kolaiderio (LHC) detektorių konstravimui, nes tokiais įtėkiais bus paveikiami detektoriai trakeriuose ir kalorimetruose, kada bus padidintas protonų pluošto tankis LHC.

Šis darbas pristato preliminarinius tyrimų rezultatus, kurie vėliau bus patikslinti padidinus ištirtų bandinių statistiką.

Krūvininkų judris buvo matuojamas panaudojant standartinį magnetovaržos efektą mikrostripiniuose bandiniuose (atstumas tarp kontaktų 43 μm, bandinio ilgis – keli mm) magnetiniame lauke iki 1,75 T. Tyrimai atlikti 260-290 K temperatūroje. Tirti Čochralskio metodu (magnetiniame lauke) (MCz) ir zoninio lydymo ((FZ) būdais užauginti Si bandiniai.

Judrio kitimą nuo įtėkio iliustruoja 1 pav.



1 pav. Magnetovaržinio judrio prieklausa nuo neutronų įtėkio dviejų tipų Si. Intarpe bandinio principinis vaizdas (mastelio nesilaikoma).

Fotolaidumo spektrinis pasiskirstymas matuotas 0,4-1,5 eV fotonų energijų intervale, sužadinimo metu palaikant pastovų fotonų skaičių, tyrimus atliekant 20-150 K temperatūroje. Šie tyrimai leidžia nustatyti gilių centrų aktyvacijos energiją, aktyvius centrus ir įvertinti paviršinės rekombinacijos įtaką. 2 pav. parodytos tipinės fotolaidumo prieklausos nuo fotono energijos.



2 pav. Fotolaidumo prieklausos nuo fotono energijos Si bandinyje apšvitintame neutronais (eksperimento detalės pateiktos intarpe).

Šie tyrimai parodė, kad vyraujančių centrų optinės aktyvacijos energijos yra 0,57 – 1,1 eV intervale, sudarantys būsenų juostą, kuri sąlygoja ir tamsinio laidumo prieklausą nuo temperatūros.

Seklesniųjų lygmenų užpildymas sąlygoja ilgalaikės relaksacijos pasireiškimą, o šio efekto prieklausa nuo elektrinio lauko parodo vidinio elektrinio lauko pasiskirstymo pokytį.

Didinant elektrinį lauką didėja paviršinės rekombinacijos greitis, kas parodo vykstantį lauko persiskirstymą mikrostripinėje sandaroje ir pasyvuojančio SiO<sub>2</sub> sluoksnio įtakos didėjimą priklausantį nuo elektrinio lauko.

Pagrindinis rezultatas: elektronų judris ženkliai priklauso nuo neutronų įtėkio, ir ši prieklausa turi būti įskaitona nustatant Si detektorių darbo režimą LHC.

Darbas atliktas CERN RD50 programos rėmuose, tyrimus parėmė LMA ir AIDA-2020 TNA.

Reikšminiai žodžiai: silicis, magnetovaržinis judris, apšvita neutronais.

### Literatūra

[1] M. Huhtinen, Nucl. Instrum. Methods. A 491, 194–215 (2002).

[2] E. Gaubas, T. Čeponis, A. Uleckas, and J. Vaitkus. Nucl. Instrum. Methods. A 612(3), 563–565 (2010

# Radionuklidų ir stabilių elementų nusėdimo iš atmosferos eigos vertinimas naudojant *Pinus sylvestris* kaip bioindikatorių

# Tracing the deposition of radionuclides and stable elements with *Pinus sylvestris* as bioindicator

Darius Valiulis<sup>1</sup>, Arūnas Gudelis<sup>1</sup>, Vidas Stakėnas<sup>2</sup> <sup>1</sup> Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius. <sup>2</sup> Lietuvos agrarinių ir miškų mokslų centro filialas Miškų institutas, Liepų g. 1, 53101 Girionys, Kauno r. Valiulis@ar.fi.lt

Tyrimai skirti nustatyti Pinus sylvestris rievių metodo tinkamumą vertinant Cs ir Pb nusėdimo iš atmosferos Tampa svarbu turėti laikine eiga. patikima būdą minėtų elementų nusėdimui bioindikatorini vertinti tiek dėl plėtojamų atominės energetikos projektų Lietuvoje ir už jos ribų (indikatorinis elementas Cs), tiek dėl paskutinį dešimtmetį stebimo oro užterštumo KD didėjimo Lietuvos foninėse vietovėse (indikatorinis elementas Pb). Pinus sylvestris pasirinkta dėl jos paplitimo visoje Lietuvos teritorijoje, amžiaus iki 200 metų ir dėl metodo vienerių metų skiriamosios gebos.

Trijų pušų rievių mėginiai paimti Labanoro miške, toli nuo vietinių taršos šaltinių. Ši vieta taip pat nepaveikta Černobilio AE avarijos metu susidariusiu radioaktyviu pernašu. Dėl didelės darbo apimties (ištirti 573 rievių mėginiai) ir mažo tyrimams skirto biudžeto, matuotos tik Pb ir Cs koncentracijos ir izotopiniai santykiai.<sup>137</sup>Cs koncentracija rievėse matuota naudojant gama spinduliu spektr. (well-type HPGe det. su 170 cm3 tūrio krist.). <sup>3</sup>Cs, Pb koncentracija ir <sup>206</sup>Pb/<sup>207</sup>Pb santykis matuotas ICP-MS Element 2 spektrometru. Cezio vienas rieviu mėginys atitiko 5 metu laikotarpi, švino – vieneriu metu laikotarpį. Mėginiai apėmė 1910-2012 metų laikotarpį. Literatūros duomenys apie medžių rievių panaudojimo tinkamumą švino ir cezio nusėdimui iš atmosferos vertinti labai prieštaringi [1,2]. Apibendrinant galima pasakyti, kad tai labai priklauso nuo medžių rūšies ir ištirtų mėginių skaičiaus. Duomenų apie Pinus sylvestris rievių panaudojimą yra dar mažiau, tačiau [3] parodė, kad šis metodas pakankamai patikimas vertinant Pb nusėdimo eiga šalia stipraus vietinio taršos šaltinio (gautas 20 metų visų įvykių vėlavimas). Ta pati patvirtino ir  ${}^{206}\text{Pb}/{}^{207}\text{Pb}$  santykio kitimas. Mūsu atveju tirtas regioninis literatūroje gerai aprašytas Pb nusėdimas, ir taip pat gautas tiek Pb nusėdimo, tiek <sup>206</sup>Pb/<sup>207</sup>Pb santykio eigos 24 metų vėlavimas. <sup>137</sup>Cs regioninio nusėdimo eigą Lietuvoje įvertinta pagal [4] šaltinį. Ši eiga atkartota <sup>137</sup>Cs/<sup>133</sup>Cs izotopų santykio Pinus sylvestris rievėse tik su 15 metų paankstinimu. Pranešime pateikiami tokių Pb ir Cs duomenų ypatumų paaiškinimai atsižvelgiant į Pinus sylvestris anatomiją ir fiziologija.

Atlikti tyrimai parodė, kad *Pinus sylvestris* rievių metodas gali būti naudojamas kokybiniam švino ir <sup>137</sup>Cs tiek regioninio, tiek šalia stiprių vietinių taršos šaltinių nusėdimo eigos vertinimui. Kaip kiekybinis metodas jis per daug imlus tiek darbui, tiek investicijoms, todėl

esant dabartiniam tokio metodo poreikiui jį tobulinti netikslinga.

*Reikšminiai žodžiai: cezis, švinas, izotopai, rievės, nusėdimas.* 

## Literatūra

[1] I. Lovrencic, et al. (2008). Distribution of 137Cs, 40K and 7Be in silver fir-tree. J. Radioanal. Nucl. Chem. 275, 71-79.

[2] P. Stille, et al. (2012). The suitability of annual tree growth rings as environmental archives. Geoscience, 344: 297-311.

[3] C. Aznar, C. Begin, M.Riher (2008). Spatiotemporal reconstruction of lead contamination using tree rings and organic soil layers. Sc. of The Total Environment, vol.407, 233-241.

[4] D. Butkus, et al. (2001). 137Cs and 90Sr in the soils of Lithuania. Geochem. Int. 39, 7, 719-724.

# Na<sub>2</sub>Zn<sub>0,5</sub>Mn<sub>0,5</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub> keramikos gamyba, struktūra, paviršiaus ir impedanso spektroskopijos tyrimai

## Preparation, Structure, Surface and Impedance Spectroscopy of Na<sub>2</sub>Zn<sub>0.5</sub>Mn<sub>0.5</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub> Ceramics

<u>Vilma Venckutė<sup>1</sup></u>, Antonija Dindune<sup>2</sup>, Dagnija Valdniece<sup>2</sup>, Aija Krumina<sup>2</sup>, Martynas Lelis<sup>3</sup>, Vitalija Jasulaitienė<sup>4</sup>, Andrius Maneikis<sup>4</sup>, Saulius Daugėla<sup>1</sup>, Tomas Šalkus<sup>1</sup>, Algimantas Kežionis<sup>1</sup>, Antanas F. Orliukas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9/3, LT-10222 Vilnius, Lietuva

<sup>2</sup>Neorganinės chemijos institutas, Rygos technikos universitetas, Paula Valdena g. 3/7, LV-1048, Riga, Latvia

<sup>3</sup>Vandenilio energetikos technologijų centras, Lietuvos energetikos institutas, Breslaujos g. 3, LT-44403 Kaunas,

Lietuva

<sup>4</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius, Lithuania <u>vilma.venckute@ff.vu.lt</u>

Na<sub>2</sub>Zn<sub>0.5</sub>Mn<sub>0.5</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub> milteliai buvo sintezuoti kietuju fazių reakcijos metodu. Rentgeno spindulių difrakcijos analizė parodė, kad Na2Zn0.5Mn0.5P2O7 susideda iš dviejų fazių: triklininės Na<sub>2</sub>MnP<sub>2</sub>O<sub>7</sub> (erdvinė simetrijos grupė  $P \bar{1}$ ), bei tetragoninės Na<sub>2</sub>ZnP<sub>2</sub>O<sub>7</sub> (erdvinė simetrijos grupė P4<sub>2</sub>/mmm). Na<sub>2</sub>MnP<sub>2</sub>O<sub>7</sub> fazė sudarė 38,4%, o Na<sub>2</sub>ZnP<sub>2</sub>O<sub>7</sub> – 61.6% skaičiuojant pagal mase. Cheminė miltelių bei iškepintos keramikos sudėtis buvo ištirta Rentgeno spindulių dispersijos (EDX) bei spinduliu Rentgeno fluorescencijos (XFS) spektroskopijos būdais. Paviršiaus elementinė sudėtis buvo ištirta Rentgeno spindulių fotoelektronų (XPS) spektrometru. Kaip parodė skenuojančio elektroninio mikroskopo (SEM) nuotrauka, Na<sub>2</sub>Zn<sub>0.5</sub>Mn<sub>0.5</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub> keramikos kristalitų dydžiai yra nuo 3 µm iki 21 µm.

 $Na_2Zn_{0.5}Mn_{0.5}P_2O_7$  keraminiai milteliai buvo suspausti į tabletes 200 MPa slėgiu.  $Na_2Zn_{0.5}Mn_{0.5}P_2O_7$ keramikos kepinimo temperatūra buvo 953 K, o kepinimo trukmė – 2 h. Gautos keramikos tankis siekė 3,08 g/cm<sup>3</sup>. Impedanso spektroskopijos matavimams ant cilindro formos bandinėlių buvo tepama platinos pasta ir atkaitinama esant 920 K temperatūrai.

Atliekant impedanso matavimus dviejų elektrodu metodu [1], realiosios laidumo dalies priklausomybė dažnio Na<sub>2</sub>Zn<sub>0.5</sub>Mn<sub>0.5</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub> keramikoje rodo nuo dispersijos sriti, kuri pasislenka į aukštesnių dažnių puse kylant temperatūrai nuo 350 K iki 700 K. Tai yra relaksacinio tipo dispersijos požymis. Laidumo dispersija virš 350 K yra siejama su Na<sup>+</sup> jonų pernaša keramikos kristalituose. Intervale nuo 300 K iki 360 K buvo pastebėtas nukrypimas nuo Arenijaus dėsnio. Kaitinimo stadijos metu temperatūrai kylant nuo 300 K iki 350 K laidumas mažėjo. Tai yra susiję su vandens išgarinimu iš keramikos. Panaši anomalija pasireiškė ir vėsinimo metu: intervale nuo 330 K iki 300 K staigiai pradėjo didėti keramikos laidumas dėl vandens adsorbcijos. Panašios anomalijos 300-360 K intervale buvo stebėtos ir tiriant Na2MnP2O7, NaCsZnP2O7 bei Na<sub>2</sub>ZnP<sub>2</sub>O<sub>7</sub> keramikas.

Temperatūrų intervale nuo 600 K iki 630 K buvo pastebėtas  $Na_2Zn_{0.5}Mn_{0.5}P_2O_7$  kristalitų laidumo aktyvacijos energijos pasikeitimas nuo 0,7 eV, kai temperatūra 350-600 K, iki 0,9 eV, kai temperatūra didesnė nei 630 K. Šis pasikeitimas siejamas su faziniu virsmu  $Na_2MnP_2O_7$  fazėje [2]. Visame tirtame temperatūrų intervale nuo 300 K iki 700 K pastebėtas dielektrinės skvarbos didėjimas kaitinant keramiką.  $\varepsilon'$  didėjimas kylant temperatūrai yra sąlygotas elektroninės poliarizacijos, gardelės virpesių ir Na<sup>+</sup> jonų migracinės poliarizacijos Na<sub>2</sub>Zn<sub>0,5</sub>Mn<sub>0,5</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub> kristalituose.

Reikšminiai žodžiai: superjonikai, natrio jonų baterijos, pirofosfatai, impedanso spektroskopija.

- [1] T. Šalkus et al. Matter. Sci. Eng. B 172(2), 156 (2010).
- [2] S. Daugėla et al. Solid State Ionics **302**, 72 (2017).

## Tunelinių Co-MgO-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> jungčių gaminimas ir jų magnetovaržinės savybės

## Preparation and magnetoresistive properties of Co-MgO-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> tunneling structures

Bonifacas Vengalis<sup>1</sup>, Andrius Maneikis<sup>1</sup>, Gražina Grigaliūnaitė-Vonsevičienė<sup>2</sup> <sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10223 Vilnius <sup>2</sup>Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, 10223 Vilnius bonifacas.vengalis@ftmc.lt

Daugelio šiuolaikinės spintronikos prietaisų veikimą lemia magnetinės tunelinės jungtys (MTJ). Jos yra sudarytos iš plonasluoksnių feromagnetinių (FM) elektrodų, kurie yra atskirti nanometrinio storio dielektriniu tarpsluoksniu. Yra žinoma, kad pro tokią jungtį tekanti tunelinė poliarizuotų elektronų srovė, priklauso nuo FM elektrodų tarpusavio įmagnetėjimo, kurį galima valdyti išoriniu magnetiniu lauku. MTJ pasižymi tunelinės magnetovaržos (TMR) reiškiniu ir yra naudojamos silpno lauko jutikliams, magnetinės elementams, mikrobangu jutikliams, atminties magnetiniu lauku valdomiems mikrobangu generatoriams ir kitiems spintronikos prietaisams kurti Kambario temperatūroje veikiančiu [1]. MTJ elektrodams reikalingi feromagnetikai, pasižymintys aukštomis Kiuri temperatūromis ( $T_{\rm C}$ >>300 K), o taip pat didelėmis krūvininkų sukinių poliarizacijos vertėmis (P≈1). Gerai žinomi feromagnetiniai metalai (Fe, Co, Ni) šiuo metu yra plačiai naudojami MTJ gaminimui, nors visu ju krūvininkai vra tik dalinai orientuoti (P << 1). Iš visų žinomų feromagnetinių oksidų MTJ gaminimui daugiausiai vilčių teikia magnetitas  $(Fe_{3}O_{4}),$ pasižymintis aukšta  $T_{\rm C}$  verte ( $\approx 585^{\circ}$ C) ir  $P \approx 1$  [2].

Šio darbo tikslas buvo pagaminti plonasluoksnes tunelines Co-MgO-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> struktūras ir ištirti jų magnetovaržines savybes.

Plonieji Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> sluoksniai (d=100÷200 nm) buvo auginami ant kaitinamų ( $T_p$ =350-400°C) monokristalinių MgO(100) padėklų, esant 5 Pa darbinių Ar-O<sub>2</sub> dujų mišinio (50:1) slėgiui naudojant pastoviosios srovės magnetroninio dulkinimo technologija. Ypač ploni MgO sluoksniai (d=1,5÷2,5 nm), reikalingi tunelinio barjero sudarymui, užgarinti kintamosios buvo srovės magnetroninio dulkinimo būdu naudojant kristalini MgO taikini. Viršutinio FM elektrodo sudarymui reikalingi Co sluoksniai (d=30-40 nm) buvo užgarinami pastoviosios srovės magnetroninio dulkinimo būdu naudojant metališkajį Co taikinį. Pagaminti daugiasluoksniai dariniai buvo papildomai 1,5 val. kaitinami Ar dujų aplinkoje, esant 350°C temperatūrai. Vėliau panaudojant optinę litografiją iš jų buvo formuojamos tunelinės struktūros (20x20  $\mu m^2$ ) elektriniams matavimams atlikti.

Rentgeno struktūriniai tyrimai parodė, kad Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> sluoksniai, užauginti (350÷400)°C temperatūroje ant suderintų gardelių MgO(100) padėklų, buvo epitaksiniai, tačiau auginant žemesnėse ( $T \le 300$ °C) ir aukštesnėse ( $T \ge 450$ °C) temperatūrose jie pasižymėjo polikristaline sandara. Elektrinės Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> sluoksnių ir Co-MgO-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> darinių savybės buvo tiriamos (78÷300) K temperatūrų ruože naudojant atitinkamai keturių ir trijų elektrodų matavimo būdus. Šaldant Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> sluoksnių elektrinė varža didėjo pagal Moto šuolinio elektrinio laidumo dėsnį, o ties Vervėjaus virsmo temperatūra ( $T_{v}\approx110$  K) buvo stebimas charakteringas elektrinės varžos R(T) šuolis. Co-MgO-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> dariniams buvo išmatuotos netiesinės voltamperinės charakteristikos.

Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> sluoksnių ir tunelinių jungčių magnetovaržos (*MR* ir *TMR*) buvo tiriamos keičiant magnetinio lauko dydį (B=-0,75 ÷ +0,75 T) taip pat jo kryptį sluoksnių plokštumos atžvilgiu. Šiame darbe išaugintiems Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> sluoksniams, esant silpniems laukams (B<0,1T), kambario temperatūroje buvo išmatuotos teigiamos magnetovaržos (*MR*=*R*(*B*)-*R*<sub>0</sub>/*R*<sub>0</sub>) vertės, tuo tarpu stipriuose laukuose (B>0,4 T) *MR* vertės buvo neigiamos (žr. 1 a pav.). Didžiausios išmatuotos tunelinės magnetovaržos *TMR*(*T*=300K) vertės, siekiančios 1,2 %, (žr. 1 b pav.) yra artimos atitinkamoms vertėms, išmatuotoms panašioms Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-MgO-(Co-Fe-B) tunelinės jungtims [3].



1 a, b pav.  $Fe_3O_4$  sluoksnio magnetovarža *MR* (a) ir tunelinio Co-MgO-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> darinio magnetovarža *TMR* (b) išmatuotos kai *T*=300K ir *H* nukreiptas lygiagrečiai sluoksnio plokštumai.

Reikšminiai žodžiai: Magnetitas, plonieji sluoksniai, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-MgO-Co tunelinės jungtys, tunelinė magnetovarža.

- [1]E. Y. Tsymbal, O. N.Mryasov, P. R. LeClair, J. Phys: Condened Mat., 15, R109-R142 (2003).
- [2]W.E. Pickett, J.S. Moodera, Physics Today, 54, 39 (2001).
- [3] L. Marnitz et al, AIP Advances5, 047103 (2015).
### Seleno ir švino priemaišų įtaka Sn2P2S6 kristalų dielektrinėms ir feroelektrinėms savybėms

# Influence of selenium and lead impurities on dielectric and ferroelectric properties of Sn<sub>2</sub>P<sub>2</sub>S<sub>6</sub> crystals

<u>Ilona Zamaraitė<sup>1</sup>, Andrius Džiaugys<sup>1</sup>, Yulian Vysochanskii<sup>2</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup></u> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Institute of Solid State Physics and Chemistry of Uzhgorod University, Užgorodas, Ukraina ilona.zamaraite@ff.vu.lt

 $Sn_2P_2S_6$  (SPS) crystal is ferroelectric-semiconductor exhibiting photorefractive, photovoltaic properties and strong piezoelectric effect [1]. This crystal attracts special attention, since it is considered as a promising material for a variety of applications.

At substitution of sulfur by selenium, in  $Sn_2P_2Se_6$ (SPSe) compound, phase transition temperature decreases. At the same time, incomenssurate phase arises [2]. The substitution of tin by lead atoms in the cation sublattice of SPS also leads to a decrease of the phase transition temperature [3]. The replacement of S by Se or Sn by Pb could effectively change dielectric and ferroelectric properties of crystals. In this contribution, we present the effect of the Pb and Se on the dielectric, pyro- and ferroelectric properties of  $Pb_{2y}Sn_{2(1-y)}P_2(Se_xS_{1-x})_6$  system.

 $Pb_{2y}Sn_{2(1-y)}P_2(Se_xS_{1-x})_6$  system crystals were grown by vapour transport technique. In order to obtain a good electrical contact silver paste was painted on the top and bottom surfaces of the crystals. The measurements of dielectric permittivity were carried out using a LCR meter HP4284A, which operates in the frequency range from 20 Hz to 1 MHz. The measurements were performed on cooling. The cooling rate was 1 K/min. The samples were cooled using the liquid nitrogen. The pyrocurrent and ferroelectric hysteresis loops have been investigated by TF Analyzer 2000 aixACCT.

In summary, he phase transition temperature decreases with the increase in the tin or lead concentration in the  $(Pb_ySn_{1-y})_2P_2(Se_xS_{1-x})_6$  system. With increasing concentration of the tin or lead the coercive field increases.



Fig. 1. Temperature dependences of the real and imaginary part of dielectric permitivity of Sn<sub>2</sub>P<sub>2</sub>(Se<sub>x</sub>S<sub>1-x</sub>)<sub>6</sub> for concentrations x=0.1; 0.2; 0.3.

*Keywords: phosphorous chalcogenide, dielectric spectroscopy, ferroelectric.* 

#### References

[1] Y. Vysochanskii, M. Medulych, A. Molnar, K. Glukhov, A. Dziaugys, J. Banys, R. Yevych, and M. Maior, Ferroelectrics **462**, 117 (2014).

[2] R. Yevych and Y. M. Vysochanskii, Condens. Matter Phys. 9, 681 (2006).

[3] K. Rushchanskii, R. Bilanych, A. Molnar, R. Yevych, A. Kohutych, S. Perechinskii, V. Samulionis, J. Banys and Yu. Vysochanskii, Phys. Status Solidi B **253**, 384 (2016).

# Dielektrinės BaTiO<sub>3</sub> pagrindu pagamintų kompozitų savybės

# **Dielectric Properties Of BaTiO<sub>3</sub> Based Composites**

<u>Sergejus Balčiūnas</u><sup>1</sup>, Maksim Ivanov<sup>1</sup>, Satoshi Wada<sup>2</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup> <sup>1</sup>Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania <sup>2</sup>Interdisciplinary Graduate School of Medical and Engineering, University of Yamanashi, Yamanashi, Japan.

sergejus.balciunas @ff.vu.lt

For the past 40-50 years, lead based perovskite  $Pb(Zr_xTi_{1-x})O_3$  (PZT) piezoelectric ceramics have dominated the commercial market of piezoelectric devices due to their remarkable dielectric and piezoelectric properties and ability to operate in wide temperature range. But due to environmental concerns the use of PZT in the European Union was limited.

In our presentation broadband dielectric properties of BaTiO<sub>3</sub> (BT) based composites with core-shell superstructure will be presented. The composites were prepared in two steps. BT, BiFeO<sub>3</sub> (BF). BaTiO<sub>3</sub>-Bi(Mg<sub>0.5</sub>,Ti<sub>0.5</sub>)O<sub>3</sub> (BT-BMT) and BaTiO<sub>3</sub>-Bi (Mg<sub>0.5</sub>,Ti<sub>0.5</sub>) O<sub>3</sub>-BiFeO<sub>3</sub> (BT-BMT-BF) nanoparticles were compressed into low density pellets and head treated to create a necking structure. Then using solvothermal reaction method the epitaxial layer of BT was deposited around BT, BF, BT-BMT and BT-BMT-BF particles. In such systems cores are stressed by barium titanate shell creating similar conditions as inmorphotropic phase boundary (MPB), thus increasing dielectric and piezoelectric constants.

Dielectric measurements were performed in 120 -500 K temperature and  $10^1 - 10^9$  Hz frequency range. The specimen was polished and washed in acetone bath then parallel electrodes were made using silver paste. In frequency range from  $10^1$  to  $10^6$  Hz the complex impedance was measured using HP 4284A precision LCR meter. To obtain highest frequencies  $(10^6-10^9 \text{Hz})$ the coaxial line was terminated by a flat capacitor reflection and phase were measured using Agilent 8714ET RF network analyser. All measurements were performed during cooling cycle at 1 K/min rate. We have investigated 4 different composite systems where core is a good dielectric, a relaxor, a ferroelectric and a non-ferroelectric material. In figure 1 we show composite: temperature dependence of а BaTiO<sub>3</sub>-Bi(Mg<sub>0.5</sub>,Ti<sub>0.5</sub>)O<sub>3</sub> relaxor core with BaTiO<sub>3</sub> ferroelectric shell. We have observed an anomaly at 1MHz at 382K temperature. The temperature of an anomaly coincides with an anomaly of a relaxor part found in a paper written by Xiong [1].



Fig. 1. Temperature dependence of BT/BT-BMT composite at different temperature

*Key words: Dilectric permmitivity, Barium titanate, temperature dependance, phase transitions.* 

#### Literature

 B. Xiong, H. Hao, S. Zhang, H. Liu, and M. Cao, "Structure, Dielectric Properties and Temperature Stability of BaTiO3–Bi(Mg1/2Ti1/2)O3 Perovskite Solid Solutions," *J. Am. Ceram. Soc.*, vol. 94, no. 10, pp. 3412–3417, Oct. 2011.

#### Dielektrinės viendimensinio ledo savybes HHTP -4H<sub>2</sub>O kristalituose

### Dielectric Properties of one dimensional ice in HHTP-4H<sub>2</sub>O crystallites

Sergejus Balčiūnas<sup>1</sup>, Anna Peterson<sup>2</sup>, Maksim Ivanov<sup>1</sup>, Jasper Adamson<sup>2</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup> <sup>1</sup>Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania <sup>2</sup>National Institute of Chemical Physics & Biophysics, Akadeemia tee 23, 12618 Tallinn sergejus.balciunas @ff.vu.lt

The idea that water molecules can be translated in to a polar form of ice was introduced in early 1933 in a paper written by J. D. Bernal and R. H. Fowler [1]. To obtain polar ice there are several successful techniques based on surface layer deposition and dimensionally reduction in confined phases like in water filled carbon nanotubes. In those systems the alignment of polar ice is difficult and in practice we need a bulk dipolar alignment. Therefore the new approach is to exploit alignment of polar ice in crystalline voids.

In this poster presentation dielectric properties of 2,3,6,7,10,11 hexahydroxytriphenyle tetrahydrate cold pressed ceramics will be presented. The measurements of dielectric permittivity was performed using HP 4284A precision LCR meter and P(E) curves were obtained using AixACCT TFAnalyzer 2000 E system. The dielectric spectra show an anomaly at 256 K temperature (Fig. 1). Furthermore it can be noted that temperature dependence curves slightly follows Curie Weiss law which is typical for improper ferroelectrics. The frequency dependence spectra show 4 relaxation processes A, B, C and D (Fig. 2.) The first relaxation at the lowest frequency range (A) is due to polarization between two contacts and has no particular interest for us. From Cole - Cole approximations we have extracted relaxation times for the second and third process (B and C) and fitted using Arrhenius law [2]:

$$\tau = \tau_0 e^{E_A/_{k_BT}}$$

here,  $E_A$  – activation energy,  $k_B$  – Boltzmann constant,  $\tau_0$  – attempt time. For both relaxation processes activation energy in the margin of errors is the same and is equal to 300meV. Regarding the last relaxation (D),



Fig. 1. Temperature dependence of the real (a) and imaginary (b) parts of dielectric permittivity for HHPT cold pressed pellets.

it is only visible at low temperature when relaxation time decreases below gigahertz range and we can see a tail at few hundred kilohertz. It's known that water molecules can give a relaxation in 0.1-1 THz range. In some cases this frequency can be lowered if water molecules are in confine spaces or in form of thin films. For P(E) measurements up to 60 kV/cm field was applied. No hysteresis loops were observed below phase transition.



Fig.2. Frequency dependence of the real (a) and imaginary (b) parts of dielectric permittivity for HHPT cold pressed pellets. Regions mark as A, B, C and D refers to relaxations accordingly: contacts, grain boundary, twin boundary, water molecules or from HHTP grains.

*Key words: Dilectric permmitivity, HHTP, temperature dependance, phase transitions.* 

#### Literature

- J. Bernal and R. Fowler, "A theory of water and ionic solution, with particular reference to hydrogen and hydroxyl ions," *J. Chem. Phys.*, vol. 1, no. 8, pp. 515–548, 1933.
- [2] S. Arrhenius, "Über die Dissociationswärme und den Einfluss der Temperatur auf den Dissociationsgrad der Elektrolyte," Z. Für Phys. Chem., vol. 4, no. 1, pp. 96–116, 1889.

# Kompozitų su anglies nanovamzdeliais elektrinių savybių tyrimas

# Broadband electrical properties of carbon nanotubes epoxy composites

I. Kranauskaite<sup>1</sup>, J. Macutkevic<sup>1</sup>, D. Bychanok<sup>2</sup>, D. Meisak<sup>2</sup>, J. Banys<sup>1</sup> Radiophysics Department, Physics faculty, Vilnius University, Sauletekio av. 9 Vilnius, LT-10222, Lithuania <sup>2</sup> Institute for Nuclear Problems, Belarus State University, Bobruiskaya 11 Minsk, 220030, Belarus ieva.kranauskaite@ff.vu.lt

Carbon nanotubes (CNT) attract the attention of many researchers for investigations due to their excellent thermal, mechanical properties and very high electrical conductivity. Combining conductive CNTs and insulating polymer as the matrix the result is a new material with properties different from each component separately. Electrically percolative polymer composites are attractive due to their potential applications as antistatic, sensitive materials and electromagnetic coatings [1].

Despite of outstanding properties, CNTs are fairly expensive and while producing the composites it is important to use as small amount of CNTs as possible. That means that the percolation threshold should be as low as possible.

The percolation threshold according to excluded volume theory is inversely proportional to CNTs aspect ratio [2], however, the experimental percolation threshold value could be much higher or lower than theoretical. The electrical conductivity and the percolation threshold depends on filler parameters, dispersion and even from composite preparation technology. The impact of these factors on broadband electrical properties are not clearly understood and an investigation is still needed in this field. Due to that, epoxy resin composites filled with multiwalled carbon nanotubes (MWCNTs) were produced and electrical properties and percolation phenomenon were investigated in wide frequency range from 20 Hz to 2 THz.

The epoxy resin composites were produced with MWCNTs concentration from 0 wt.% to 2 wt.%, the average diameter of used nanotubes was about 30-40 nm, their length is up to  $100 \ \mu m$ .

Pure epoxy resin is an insulator, with low dielectric permittivity value and has no DC conductvity at room temperature. The addition of small amount of MWCNT (0.25 wt%) into epoxy resin results several orders higher dielectric permittivity (below 10 kHz) and DC conductivity of 0.1 mS/m. The values of the dielectric permittivity and the electrical conductivity rapidly increase with MWCNT concentration, particularly at lower frequencies.

Above and near percolation threshold conductivity follows the power law:

$$\sigma(p) \propto (p - p_c)^t \tag{1}$$



Fig. 1. Concentration dependences of electrical conductivity of MWCNT composites. Solid line is the fit of the power law

The dielectric permittivity and electrical conductivity of epoxy resin with 0 wt.% of MWCNT are very low and addition of small amount of conductive MWCNTs increases the electrical conductivity by several orders. The percolation threshold was estimated as 0.1 wt.%.

#### Reikšminiai žodžiai: elektrinis laidumas, kompozitai.

- [1] F. Qin and C. Brosseau, J. Appl. Phys. 111, 061301 (2012).
- [2] I. Balberg, C. H. Anderson, S. Alexander, and N. Wagner, Phys. Rev. B 30, 3933 (1984).

# Elektrinės kompozitų su anglies nanovamzdeliais ir grafenu savybės

# Electrical properties of composites filled with carbon nanotubes and graphene nanoplatelets

I. Kranauskaite<sup>1</sup>, J. Macutkevic<sup>1</sup>, A. Borisova<sup>2</sup>, A. Martone<sup>3</sup>, M. Zarrelli<sup>3</sup>, A. Selskis<sup>4</sup>,

A. Aniskevich<sup>2</sup>, J. Banys<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Physics Faculty, Radiophysics Department, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Institute for Mechanics of Materials, University of Latvia, Riga, Latvia

<sup>3</sup>Institute for Composite and Biomedical Materials, National Research Council of Italy, Portici, Italy

<sup>4</sup>Center of Physical Science and Technology, Vilnius, Lithuania

ieva.kranauskaite@ff.vu.lt

The need of more performant integrated circuits and high power density communication devices drives the development of materials enhancing the conductive performances by carbon nanoparticles. Among nanocomposites, the ternary hybrid carbon nanotubes/graphene nanoplatelets/polymer composites represent a debatable route to enhance the transport performances.

Polymer composites with various carbon inclusions like multiwalled carbon nanotubes (MWCNT), carbon black (CB), graphite or graphene are interesting for fundamental research and are attractive for various applications [1]. The electrical percolation threshold of these composites could be very low and it is important to obtain as low percolation threshold as possible in order to reach optimal mechanical properties of composites and to use minimal concentration of expensive fillers. Adding several different fillers in the matrix the percolation threshold can decrease in comparison with single filler composites due to synergy effect between the different components [2].

In this contribution the dielectric/electrical properties of epoxy resin composites filled with different nanofillers were investigated. The composites were filled with MWCNT (filler content 0.015 - 0.3 wt.%), graphene nanoplatelets (GNP) (filler content 0.015 - 3wt.%) and hybrid MWCNT/GNP filler with total contents 0.03 and 0.3 wt.% and in different ratios.

The dielectric measurement were performed in frequency range from 20 Hz to 3 GHz at room temperature and at low frequencies (20 Hz - 1 MHz) in temperature range from 30 K to 300 K. In frequency range from 20 Hz to 1 MHz measurements were performed using LCR meter (HP4284) measuring the capacitance and the loss tangent. For low temperature measurements the helium closed cycle cryostat was used. In frequency range from 1 MHz to 3 GHz reflection and phase were measured using the coaxial line technique with the vector network analyzer (Agilent 8714 ET).

The quantitative synergy effect on the material electrical conductivity was obtained due to combination of both carbon fillers at filler content 0.3 wt.%. The electrical conductivity of hybrid filler composites, containing 0.25 wt.% of MWCNT and small amount of GNP 0.05 wt.% was 4 times higher than the conductivity of composites containing only MWCNT with total 0.3 wt.% content.

In this presentation the results of electrical investigations of epoxy resin matrix composites filled with MWCNT, GNP and hybrid MWCNT/GNP composites will be presented and discussed in wide frequency and temperature range.

*Reikšminiai žodžiai: dielektrinė spektroskopija, kompozitai, anglies nanovamzdeliai, grafenas.* 

- W. Bauhofer, J. Z. Kovacs, Composite science and technology 69, 1486 (2009).
- [2] J. Chen, X. Ch. Du, W. B. Zhang, J. H. Yang, N. Zhang, T. Huang, Y. Wang, Composite science and technology 81, 1-8 (2013).

### Dielektriniai Ba6-2xNd2xFe1+xNb9-xO30 keramikos tyrimai

# Investigation of dielectric relaxation processes in Ba<sub>6-2x</sub>Nd<sub>2x</sub>Fe<sub>1+x</sub>Nb<sub>9-x</sub>O<sub>30</sub> ceramics

Edita Palaimienė<sup>1</sup>, J. Macutkevic<sup>1</sup>, M. Kinka<sup>1</sup>, J. Banys<sup>1</sup>, M. Josse<sup>2</sup>, M. Maglione<sup>2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>CNRS, Université de Bordeaux, ICMCB-CNRS, 87 avenue du Dr. A. Schweitzer, Pessac F-33608, France edita.palaimienė@ff.vu.lt

Ba<sub>4</sub>Nd<sub>2</sub>Fe<sub>2</sub>Nb<sub>8</sub>O<sub>30</sub> ceramics belong to the tetragonal tungsten bronze (TTB) structural family, which attracted much attention in recent years [1]. Ba<sub>4</sub>Nd<sub>2</sub>Fe<sub>2</sub>Nb<sub>8</sub>O<sub>30</sub> (Ln = La, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd) family of ceramics is known to have a wide variety of interesting properties. Compounds with neodymium, samarium and europium are ferroelectrics, while ceramics with praseodymium and gadolinium exhibit relaxor properties [2, 3]. Moreover, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd samples exhibit at room temperature magnetic hysteresis loops, due the presence of the very small amount of barium ferrite secondary phase [2].

In this work dielectric properties and the phase diagram of  $Ba_{6-2x}Nd_{2x}Fe_{1+x}Nb_{9-x}O_{30}$  (x = 0.6, 0.8, 1) are presented. The broad dielectric anomaly in  $Ba_{6-2x}Nd_{2x}Fe_{1+x}Nb_{9-x}O_{30}$  is the sum of different relaxation processes. The relaxation process at higher temperatures (above 1 MHz) is the soft relaxation mode and the ferroelectric phase transition in  $Ba_{6-2x}Nd_{2x}Fe_{1+x}Nb_{9-x}O_{30}$  is of "order-disorder" type. The dielectric spectra of  $Ba_{6-2x}Nd_{2x}Fe_{1+x}Nb_{9-x}O_{30}$  (x = 0.6 and 0.8) ceramics is typical for ferroelectric relaxor's. The relaxor nature of these ceramics also confirms the broad and asymmetric distributions of relaxation times at lower temperatures. The mean and most probable relaxation times of these ceramics follow the Vogel-Fulcher law.



Fig.1 Temperature dependence of the dielectric permittivity for  $Ba_{6-2x}Nd_{2x}Fe_{1+x}Nb_{9-x}O_{30}$  ceramics with different x on heating (symbols) and cooling (lines) at 1 MHz frequency.

Keywords: dielectric, ceramic, relaxation.

- [1] X. Zhu, M. Fu, M. C. Stennet, P. M. Vilarinno, I. Levin, C. A. Randall, J. Gardner, F. D. Morrison, I. M. Reaney, Chemistry of Materials 27, 3250 (2015).
- [2] M. Josse, O. Bidault, F. Roulland, E. Castel, A. Simon, D. Michau, R. Von der Muhll, O. Nguyen, M. Maglione, Solid State Sci. 11, 1118 (2009).
- [3] M. Kinka, M. Josse, E. Castel, S. Bagdzevicius, V. Samulionis, R. Grigalaitis, J. Banys, M. Maglione, IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control 59, 9 (2012).

### Bi(Mn1/3Nb2/3)O3 keramikos laidumo tyrimas

# Conductivity investigations of Bi(Mn<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3</sub> ceramics

Edita Palaimienė<sup>1</sup>, J. Macutkevic<sup>1</sup>, A. Molak<sup>2</sup>, J.Banys<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup> Institute of Physics, University of Silesia, Ul. Uniwersytecka 4, PL-40-007 Katowice, Poland edita.palaimiene@ff.vu.lt

The simple perovskite  $BiMnO_3$  has received huge interest due to the coexistence of ferroelectricity and ferromagnetism. [1]. Multiferroic materials, in which electric and magnetic ordering coexist in a single phase, have attracted a lot of attention, as well as bismuth niobium manganate.

In this work we present broad band dielectric spectroscopy results of niobium bismuth manganite ceramic,  $Bi(Mn_{1/3}Nb_{2/3})O_3$ . Dielectric measurements were performed in wide temperature region (100 K – 500 K) at 20 Hz – 1 GHz frequencies. The new  $Bi(Mn_{1/3}Nb_{2/3})O_3$  ceramics have been prepared by dry sintering, using a two-stage synthesis process in air [2].

We discuss results in terms of conductivity, specific resistance, and electrical modulus. At room temperatures the electrical conductivity dominates in the properties of ceramics. The electric conductivity  $\sigma^*$  has been calculated according to the equation:  $\sigma^* = i\varepsilon^*\varepsilon_0\omega$ . In Fig. 1 is presented the frequency dependency of conductivity at different temperatures for Bi(Mn<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3</sub> ceramics. The conductivity follows the Almond-West power law  $\sigma(\omega) = \sigma_{DC} + A\omega^s$ , where  $\sigma_{DC}$  is the DC conductivity and  $A\omega^s$  is the AC conductivity. From these dependencies it is possible to determine DC conductivity. One can calculate activation energy (*E*<sub>A</sub>) and pre-exponential factor  $\sigma_0$  of the conductivity according to the Arrhenius law  $\sigma_{DC} = \sigma_0 \exp(-E_A/kT)$  (Fig. 1 Insert). Obtained parameters are  $E_A = 0.44$  eV and  $\sigma_0 = 153$  Sm<sup>-1</sup>.



Fig. 1 Frequency dependencies of DC conductivity at different temperatures for  $Bi(Mn_{1/3}Nb_{2/3})O_3$  ceramics. Inset, the 1/T dependence of  $\sigma_{DC}$  for  $Bi(Mn_{1/3}Nb_{2/3})O_3$ ceramics.

Keywords: multiferroic, ceramic, dielectric.

- [1] A.Moreira dos Santos et al., Solis State Comunications 122, 49-52 (2002).
- [2] A. Molak, M. Pawełczyk, Ferroelectrics, 367, 179-189 (2008).

# Stendinė sesija S3

Lazerių fizika ir šviesos technologijos Technologiniai taikymai Instrumentai ir matavimai Elektronika ir optoelektronika

### Fazinės erdvės rekonstrukcija ir laikinių sekų prognozė

#### State space reconstruction issues and times series prediction

<u>Feliksas Kuliešius</u>, Andrius Lengvinas, Anželika Pavlova Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius feliksas.kuliesius@ff.vu.lt

Network flows [1] discussed as a complicated physical systems such as multi-filamentation in optical beams, fiber solitons and ocean rogue waves [2], financial markets [3] or social behaviour [4], are commonly subjected to chaotic regularities. Chaotic behaviour refers to a behaviour which, being irregular is generated by an underlying deterministic process and, therefore, is potentially controllable.

Usually, due to the experimental limitations only one dimensional data is available for chaotic physical systems which have higher dimensionality. Very often such phenomena can't be described analytically or even solved numerically. In such a case the only possibility of statistical analysis of experimental data – time series, remains. The powerful tool for time series prediction is state space reconstruction from one dimension experimental series. Suppose the observed scalar time series is x(1), x(2), ..., x(N). According to Taken's theorem, an embedding of the chaotic attractor can be obtained by constructing the delay vectors  $X(n) = [x(n), x(n-\tau), ..., x(n-(m-1)\tau]^T$ ,

where  $n = (m - 1)\tau + 1$ ,  $(m - 1)\tau + 2$ , ..., N, and *m* is an embedding dimension and  $\tau$  is a time delay.

Deterministic predictions are based on continuous mapping between the current state and the future state, meaning that if the state at time t is similar to the current state X(n), then the state at time t + 1 will also be close to the future state X(n + 1).

The local linear prediction model suggests that the prediction is a linear superposition of the m elements of a delay vector, that is

$$X_{pr}(n+1) = a_0 + \sum_{i=1}^m a_i x(n-(i-1)\tau) = \vec{A}Y(n),$$

where  $\vec{A} = [a_0, a_1, ..., a_m]$ ,  $Y(n) = [1, X(n)^T]^T$ .  $\vec{A}$  can be obtained from  $\vec{AB} = \vec{D}$ , where  $\vec{B}$  is a matrix, *i* th column of which is composed of  $Y(n_i)$ , i.e.  $Y(n_i) = [1, x(n_i), x(n_i - \tau), ..., x(n_i - (m - 1)\tau]^T$ ,  $\vec{D} = [x(n_1 + 1), x(n_2 + 1), ..., x(n_k + 1)]$ . Then the coefficient vector  $\vec{A}$  can be found from  $\vec{A} = \vec{DB}^{-1}$ .

The main problem related to the state space reconstruction is the uncertainty of parameters, namely time delay  $\tau$  and reconstruction dimension *m*, necessary for it. The different techniques used to determine before mentioned parameters were analysed in the present work. Delay is obtained using the autocorrelation, mutual information and time window while embedding dimension is found via false nearest neighbors. Additionally, the new approach for evaluation the delay

 $\tau$  based on dimension variance analysis has been introduced.

Widely used way of assessing  $\tau$  by means of autocorrelation  $R_{\tau} = \frac{\sum_{j=\tau+1}^{n} (x_j - \overline{x})(x_{j-\tau} - \overline{x})}{\sum_{j=1}^{n} (x_j - \overline{x})^2}$  may result in bad value of  $\tau$  for nonlinear systems. The delay, obtained by matching the first minimum of mutual information  $I(x_t, x_{t+\tau}) = \sum_{t, t+\tau} P(x_t, x_{t+\tau}) \ln \frac{P(x_t, x_{t+\tau})}{P(x_t)P(x_{t+\tau})}$  is more prospective since it encounters higher correlation terms. Some authors suggest attitude named Time window, where  $\tau$  is defined as  $\tau = t_w/m$ , where  $t_w$  is time between time series peaks, interpreted as the mean time between two consecutive visits to a local neighborhood on the attractor. Examining the pointwise dimension  $M_p(i,\tau) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{\log_N^1 \sum_{j=1}^N \theta(\epsilon - r_{i,j})}{\log(\epsilon)}$ [5] it is possible to conclude that the condition of the best attractor reconstruction in the state space can be defined as a minimum point of  $M_{\rm p}(i, \tau)$  variance:  $f(\tau) =$  $\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} (M_p(i,\tau) - \overline{M}_p)^2$ . Above,  $\theta$  is the Heaviside function,  $r_{i,j}$  – Euclidean distance between state space points, and  $\epsilon$  – an arbitrarily small radius related to the point. Different approaches were evaluated by the possibility to reconstruct attractor adequate to original one ant to predict original time series. In this work, well known chaotic systems - Mackey-Glass, Lorenz, Rössler have been analyzed. For Mackey-Glass sequences the best results were found by Time windows approach – up to 2000 future point forecast succeeded with  $\tau = 17$ . Other series exposed better when mutual information was used. It is rational to suppose, that the results reflect the model structure - Mackey-Glass system possesses a well-defined time-delay parameter, while other - are described by a sets of three nonlinear coupled differential equations without any explicit time delay. The dimension variance technique is suitable for all cases; it is more stable and yields acceptable results for all process under investigation, though not optimal (e.g., 600 point prediction for Mackey-Glass). Keywords: chaos, state space reconstruction, time

series prediction References

[1] W, Zhang, Z. Wu, and G.Yang, Comp. Phys.Commun., 161, 129, (2004)

[2] S. Birkholz, C. Bree, A. Demircan, and G. Steinmeyer, Phys. Rev. Lett., **114**, 213901 (2015)

[3] E.W. Saad, D.V. Prokhorov, D.C. Wunsch, IEEE Trans. Neural Netw., 9, 1456 (1998)

[4] F. Shafee, xxx.lanl.gov, arXiv:cond-mat/0401191, p. 1-15, 2004

[5] E. Ott, Chaos in dynamical Systems, (Cambridge, 2002)

# Pirolitinio grafito bandinio geometrinių parametrų įtaka diamagnetinės levitacijos aukščiui

# Influence of geometrical parameters of pyrolytic graphite specimen on the height of diamagnetic levitation

Virgilijus Minialga, Robertas Samavičius

Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Fizikos katedra, Studentų g. 50-243,

LT-51368 Kaunas

<u>virgilijus.minialga@ktu.l</u>t

Viena iš anglies sintetinių kristalinių būsenų atmainų yra pirolitinis grafitas. Tai medžiaga su stipriai anizotropinėmis savybėmis. Dėl to jo elektrinės, magnetinės, šiluminės, mechaninio atsparumo savybės yra skirtingos kryptimis išilgai plokštumų ir statmenai plokštumoms.

Anizotropinis pobūdis ryškiai matomas pirolitinio grafito magnetinėse savybėse. Diamagnetinė juta statmenai plokštumoms yra žymiai stipresnė nei išilgai plokštumų. Šis dydis yra didžiausias tarp žinomų kambario temperatūroje kitų medžiagų.

Dėl to galima stabili magnetinė levitacija panaudojama kol kas nedidelių detalių mechaninės padėties valdymui, mechaniškai jautrių įrenginių konstravimui. Reiškinys buvo pritaikytas atominės jėgos mikroskopo veikiančių jėgų kalibravimui [1].

Esant magnetinio lauko indukcijos vertikalia kryptimi "duobėms", jėgos, veikiančios magnetinę medžiagą jose, priklauso nuo diamagnetinės medžiagos magnetinės jutos  $\chi$ , magnetinės indukcijos dydžio *B* ir nuo jos kitimo erdvėje spartos  $\nabla B$  [2]:

$$F_{\text{mag}} = \frac{v_{\chi}}{\mu_0} (B \cdot \nabla) B, \qquad (1)$$

Čia  $\mu_0$  yra magnetinė konstanta, V – bandinio tūris.

Vienas iš jėgos reguliavimo būdų yra bandinio geometrinės formos keitimas. Šio parametro įtaka priklauso ir nuo sudaryto magnetinio lauko pasiskirstymo formos. Mūsu bandymuose buvo naudojamas iš keturių magnetų sudarytas kvadrupolio magnetinis laukas. Jis galėtų būti kuriamas ir žiedo formos magnetu, kai skirtingais poliais imagnetinami priešingi žiedo galiniai paviršiai, ir žiedas ant horizontalaus paviršiaus paguldomas vienu galu nesvarbu, kokiu poliumi, į viršų.

Matavimo metu buvo daromos levituojančio bandinio virš magnetų sistemos nuotraukos ir programa "ImageJ" įvertinamas bandinio aukštis virš magnetų sistemos.

Buvo matuojamas skirtingo storio bei formos pirolitinio grafito bandinių levitacijos aukštis. Skirtingų bandinių levitacijos aukščių z, virš kubinių magnetų keturpolio, grafikas pateiktas 1 pav. Iš šių duomenų matome, kad levitacijos aukštis z priklauso nuo bandinio storio h. Plonesni bandiniai palaikomi žymiai aukščiau nei storesni.



1 pav. Įvairių storių ir formų bandinių levitacijos aukščių matavimų rezultatai

Vienos stačiakampės plokštelės levitacijos aukščio *z* pokyčiai nuo plokštelės storio *h* pateikti 2 pav.



2 pav. Pirolitinio grafito bandinio pakilimo aukščio z priklausomybė nuo bandinio storio h

Matyti, kad bandinio pakilimo aukštis mažėja didėjant bandinio storiui esant tokiems pat kitiems bandinio matmenims.

Reikšminiai žodžiai: pirolitinis grafitas, diamagnetinė levitacija, levitacijos aukštis.

- Q. Li, S. Kim, *Review of Scientific Instruments*. Division of Engineering, Brown University, Providence, Rhode Island, 77 (2006)
- [2] A-L. Gasner, The Royal Society of Chemistry, 9, 2356 2363 (2009).

# Samario oksidu modifikuotų cerio oksido nanomiltelių, gautų išdeginimo sintezės metu, fizikinių savybių tyrimai

# Synthesis and properties of samaria-doped ceria nanopowders prepared by glycine nitrate combustion method

<u>Algita Stankevičiūtė<sup>1</sup></u>, Fariza Kalyk<sup>1</sup>, Gintarė Budrytė<sup>1</sup>, Brigita Abakevičienė<sup>1</sup> <sup>1</sup>Department of Physics, Kaunas University of Technology, Studentu str. 50, LT-51368 Kaunas, Lithuania <u>algita.stankeviciute@ktu.edu</u>

Miniaturized solid oxide fuel cells (µ-SOFCs), constructed using thin film methods can achieve high specific energy and energy density and may partially replace Li batteries in portable devices [1,2,3]. However, the initial materials used in the fabrication of µ-SOFC process should fully satisfy the requirements. Recently, the thickness of the µ-SOFC three-layered structure (anode-electrolyte-cathode) has been reduced to one micron size. Thus, the thickness of electrolyte thin film in  $\mu$ -SOFC becomes much thinner, e.g. ~ 600 nm, compared to conventional SOFC. The reduced thickness can minimize the ionic transport path and significantly reduce ohmic resistance [4]. The properties of  $\mu$ -SOFC electrolyte thin films strongly depend on the initial materials and their characteristics, therefore the choice of synthesis method, processing stages and conditions are particularly important. Samaria-doped ceria (SDC) has widely used in various solid oxide fuel cells (SOFCs) as electrolyte, fossil fuel technology, for gas sensing devices and in automobile exhaust systems.

In this work, samaria-doped ceria  $(Ce_{0.8}Sm_{0.2}O_{1.9})$ powders were prepared by a glycine nitrate combustion method, and developed for intermediate-temperature solid oxide fuel cells (IT-SOFCs). Despite the large variety of methods to synthesize SDC powders, including Pechini, sol-gel, co-precipitation techniques, polyol method, glycine combustion method attracts a lot of attention due to low cost and simplicity of the technique in comparison of other fuels.

The thermal decomposition of the synthesized powders was investigated by the thermogravimetric (TG) and differential thermal (DTA) analysis. The microstructural and morphological properties of nano-sized samaria-doped ceria were studied by X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM) techniques, and Brunauer-Emmet-Teller (BET) surface analysis. The thermal analysis together with XRD results demonstrate the effectiveness of the glycine combustion process for the synthesis of pure phase nanocrystalline powders. The AC conductivity of sintered pellets (pellets were sintered at 1200°C for 2h) was observed by two-probe impedance spectroscopy in the temperature range of 200-800 °C, and from 1 Hz to 3 MHz frequencies. Plasma sputtering technique with platinum target was used onto either side of the sintered, cut and polished SDC pellets to serve as an electrode.

XRD analysis data of synthesized powders clearly indicates the formation of a single-phase SDC with cubic crystal structure. Thus for the preparation of SDC ceramic powders the suggested glycine nitrate combustion synthesis method is suitable. As a result, SDC powders possess ionic conductivity in which conductivity plots show correspondence of grain interior, grain boundary and polarization of platinum electrode in sequence of decreasing frequency. At higher temperature, two semicircles which correspond to grain boundary and grain interior disappear causing that only processes due to electrode may appear.



Fig. 1. SEM micrograph of SDC nanopowders

*Keywords: solid oxide fuel cells, samaria-doped ceria, combustion.* 

- [1] A. Evans et al., Journal Power Sources. 194, 119-129 (2009).
- [2] K.J. Kim et al., Sci. Rep. 6, 22443 (2016).
- [3] J.L.M. Rupp et al., Solid State Ionics 177, 2513-2518 (2006).
- [4] J. Bae et al., Surace Coatings Technologies 27, 54-59 (2015),

# Dažninės skyros fosforų termometrija aukšto sužadinimo tankio sąlygomis

# Frequency Resolved Phosphor Thermometry under High Excitation Density Conditions

Justina Aglinskaitė, Akvilė Zabiliūtė-Karaliūnė, Pranciškus Vitta Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

justinaaglin@gmail.com

Lazeriniais diodais (LD) paremtos kietakūnio apšvietimo technologijos, manoma, ateityje pakeis šviestuku pagrindu pagamintus šviestuvus didelės galios Dideliu taikvmuose. kryptingumu ir skaisčiu pasižymintys šviestuvai reikalingi specifinėse kvazitaškinių šaltinių taikymo srityse: projektoriuose, kryptinguose žibintuose automobilių bei lauko šviestuvuose [1]. Pagrindinis iššūkis, su kuriuo susiduria tokių šviestuvų gamintojai, yra jame palaikyti pastovias šviestuvo charakteristikas esant aukštoms temperatūroms. Dažniausiai baltos šviesos šaltiniai iš LD gaminami dalį jo trumpabangės spinduliuotės konvertuojant i ilgabange fotoliuminescuojančiomis (FL) medžiagomis - fosforais. Fosforų temperatūra auga dėl šilumos nuostoliu, atsirandančių vykstant nespindulinei sužadintų elektronų relaksacijai ir Stokso poslinkio. Didesnė temperatūra gali lemti fosforų degradavimą bei šviestuvo spalvinių savybių pokyčius. Norint turėti stabilų didelio galios tankio baltos šviesos šaltinį būtina, kad fosforai būtų gerai aušinami ir stabilūs esant aukštiems sužadinimo tankiams [2].

Šiame darbe buvo tirtos komercinių fosforų miltelių bandiniu silikone (Dow Corning) ir aukštatemperatūriame silikoniniame sandariklyje (VersaChem) temperatūrų priklausomybės nuo žadinančios galios tankio. Tyrimui naudoti žalias ir sulfoselenidiniai PhosphorTech geltonas fosforai legiruoti Eu<sup>2+</sup> jonais. Temperatūros nustatytos dažninės skyros metodu, matuojant FL gesimo trukmes. Fosforų bandinių kalibracijos metu šildant kriostate matuotos jų FL gesimo trukmių ir intensyvumų verčių priklausomybės nuo aplinkos temperatūros. Vėliau fosforai buvo apšviesti lazerinio diodo spinduliuote ir matuotos FL gesimo trukmių bei intensyvumų priklausomybės nuo žadinančio galios tankio. Galios tankis buvo keičiamas mechaniškai keičiant gradientinio padėti. Pagal bandymo metu išmatuotas filtro gesimo komerciniu fosforu fotoliuminescencijos trukmes bei remiantis kalibracijos duomenimis buvo nustatytos jų temperatūros silikone ir silikoniniame sandariklyje temperatūros buvo nustatytos.

l pav. pavaizduotos trijų tyrime išmatuotų bandinių temperatūrų priklausomybės nuo FL žadinimo galios tankio bei modeliuojant gautos silikono temperatūros priklausomybės nuo žadinimo galios tankio. Esant tam pačiam žadinimo galios tankiui aukščiausia temperatūra pasiekta paprasto silikono bandinyje. Parinkus didesnio galios tankio žadinimą eksperimento metu temperatūros kilimas sulėtėjo dėl padidėjusio bandinio aušinimo, į kurį nebuvo atsižvelgta modeliuojant eksperimentą.



1 pav. Eksperimento metu išmatuotų bandinių temperatūrų priklausomybių palyginimas su modeliavimo metu gauta silikono temperatūros priklausomybe nuo žadinančios galios tankio.

Eksperimento metu nustatyta, kad remiantis dažninės skyros metodu gautomis FL gesimo trukmėmis galima identifikuoti bandinių temperatūros priklausomybę nuo žadinančios galios tankio tiems bandiniams, kurie tiriamame temperatūrų ruože turi stačias priklausomybes tarp FL gesimo trukmių ir temperatūros. eksperimento modeliavimas parodė, jog Atliktas dažninės skyros metodu nustatytos bandinių temperatūros kokybiškai sutampa su modeliavimo rezultatais. Nustatyta, kad fosforas silikono matricoje, turi ne tokias geras šilumines savybes, kaip bandiniai silikoniniame sandariklyje.

Reikšminiai žodžiai: fosforai, didelio galios tankio žadinimas, fosforų termometrija

- Basu, C., Meinhardt-Wollweber, M., & Roth, B. (2013). Lighting with laser diodes. Advanced Optical Technologies, 2(4), 313-321.
- [2] Lenef, A., Kelso, J., Tchoul, M., Mehl, O., Sorg, J., & Zheng, Y. (2014, September). Laser-activated remote phosphor conversion with ceramic phosphors. In Proc. of SPIE (Vol. 9190, p. 91900C).

# Laikinio čirpo ir grupinio greičio įtaka elektrono greitinimui radialinės poliarizacijos Beselio-X impulsiniame pluošte

# Influence of chirp and group velocity on direct-field electron acceleration in a radially polarized pulsed Bessel-X beam

<u>Gytis Braždžiūnas<sup>1,2</sup></u>, Sergej Orlov<sup>2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius <u>gytis.brazdziunas@gmail.com</u>

Sparčiai auga susidomėjimas lazeriu greitinamų elektringųjų dalelių taikymais. Visgi impulsinio lazerio galia reikalinga elektroną pagreitinti iki MeV kinetinės energijos eilės radialinės poliarizacijos pluošte siekia šimtų teravatų eilę [1].

Elektronui greitėjant optine ašimi, dėl Doplerio reiškinio, elektroną pasiekiančios lazerio spinduliuotės svyravimų dažnis mažėja. Siekiant kompensuoti šį reiškinį pravartu įvesti laikinį impulsų čirpą, kuomet impulso svyravimų dažnis kinta laike. Antras valdomas impulsinių pluoštų parametras yra grupinis greitis. Šiame darbe papildomai nagrinėjama ir jo įtaka elektrono kinetinei energijai. Grupinis greitis įprastuose pluoštuose būna subliminalus, tačiau su taip vadinamais nedifraguojančiais Beselio-X impulsais jis gali būti tiek subliminalus, tiek superluminarus [2].

Šiame pranešime mes pristatome elektrono elektronui judant dinamikos analizę radialinės poliarizacijos Beselio-X impulsiniame pluošte. Skaitmeniškai suintegruota reliatyvistinė Lorenco lygtis. Apskaičiuota elektrono kinetinė energija W laiko momentu t = 10 ps po sąveikos su lazerio impulsu. Šis parametras buvo ištirtas dvejose fazinėse erdvėse: 1) pluošto sąsmaukos pločio  $\rho_0$ , pradinės impulso fazės  $\psi_0$ ir laikinio čirpo parametro b; 2) bei pluošto sąsmaukos pločio  $\rho_0$ , grupinį impulso greičio  $v_g$  ir laikinio čirpo parametro b. Parametras b parodo kiek (rad/s) pasikeičia impulso svyravimų dažnis per impulso trukmę T.

Elektrono kinetinės energijos priklausomybė  $\rho_0$ - $\psi_0$ -b fazinėje erdvėje ties P = 1 PW pavaizduota 1 pav. Grupinis greitis čia lygus  $v_g = c$ . Vietoje pradinės fazės keičiant grupinį greitį (2 pav.) pradinė faze yra fiksuojama ties  $\psi_0 = \pi$ . 3 pav. pateikta kinetinės energijos  $W(\rho_0, \psi_0, b)$  priklausomybė, kai lazerio galia lygi P = 1 GW.







2 pav. Elektrono kinetinės energijos Wpriklausomybė nuo sąsmaukos pločio  $\rho_0$ , impulso grupinio greičio  $v_g$  ir laikinio čirpo parametro b, kai lazerio galia P = 1 PW.



3 pav. Elektrono kinetinės energijos Wpriklausomybė nuo sąsmaukos pločio  $\rho_0$ , pradinės impulso fazės  $\psi_0$  ir laikinio čirpo parametro b, kai lazerio galia P = 1 GW.

Pastebėjome, jog net ir esant P = 1 GW lazerio galiai galima pasiekti MeV eilės elektrono kinetinę energiją tinkamai parinkus laikinį impulso čirpą. Aiškios kinetinės energijos priklausomybės nuo grupinio impulso greičio kol kas nenustatėme.

Reikšminiai žodžiai: radialinė poliarizacija, čirpas, grupinis greitis, lazeris, elektrono dinamika.

- P. Fortin, M. Piche, C. Varin, "Direct-field electron acceleration with ultrafast radially polarized laser beams: scaling laws and optimization," J. Phys. B 43 (2009).
- [2] P. Saari, and H. Sonajalg, "Pulsed Bessel beams," Laser Phys. 7, 32-39 (1997).

### Kietakūnių gatvių šviestuvų optikos tyrimas ir optimizavimas

# Investigation and Optimization of The Solid-state Luminiare Optics for Street Lighting

Vladislovas Čižas, Pranciškus Vitta

Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius vladislovas.cizas@gmail.com

Šiuolaikiniame pasaulyje vis daugiau ir daugiau pradedama galvoti apie energijos taupymą bei gamtos saugojimą. Gatvių apšvietimui visame pasaulyje naudojami be galo dideli energijos kiekiai. Viena to priežastis - technologiškai pasenusių ir neefektyvių senos kartos šviestuvų naudojimas. Paskutinį dešimtmetį matoma akivaizdi tendencija - gatvių apšvietime naudoti kietakūnius šviesos šaltinius, kurie yra daug efektyvesni. Atnaujinant gatvių apšvietimo šaltinius, dažnai kyla klausimas, kokius šviestuvus pasirinkti. Deja, tenka pripažinti, kad beveik visada senesnės gatvių apšvietimo instaliacijos neatitinka nustatytų reikalavimų. Dėl to norima žinoti ar bent teoriškai įmanoma su jau turima infrastruktūra atitikti gatvių apšvietimo standartą. Jau sukurtos gatvių apšvietimo projektavimo programos veikia tik su jau egzistuojančiais šviestuvais, yra labai griozdiškos ir nepatogios. Tad pagrindinis šio darbo tikslas: sukurti skaitmenini metoda, leidžianti identifikuoti projektuojamo apšvietimo ribinius parametrus ir teorines galimybes atitikti konkrečią gatvės apšvietimo klasę esamoje situacijoje, bei atlikti Lietuvos tipiniu gatviu ribiniu parametru identifikacija.

Tyrimo metu buvo pasirinktas vienas iš naujesnių, "banginio uodegos" formos erdvinis šviesos skirstinys su prielaida, kad pasirinktas modelis, yra geriausiai tinkantis gatvių apšvietimo šviestuvams [1]. Darbo metu buvo išsiaiškinta, kad egzistuojančios komercinės modeliavimo programos visiškai netinkamos nustatytiems tikslams pasiekti, todėl buvo sukurta savo gatvių apšvietimo modeliavimo ir optimizavimo programą.



1 pav. Tipinis "banginio uodegos" erdvinis šviesos skirstinys.

Naudojantis parašytąja programa buvo atliktas pasirinkto matematinio modelio optimizavimas. Visi skaičiavimai buvo atliekami atsižvelgiant į atnaujinto EN13201:2015 gatvių apšvietimo standarto normuojamus fotometrinius dydžius ir matavimo metodikas [2]. Optimizavimo metu buvo nuspręsta orientuotis į naujo gatvių apšvietimo projektavimo poreikius, tad buvo ieškomas maksimalus įmanomas atstumas tarp stulpų. Papildomai buvo atlikta efektyvumo esant didžiausiam atstumui tarp stulpų analizė. Buvo nuspręsta našumui taikyti metro iš kiloliumeno matavimo dydį. Be to buvo atlikti palyginamieji skaičiavimai su realiai egzistuojančiais produktais.

Optimizavimo metu buvo sumodeliuota virš 10<sup>8</sup> įvairių šviestuvo erdvinių šviesos skirstinių ir gatvių parametrų kombinacijų. Galiausiai, buvo sukurtos ribinių parametrų lentelės tipinėms Lietuvos gatvių parametrams ir apšvietimo poklasėms.

Tyrimo metu buvo parodyta, kad moderniems šviesos šaltiniams pritaikytos optikos yra daug efektyvesnės (net neatsižvelgiant į pačių šaltinių našumus), bet dar nepasiekė teorinių galimybių ribos.



2 pav. Standartizuojamų fotometrinių dydžių matavimo metodikos.

Reikšminiai žodžiai: šviestukai, gatvių apšvietimas, optikos, IES rinkmenos

- Moreno, I. Et al., *Modelling LED Street Lighting*, Applied Optics, 53 4420-4430 2014).
- [2] EN 13201-1:2015 (E), Road lighting, European Committe for Standardization/Technical Committee 169 86 (2014)

# Šviesos gijų indukuota fotoliuminescencija nelegiruotame bei Nd ir Yb jonais legiruotuose YAG kristaluose

# Filamentation-induced photoliuminescence in undoped, Nd-doped and Yb-doped YAG crystals

Domas Kudarauskas, Gintaras Tamošauskas, Mikas Vengris, Audrius Dubietis Vilniaus universitetas, Kvantinės elektronikos katedra, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius audrius.dubietis@ff.vu.lt

Dėl puikių optinių ir mechaninių savybių itrio aliuminio granatas (Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub>, YAG) yra viena svarbiausių ir populiariausių lazerinių matricų, kuri gali būti legiruojama įvairiais trivalenčiais retųjų žemių metalų jonais. Legiruoti YAG kristalai taip pat yra plačiai tiriami kaip potencialiai efektyvūs scintiliatoriai elementariųjų dalelių detekcijai [1-3]. Kita vertus, nelegiruotas YAG kristalas pasižymi dideliu optiniu netiesiškumu bei aukštu optinio pažeidimo slenksčiu, dėl ko yra plačiai naudojamas generuoti koherentinę itin plataus spektro spinduliuotę – superkontinuumą. Formuojant šviesos gijas įvairios trukmės (nuo keleto optinių ciklų iki keleto pikosekundžių) lazerio impulsais superkontinuumo generacija YAG kristale pademonstruota ivairiose optinio spektro srityse [4]. Formuojantis šviesos gijoms, dėl daugiafotonės sugerties kuriama laisvųjų elektronų plazma, kuri savo ruožtu toliau sugeria žadinančią spinduliuotę ir sužadina tiek paties kristalo surištąsias krūvininkų būsenas, tiek priemaišinius lygmenis ir juostas, kurių spindulinė relaksacija stebima fotoliuminescencijos pavidalu.

Šviesos gijos buvo formuojamos fokusuojant 100 fs trukmės, 800 nm bangos ilgio Ti:safyro lazerio spinduliuote i 3 skirtingus: nelegiruota ir Nd<sup>3+</sup> bei Yb<sup>3+</sup> Kartu legiruotus YAG kristalus. jonais su superkontinuumo spektrais, kurie visu triju tirtu medžiagų atvejais apėmė spektrinę sritį nuo 450 nm iki 1.1 µm ir iš esmės buvo identiški, užregistruoti kokybiškai skirtingi medžiagų fotoliuminescencijos spektrai. Nelegiruoto YAG kristalo fotoliuminescencijos spektras (1a pav.) yra sudarytas iš dviejų plačių spektrinių juostų: intensyvios ultravioletinės juostos, kurios maksimumas ties 300 nm atsiranda dėl eksitonų ir pakeistinių atomų defektų YAG gardelėje, ir mažo intensyvumo juostos infraraudonojoje srityje su maksimumu ties 700 nm, greičiausiai sąlygojamos priemaišinių geležies jonų. Nd<sup>3+</sup> jonais legiruoto YAG kristalo fotoliuminescencijos spektras (1b pav.) yra sudarytas iš daugybės siaurų smailių regimojoje ir infraraudonojoje spektro srityse, kurios atitinka optinius šuolius tarp įvairių Nd<sup>3+</sup> jono 4f pasluoksnio lygmenų ir eilės mažesnio intensyvumo smailių ultravioletinėje spektro srityje, atitinkančių šuolius į pagrindinį pasluoksnio lygmenį. Yb<sup>3+</sup> jonai unikalūs tuo, kad turi tik kelis energinius lygmenis, spinduliuojančius 1 µm aplinkoje (1c pav.). Tačiau Yb<sup>3+</sup> jonais legiruoto YAG kristalo fotoliuminescencijos spektre taip pat užregistruota labai plati liuminescencijos juosta su maksimumais ultravioletinėje (ties 320 nm) ir regimojoje

(ties 500 nm) spektro srityse, kurios atsiradimą lemia elektrono pernaša iš gardelės į priemaišinį joną.



1 pav. Šviesos gijomis indukuotos fotoliuminescencijos spektrai nelegiruotame (a), Nd<sup>3+</sup> jonais (b) ir Yb<sup>3+</sup> jonais (c) legiruotuose YAG kristaluose

Šiame darbe atskleidėme, kad šviesos gijomis indukuoti fotoliuminescencijos spektrai nelegiruotame bei Nd<sup>3+</sup> ir Yb<sup>3+</sup> jonais legiruotuose YAG kristaluose yra iš esmės identiški šių kristalų katodoliuminescencijos ir radijoliuminescencijos spektrams, gautiems žadinant  $\alpha$ dalelėmis, elektronais ar sinchrotronine spinduliuote [1-3]. Šis rezultatas parodo, kad šviesos gijų indukuota fotoliuminescencija gali būti lengvai pritaikyta įvairių medžiagų liuminescentinių savybių tyrimams, o pritaikius laiko skyros spektroskopiją, kartu tirti ir energijos pernašos reiškinius tarp energijos lygmenų ir juostų.

*Reikšminiai žodžiai: fotoliuminescencija, šviesos gijos, YAG.* 

- P. Antonini, G. Bressi, G. Carugno, D. Iannuzzi, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A 460, 469 (2001).
- [2] T. Yanagida, K. Kamada, Y. Fujimoto, Y. Yokota, A. Yoshikawa, H. Yagi, T. Yanagitani, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A 631, 54 (2011).
- [3] A. F. Borghesani, C. Braggio, G. Carugno, F. Chiossi, M. Guarise, J. Lumin. 190, 29 (2017).
- [4] A. Dubietis, G. Tamošauskas, R. Šuminas, V. Jukna, A. Couairon, arXiv:1706.04356 (2017).

# Kelių oktavų šviesos superkontinuumo generavimas žadinant skaidrius dielektrikus nulinės ir anomalios grupinių greičių dispersijos srityse

# Multioctave supercontinuum generation in transparent dielectric media pumped in the range of zero and anomalous group velocity dispersion

<u>Nail Garejev</u>, Gintaras Tamošauskas, Audrius Dubietis Vilniaus universitetas, Kvantinės elektronikos katedra, Saulėtekio al. 10, 10223 Vilnius nail.garejev@ff.vu.lt

Šviesos superkontinuumo generavimas skaidriuose dielektrikuose, kai spektras plinta tūkstančius kartų yra visuotinai naudojamas pakeisti lazerių spinduliuotės bangos ilgį arba išplėsti spektrą išlaikant šviesos koherentines savybes [1]. Daugumos skaidrių dielektrikų grupinių greičių dispersijos (GGD) ženklas keičiasi artimoje infraraudonoje srityje. Šioje, anomalios GGD, srityje, formuojantis šviesos gijoms, formuojasi kvazistacionarūs šviesos dariniai, erdvėje ir laike suspausti impulsai – šviesos kulkos [2, 3]. Tuo pačiu vyksta itin plataus spektro formavimasis apimantis apie 4 oktavas [4].

Šiame darbe ištyrėme superkontinuumo generavimą lydyto kvarco (angl. FS), itrio aliuminio granato (angl. YAG), ir ličio fluorido (LiF) kristaluose, žadinant femtosekundiniais infraraudonais impulsais. Žadinimo bangos ilgiai parinkti taip, kad būtų artimi šių medžiagų nulinės GGD sritims (1,3  $\mu$ m) bei anomaliosios GGD srities (2,3  $\mu$ m). Superkontinuumo spektrai išmatuoti penkių eilių dinaminio diapazono skyra parodyti (1 pav.).

Gauti rezultatai rodo, kad spektro plitimo kraštas trumpesnių bangos ilgių srityje yra panašus ir mažai priklauso nuo kaupinimo bangos ilgio. Žadinant arti nulinės GGD srities spektrai esmingai plinta tik į trumpesnių bangos ilgių pusę. Gaunamas spektro plotis artimas dvejoms oktavoms. Žadinant anomalios GGD srityje spektras efektyviai plinta trumpesnių dažnių srityje pasiekdamas beveik identiškus ribinius bangos ilgius bei efektyviai plinta ilgesnių bangos ilgių srityje. Tokio, gan simetriško, plitimo rezultate superkontinuumo spektras apima beveik 4 oktavas. Nustatyta, kad egzistuoja optimali žadinančiojo impulso energija, kai pasiekiamas didžiausias spektro išplitimas.

Nors visos trys tirtos medžiagos turi gan skirtingus lūžio rodiklius bei netiesinį optinį jautrį, generuojant superkontinuumą anomaliosios GGD srityje yra gaunama panaši spektro plitimo dinamika. Ji apspręsta ne tiek medžiagų savybių, kiek vykstančių procesų panašumo. Spektrų, gautų tolygiai didinant žadinančio impulso energiją, analizė parodė dvi skirtingas spektro plitimo priežastis. Kol žadinančio impulso smailinė galia neviršija kritinės susifokusavimo galios spektras transformuojasi daugiausiai dėl impulso formos kitimo vykstant daugiafotonei sugerčiai bei dėl sužadintos plazmos sugerties. Esant žadinimo galioms didesnėms už fokusavimosi kritinę galią, anomalios GGD srityje, dėl fazinės savimoduliacijos plintant spektrui impulsas spaudžiasi laike. Dėl to formuojasi statūs impulso gaubtinės lūžio frontai sukeliantys katastrofišką spektro plitimą. Tyrimo rezultatai rodo, kad žadinant superkontinuumą anomalios GGD srityje femtosekundiniais šviesos impulsais spektro plitimas mažai priklauso nuo medžiagos netiesiškumo, tačiau nuo jo priklauso kritinė fokusavimosi galia kurią būtina viršyti norint sukurti šviesos gijas ir generuoti itin plataus spektro superkontinuumą.



pav. Superkontinuumo spektrai: (a) lydytame kvarce,
 (b) itrio aliuminio granate (YAG), (c) LiF. Žadinant
 1,3 μm – arti nulinės GGD (brūkšniuotos linijos) ir

2,3 µm – anomaliosios GGD srityje (ištisinės linijos).

Reikšminiai žodžiai: superkontinumas, šviesos gijos, grupinių greičių dispersija

- A. Dubietis, G. Tamošauskas, R. Šuminas, V. Jukna, and A. Couairon, arXiv:1706.04356v1 [physics.optics] (2017).
- [2] J. Darginavičius, D. Majus, V. Jukna, N. Garejev, G. Valiulis, A. Couairon, and A. Dubietis, Opt. Express 21, 25210 (2013).
- [3] M. Durand, A. Jarnac, A. Houard, Y. Liu, S. Grabielle, N. Forget, A. Durécu, A. Couairon, and A. Mysyrowicz, Phys. Rev. Lett. 110, 115003 (2013).
- [4] F. Silva, D. R. Austin, A. Thai, M. Baudisch, M. Hemmer, D. Faccio, A. Couairon, and J. Biegert, Nat. Commun. 3, 807 (2012).

## Kosminių nuolaužų orbitos koregavimas pasitelkus optinę adatą

# Cosmic debris orbit correction using optical needle

Pavel Gotovski<sup>1,2</sup>, Sergej Orlov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius <sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius pavel.gotovski@ff.stud.vu.lt

Kosminių skrydžių aktyvumas per pastaruosius 50 metų sąlygojo milžinišką kosminių šiukšlių kiekį žemutinėje žemės orbitoje. Jų matmenys siekia nuo kelių milimetrų iki kelių metrų [1]. Objektų erdvinis tankis skirtinguose aukščiuose (1 pav.).



Didėjant kosminių objektų tarpusavio susidūrimo tikimybei gali pasireikšti Keslerio efektas (angl. Kessler syndrome), kurio metu žemės orbitoje gali susidaryti šiukšlių juosta [2].

Kaip vienas iš efektyviausių nuolauža-nuolauža susidūrimo prevencijos veiksmų buvo pasiūlytas lazerinis kosminių objektų orbitų nukreipimas pasitelkus vien tik šviesos slėgio reiškinį [3].

Pasitelkus esamus kilovatų eilės galios lazerius ir kosminiam objektui suteikus papildomą judesio kiekį (kelis g·cm/s) įmanoma sėkmingai išvengti nuolaužų susidūrimo.

Kiekvieno realaus lazerio spinduliuotė neišvengiamai susiduria su difrakcijos reiškiniu, kuris stiprėja tolstant nuo šaltinio.

Pasitelkus kompiuteriu sugeneruotą hologramą sudaroma nedifraguojanti optinė adata, kuri pasižymi mažai osciliuojančiu, beveik pastoviu ašiniu intensyvumu [4].

Optinės adatos elektrinio lauko intensyvumo skirstinys ant sklidimo ašies ( $\rho$ =0) ir išilginėje plokštumoje  $\rho$  z (1-2 pav.).



skirstinys ant sklidimo ašies ( $\rho=0$ ).



3 pav. Optinės adatos elektrinio lauko intensyvum skirstinys išilginėje plokštumoje ρ z.

Šiame darbe aptariama optinės adatos panaudojimo galimybė kosminių objektų judėjimo orbitoms pakeisti. Modeliuojamas objekto skrydis elipsine orbita bei tiriamas objekto galutinis sąveikos su lazerio spinduliuote sąlygotas sukimasis aplink savo ašį.

Reikšminiai žodžiai: Kosminės nuolaužos, nedifraguojantis pluoštas, optinė adata, beselio pluoštas.

- [1] H.Klinkrad, Encyclopedia of Aerospace Engineering, 3238-3244 (2010).
- [2] D. J. Kessler, B. G. Cour-Palais, J. Geophys. Res. 83, 2637-2646 (1978).
- [3] J. Mason, J. Stupl, W. Marshall, C. Levit, Adv. Space Res. 48, 1643– 1655 (2011).
- [4] A. Vasara, J. Turunen, A. T. Friberg, J. Opt. Soc. Am. A 6, 1748– 1754 (1989).

# Lanksčių mikroporėtų 3D karkasų formavimas stereolitografijos būdu

# Fabrication of flexible microporous 3D scaffolds via stereolithography

<u>Giedrė Grigalevičiūtė</u><sup>1</sup>, Daiva Baltriukienė<sup>2</sup>, Linas Jonušauskas<sup>1</sup>, Mangirdas Malinauskas<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius <sup>2</sup> Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Biochemijos institutas, Saulėtekio al. 7, LT-10257 Vilnius giedre.grigaleviciute@gmail.com

3D spausdinimo (3DS) technologijos pastaruoju metu sulaukė didelio susidomėjimo mokslo, pramonės ir vartotojų sektoriuose. Kompiuterinio projektavimo (angl. computer aided design - CAD) ir pasluoksninio darinių formavimo dėka šia technologija galima sudėtingos geometrinės architektūros suformuoti darinius. 3DS gali būti panaudojamas ir sparčiai besivystančioje mokslo srityje - audinių inžinerijoje, kurios tikslas - atkurti originalaus audinio funkcijas, pažeistą dalį pakeičiant nauju audiniu. Šią sritį sudaro trys pagrindiniai komponentai: ląstelės, biomolekulės ir karkasai, suformuojantys dirbtinę struktūrą, kuri atkartoja trimatę audinio formą [1]. Audinių inžinerijos tikslams naudojami karkasai turi būti biosuderinami, tinkamo porėtumo, kad galėtų užtikrinti mažo moleukinio svorio molekulių, dujų bei maisto medžiagų pralaiduma [2].

Šiame darbe karkasų formavimui buvo panaudojami staliniai (angl. tabletop) 3D spausdintuvai Formlabs Form1+ ir Autodesk Ember. Naudojant tokius spausdintuvus audinių inžinerijoje, karkasus galima suformuoti greitai, pigiai, paprastai ir be didelių reikalavimų eksperimento sąlygoms. Darbe buvo siekiama ištirti ir palyginti, kokius mažiausių matmenų darinius, kurie atitiktų brėžinį, galima suformuoti minėtaisiais 3D spausdintuvais. Buvo pastebėta, kad spausdintuvu spausdinant Autodesk Ember mikroarchitektūra atkartoja kompiuterinį modelį tų porėtų karkasų, kurių periodas didesnis arba apie 0,6 mm, o Formlabs Form1+ spausdintuvu - didesnis arba apie 1,35 mm (1 pav.). Taip pat buvo tikrinamas lanksčiomis savybėmis pasižyminčios komercinės dervos Formlabs Flexible biosuderinamumas - atspausdinti iš šios medžiagos karkasai buvo užsėjami lastelėmis ir vertinamas jų gyvybingumas. Kadangi dalis ląstelių žūdavo, buvo stengiamasi ieškoti būdų, kuriais karkasų biosuderinamumą būtų galima pagerinti – papildoma UV ekspozicija ir ilgos ryškinimo izopropanolyje bei metanolyje trukmės (20 min. - 72 val.) skirtingose temperatūrose (kambario ir 37-40 °C). Nustatyta, kad panaudotieji būdai pagerino biosuderinamumą apie 50% - didžiausias santykinis ląstelių gyvybingumas buvo tuose karkasuose, kurie mirkyti tirpaluose ilgiausiai ir pakaitinus (2 pav.).

Taigi, staliniai 3D spausdintuvai gali būti naudojami karkasų gamybai audinių inžinerijos tyrimams. Tinkamai parinkus sąlygas, galima padidinti elastomerinių 3DS tinkamų dervų biosuderinamumą.



1 pav. 3D spausdintuvu *Formlabs Form1*+ suformuoti dariniai su skirtingais periodais *d*.

Mėį	ginys	Temperatūra	Trukmė izopropanol.	Trukmė metanol.
	1	kambario	72 h	72 h
	2	37 – 40 °C	1 h	1 h
	3	kambario	1 h	1 h
	4	37 – 40 °C	72 h	72 h
	5	kambario	20 min	0
kontrolė				



2 pav. Skirtingomis sąlygomis ryškintų karkasų biosuderinamumo vertinimas.

Reikšminiai žodžiai: 3D spausdinimas, biosuderinamumas, lankstūs karkasai.

- [1] B. Richter, V. Hahn, S. Bertels, T. K. Claus, M. Wegener, G. Delaittre, C. Barner-Kowollik, M. Bastmeyer, Guiding cell attachment in 3D microscaffolds selectively functionalized with two distinct adhesion proteins, Adv. Mater. 29(5), 1604342 (2016)
- [2] J. W. Lee, 3D nanoprinting technologies for tissue engineering applications, J. Nanomater. **2015**, 1-14 (2015).

# Nano-skulptūrinių anizotropinių dangų pagrindu suformuoti optiniai elementai, skirti didelės galios lazerinės spinduliuotės poliarizacijos valdymui

# Evaporated anisotropic nano-sculptured optical coatings for polarization control in highpower lasers

Lina Grinevičiūtė<sup>1</sup>, Rytis Buzelis<sup>1</sup>, Ramutis Drazdys<sup>1</sup>, Andrius Melninkaitis<sup>2</sup>, Algirdas Selskis<sup>1</sup>, Tomas Tolenis<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius

lina.grineviciute@ftmc.lt

Optiniai elementai, kurie skirti kontroliuoti šviesos poliarizacija, yra vieni iš pagrindinių sudedamųjų dalių lazerinėse sistemose. Poliarizacijos rūšies keitimui ir spinduliuotės intensyvumo valdymui naudojami optiniai elementai - fazinės plokštelės ir poliarizatoriai. Fazinės plokštelės gali būti gaminamos iš natūralia optine anizotropija pasižyminčių kristalų, polimerų, skystųjų kristalų ir kitų anizotropinių sluoksnių. Dauguma šių elementų yra neilgaamžiai, trapūs, jautrūs aplinkos poveikiams ar sudėtingai pagaminami. Taip pat, Briusterio tipo poliarizatoriai salygoja spindulio nuokrypį nuo tiesaus kelio, kas reikalauja pakartotinio sistemos derinimo. Taikant abu šiuos optinius elementus galingose lazerinėse UV sistemose, jie gali tapti ribojančiais veiksniais dėl nepakankamo atsparumo lazerinei spinduliuotei. Tačiau yra galimybė išvengti visų šių minusų - formuojant fazines plokšteles ir poliarizatorius garinimo kampu technologija (angl. Glancing angle deposition). Slystančiu kampu ant pagrindo nusodintos plonos dangos pasižymi kokybiškų optinių elementų formavimui reikalingomis savybėmis. Anizotropiškumas šiose dangose gali būti gaunamas manipuliuojant padėklo padėtimi proceso metu. Elektronu pluoštu išgarinti medžiagos atomai nusėde ant kampu pakreipto pagrindo šešėliuoja sritis į kurias nebegali tiesiogiai nusėsti ar difunduoti kiti atomai dėl per mažos energijos. Taip formuojasi nano-sruktūrinė danga su pasviromis kolonomis, kurių dydis ir forma priklauso nuo garinimo parametrų [1]. Šviesai krentant statmenai tokią dangą, stebimas optinis į anizotropiškumas - atomų šešėliavimo kryptimi S lūžio rodiklis yra mažesnis (danga formuojasi retesnė) nei jai statmena kryptimi P (didesnis lūžio rodiklis).



l pav. Suformuotos 355 nm ilgio bangai  $\lambda/4$  fazinės plokštelės fazės vėlinimo dispersija

Eksperimentiškai nustačius optimalius garinimo parametrus, kurie leidžia formuoti dangas pasižyminčias didžiausiu fazės vėlinimu, buvo užgarinta fazinė plokštelė iš SiO<sub>2</sub> medžiagos. Jos fazės vėlinimo dispersija pateikta 1 pav. Ši  $\lambda/4$  fazinė plokštelė 355 nm bangos ilgiui buvo testuojama lazerinėje sistemoje (355 nm, 5,4 ns, 100 Hz, spindulio diametras 60 µm), remiantis ISO 21254-2 standartu. Nustatyta **24,4 J/cm<sup>2</sup>** pažaidos slenksčio vertė 1-on-1 matavimui, ir šiek tiek mažesnė **21,3 J/cm<sup>2</sup>** vertė 1000-on-1 matavimui.

Kombinuojant nanostruktūrinius ir tankius izotropinius sluoksnius galima formuoti optinį elementą su Brego veidrodžio sritimi. Dėl nevienodų lūžio rodiklių statmenomis kryptimis (P ir S poliarizacijoms) porėtuose anizotropiniuose sluoksniuose, elemente formuojasi dvi veidrodžio zonos, kurios spektre pasislinkusios viena kitos atžvilgiu. Tokiu būdu, sumodeliavus dangą konkrečiam bangos ilgiui, P poliarizacijos šviesa praleidžiama pro elementą, o S poliarizacijos šviesa yra atspindima (žr. 2 Pav.).



2 pav. Sumodeliuotas poliarizatoriaus spektras 355 nm bangai, kai šviesa krenta statmenai į paviršių

Kadangi toks poliarizatorius taip pat formuojamas naudojant tik vieną medžiagą, pvz., tankų ir porėtą SiO<sub>2</sub>, jis pasižymi dideliais lazerinės spinduliuotės slenksčiais, kaip ir fazinė plokštelė.

Reikšminiai žodžiai: fazinės plokštelės, poliarizatoriai, nano-skulptūrinės dangos, garinimas elektronų pluoštu

#### Literatūra:

[1] A. Lakhtakia ir R. Messier, Sculptured thin films: nanoengineered morphology and optics. Bellingham, Wash: SPIE Press, 2005

# Trimačių mezoskalinių darinių formavimas femtosekundine lazerine litografija iš nefotojautrintų polimerų

# Fabrication of 3D meso-scale structures out of non-photosensitized polymers *via* femtosecond laser lithography

Linas Jonušauskas<sup>1,2</sup>, Darius Gailevičius<sup>1,2</sup>, Sima Rekštytė<sup>1</sup>, <u>Mangirdas Malinauskas</u><sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius <sup>2</sup>UAB "Femtika", Saulėtekio al. 15, LT-10224, Vilnius, Lietuva <u>linas@femtika.lt; mangirdas.malinauskas@ff.vu.lt</u>

Tiesioginiu lazeriniu rašymu paremta trimatė lazerinė litografija (3DLL) yra ypač lankstus metodas leidžiantis gaminti laisvos 3D architektūros darinius su subdifrakcine erdvine skyra. Ši technologija yra intensyviai vystoma moksle ir palengva pradedama taikyti pramonėje [1].

Pagrindinės kryptys kuriomis judama tobulinant 3DLL yra formavimo spartos didinimas ir naudojamų medžiagų tobulinimas. Sprendžiant pirmąjį iššūkį vienas naujausių pasiūlytų sprendimų yra linijinių poslinkio stalų sinchronizacija su galvanoskaneriais, taip pasiekiant cm/s rašymo greitį, šimtų cm<sup>3</sup> darbinį tūrį ir dešimčių nm pozicionavimo tikslumą, kas įgalina formuoti mezoskalinius darinius – mm-cm dydžio objektus, kurių vidinė sandara gali būti sudaryta iš šimtų nm dydžio struktūrinių elementų. Tai ypač patrauklu, nes leidžia viename darinyje derinti egzotiškas savybes bei sąveikas pasiekiamas nano- ir makro- skalėse.

Kalbant apie medžiagų tobulinimą, šiuo metu yra aktyviai dirbama su grynų (nefotojautrintų) medžiagų apdirbimu panaudojant 3DLL. Fotoiniciatoriai, kurie yra neatskiriama standartinių litografijoje naudojamų fotorezistų dalis, sudaro sunkumų tiek prieš vykdant tokios medžiagos apdirbimą (reikia spec. laikymo sąlygų, apsaugos priemonių dirbant ir pan.), tiek duoda nepageidautinų savybių galutiniam dariniui (žemesnį optinio pramušimo slenkstį, prastesnį biosutaikomumą ir t.t.). 3DLL atveju, naudojant femtosekundinius lazerinius impulsus ir netiesinę medžiagos-šviesos sąveiką, galima inicijuoti polimerizacijos reakciją ir be fotoiniciatorių [2]. Tai žada kur kas labiau išplėsti 3DLL darinių panaudojimą tokiose srityse, kaip fotonika, mikrooptika ar biomedicina.

Šiame darbe aptariamas įvairių dydžių darinių formavimas 3DLL iš hibridinio organinio-neorganinio fotopolimero SZ2080 [3] be fotoiniciatoriaus. Parodoma, jog be jokių papildomų priemonių taikymo su gryna medžiaga pasiekiama erdvinė skyra gali siekti 200 nm ir mažiau. Demonstruojami funkciniai mikrooptiniai elementai ant šviesolaidžių galų. Aptariamas milimetrinių karkasų ląstelėms su mikrometriniais struktūriniais elementais formavimas. Šie rezultatai parodo, jog vykdant beiniciatorine polimerizacija panaudojant femtosekundinius lazerinius impulsus bei derinant linijinius stalus su galvanoskaneriais galima pagaminti ivairiu dydžiu ir tikslumu darinius kurie gali būti panaudoti daugybėje sparčiai besivystančių mokslo ir pramonės šakų.



1 pav. 3DLL pagaminti dariniai iš nefotojautrinto SZ2080 rodantys mikro- ir nanostruktūrinimo galimybes. (a) – aukštos erdvinės skyros rąstų rietuvės tipo darinys; (b) – invertuotas mikrolęšis ant atramų suformuotas ant šviesolaidžio galo; (c) – karkasas ląstelių auginimui.

Reikšminiai žodžiai: tiesioginis lazerinis rašymas, femtosekundiniai impulsai, nefotojautrinti polimerai.

- M. Malinauskas, A. Žukauskas, S. Hasegawa et al., Ultrafast laser processing of materials: from science to industry, Light Sci. Appl. 5(8), e16133 (2016).
- [2] L. Jonušauskas, D. Gailevičius, L. Mikoliūnaitė et al., Optically Clear and Resilient Free-Form μ-Optics 3D-Printed via Ultrafast Laser Lithography, Materials 10(1), 12 (2017).
- [3] A. Ovsianikov, J. Viertl, B. Chichkov et al., Ultra-low shrinkage hybrid photosensitive material for two-photon polymerization microfabrication, ACS Nano 2(11), 2257–2262 (2008).

# Parabolinės simetrijos skerspjūvio optinių pluoštų linijinio židinio inžinerija

### Engineering of electromagnetic focal lines with parabolic cross-sections

Tomas Kontrimas<sup>1,2</sup>, Sergej Orlov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fotoninių technologijų industrinė laboratorija, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius t.kontrimas@outlook.com

Įvairiose industrijos srityse yra pritaikomi lazerio impulsiniai pluoštai su ilgu linijiniu židiniu ir siauru skersinio intensyvumo pasiskirstymu. Ypatingai yra vertinamas nedifraguojantis Beselio pluošto ašinis intensyvumo skirstinys - "optinė adata" [1], kuris yra plačiausiai panaudojamas struktūrų, kurių dydis palyginamas su krentančios šviesos bangos ilgiu, mikroapdirbime. Pasinaudojant koherentinių Beselio pluoštų superpozicija galima kurti tolimesnes optines adatas, ypač kai norime kontroliuoti išilginį pasiskirstymą. Tačiau kai kuriose pritaikymuose yra poreikis valdyti asimetrinį skersinį pluošto pasiskirstymą.

Nedifraguojančių parabolinių pluoštų pagalba galima keisti skersinio profilio parabolinės formos išlinkimą [2], o pasinaudodami daugelio tokių koherentinių pluoštų superpozicija tampa įmanoma pakeisti ir išilginį pluošto profilį linijiniame židinyje. Tokio tipo pluoštas gali būti vadinamas "optiniu kastuvu".



1 pav. Optinio kastuvo elektrinio lauko pjūvis x-z plokštumoje.

Optinio kastuvo elektrinio (arba magnetinio) lauko poliarizacijos valdymas yra sekantis žingsnis konstruojant parabolinio skerspjūvio linijinį židinį, kuris būtų pritaikomas ten, kur yra svarbi elektromagnetinio lauko orientacija. Tai ypatingai svarbu, kai pluoštas yra fokusuojamas didelės skaitinės apertūros lęšiu - skaliariniai sprendiniai pradeda nebegalioti ir turime įvesti vektorinius sprendinius. Vektoriniai sprendiniai iš skaliarinių yra suskaičiuojami remiantis klasikine technika (žr. (1) formules), aprašyta [3].

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{a}\varphi) \qquad \mathbf{N} = \frac{1}{k} \nabla \times \mathbf{M}, \tag{1}$$

čia a – vienetinis Dekarto vektorius (arba tiesinė jų kombinacija), k – bangos skaičius,  $\varphi$  – skaliarinis parabolinis pluoštas [2]. M yra statmena vienetiniam vektoriui a magnetinė moda, o N - elektrinė moda. Elektromagnetiniai laukai aprašyti M ir N funkcijomis yra tarpusavyje statmeni, todėl juos čia naudojame kaip bazę linijinio židinio inžinerijoje.

Norint valdyti išilginį pluošto pasiskirstymo profilį (1 pav.) ir dalinai kontroliuoti skersinio lauko pasiskirstymą – išlenkimą (2 pav.) buvo panaudota parabolinio cilindro pluoštų monochromatinė superpozicija. Pasirinkus lygtyje (1)  $\mathbf{a} = \hat{\mathbf{z}}$ , elektrinis laukas aprašomas N yra radialinės poliarizacijos.



2 pav. Optinio kastuvo skersinis elektrinio lauko pjūvis ir elektrinių laukų komponentės skersinėje plokštumoje х-у.

Modeliavimo rezultatai parodė, jog galima lanksčiai parinkti išilginį pasiskirstymo profilį ir keisti skersinio pasiskirstymo išlinkimo profilį. 3D pluoštas, turintis parabolinį skerspjūvį, pavaizduotas 3 pav.



3 pav. Optinio kastuvo izopaviršiai ties puse intensyvumo.

Reikšminiai žodžiai: paraboliniai pluoštai, vektoriniai sprendiniai, optinis kastuvas

- [1] M. Zhu, Q. Cao, H. Gao, Creation of a 50,000 λ long needle-like field with 0.36  $\lambda$  width, JOSA A **31**(3), 500–504 (2014).
- Miguel A. Bandres, Julio C. Gutiérrez-Vega, and S. Chávez-Cerda [2] Parabolic nondiffracting optical wavefields, Opt. Lett., 29(1), 44-46. (2004).
- [3] J. Stratton, Electromagnetic Theory, An IEEE Press classic reissue (Wiley, 2007).

# Dviejų pakopų čirpuotų skaidulinio užkrato lazerio impulsų Yb:YAG stiprintuvas skirtas OPCPA kaupinimui

# Two-cascaded Yb: YAG amplifier of chirped fiber laser seed pulses for OPCPA pumping

Paulius Mackonis<sup>1</sup>, Augustinas Petrulėnas<sup>1</sup>, Aleksėj Rodin<sup>1,2</sup> ir Eimantas Zopelis<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Kieto kūno lazerių laboratorija, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

<sup>2</sup>Ekspla UAB, Savanorių pr. 237, 02300 Vilnius

aleksej.rodin@ftmc.lt

Skaiduliniai lazeriai, kuriuose yra taikoma pasyvioji modų sinchronizaciją, yra vertinami dėl geros pluošto kokybės, išvadiniu parametry stabilumo ir kompaktiškumo. Galios ir energijos stiprinimas Nd:YAG [1] ir Yb:YAG [2] čirpuotų impulsų šviesolaidiniuose monokristaliniuose stiprintuvuose (toliau - CPA, angl.: Chirped Pulse Amplifier) išsiskiria kaupinimo pluošto sklidimu ir geresniu šilumos perdavimu. Lyginant Nd:YAG ir Yb:YAG, iterbiu legiruoti kristalai pasižymi daug mažesniu santykiniu šilimu. Pagrindinis šio tyrimo tikslas - sukurti geriausia dvieju pakopu CPA konfigūracija 1 TW klasės OPCPA kaupinimui.

Pirmoje, dvieju praėjimu pro kristalą, CPA pakopoje pav.) buvo ištirtas monokristalinis Yb:YAG (1)šviesolaidis: Ø 1×40 mm bei didesnio skersmens 5×5×20 mm<sup>3</sup> Yb:YAG strypai:  $5 \times 5 \times 5 \text{ mm}^3$ , ir  $2 \times 2 \times 20$  mm<sup>3</sup>. Tyrimuose taikyti 210 ps trukmės, ~ 3.8 nm spektro pločio, 550 mW maksimalios vidutinės išvadinės galios, esant 100 Hz – 500 kHz pasikartojimo dažniams užkrato impulsai. Didžiausia skaidulinio užkrato lazerių impulsų energija, esant 10 kHz pasikartojimo dažniui, siekė 15 µJ. Išilginam, vieno arba dviejų galų, kristalo kaupinimui buvo naudojami didelio skaisčio 50 W, 70 W ir 125 W galios 940 nm bangos ilgio lazeriniai diodai su integruota Ø 105 µm šerdies skaidula. Atlikti tyrimai ir su 969 nm bangos ilgiu, kai lazerinio diodo galia siekė 100 W. Indukuotas šiluminis lešis buvo kompensuojamas sferiniu veidrodžiu (1 pav.).



1 pav. Pirmos Yb:YAG CPA pakopos principinė schema

Antros, dviejų praėjimų, CPA pakopos kaupinimui naudoti skaiduliniu multipleksoriumi apjungti septinių lazerinių diodų impulsai. Jų bendra išvadinė energija siekė ~ 1.5 J ties 940 nm bangos ilgio esant 100 Hz pasikartojimo dažniu. Šioje CPA pakopoje naudotas  $5 \times 5 \times 20$  mm<sup>3</sup> 2 % at. Yb:YAG strypas.

Įlydytų naudojant ploną indžio sluoksnį, mažo iterbio legiravimo laipsnio, YAG monokristalų technologija buvo sėkmingai ištobulinta didelės išvadinės galios ir energijos faziškai moduliuotų impulsų stiprintuvuose. Juose taikomas didelio skaisčio nuolatinis arba impulsinis kaupinimas esant 940 nm arba 969 nm bangos ilgiams. Optimizavus dviejų praėjimų CPA, skaidulinio užkrato lazerio impulsų stiprinimo koeficientas siekė ~ 42 dB. Tokiomis sąlygomis pluošto sklidimo kokybė –  $M^2 \sim 1.1 - 1.15$ . Maksimali išvadinė galia siekė > 47 W, esant 500 kHz pasikartojimo dažniui (2 pav.).



2 pav. Pirmos Yb:YAG CPA pakopos vidutinės išvadinės galios priklausomybė nuo užkrato lazerio galios.

Nepaisant išvadiniu impulsy spektro pločio susiaurėjimo po stiprinimo iki 1.8-2 nm, taikant impulsų spūdą su 1600 mm-1 rėžių tankio difrakcine gardele. industriniam partneriui UAB Ekspla pademonstruotas derinamos impulsų trukmės: nuo kelių ps iki 600 fs hibridinio skaidulinio-kietakūnio lazerio maketas. Naudojant Pokelso narvelio impulsų retintuvą, po pirmos stiprinimo pakopos pademonstruoti ~ 3 mJ išvadinės energijos (3 pav.), 100 Hz - 10 kHz pasikartojimo dažnio impulsai. Antroje CPA pakopoje šie impulsai, taikant impulsini kaupinima, stiprinami iki kelių dešimčių mJ. Naudojant 1842 mm<sup>-1</sup> rėžių tankio difrakcinę gardelę impulsai spaudžiami iki 1 ps.



3 pav. Pirmos Yb:YAG CPA pakopos išvadinės energijos priklausomybė nuo užkrato lazerio energijos.

Ši projektą finansavo Lietuvos mokslo taryba pagal LAT-10/2016 sutartį.

Reikšminiai žodžiai: Yb:YAG lazeris, OPCPA, impulsų stiprinimas, impulsų spūda.

- [1] A.M. Rodin et al., Proc. SPIE, 9342 (2015), doi: 10.1117/12.2079294.
- [2] X. Délen et al., Opt. Lett., 38, 109-111 (2013), doi: 10.1364/OL.38.000109.

# Keleto optinių ciklų trukmės impulsų generacija ir spūda 3 - 4 µm spektrinėje srityje

### Generation and compression of few optical cycle pulses in the 3 - 4 µm spectral range

Agnė Marcinkevičiūtė, Nail Garejev, Rosvaldas Šuminas, Gintaras Tamošauskas, Audrius Dubietis Vilniaus universitetas, Kvantinės elektronikos katedra, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius agne.marcinkeviciute@ff.vu.lt

Vystantis tokioms mokslo sritims kaip ultrasparčioji spektroskopija, atosekundinių impulsų generacija, aukštujų harmonikų generacija bei stiprių elektromagnetinių laukų fizika, atsiranda vis didėjantis vidurinės infraraudonosios (VIR) spektrinės srities kelių optinių ciklų trukmės impulsų poreikis [1]. VIR spektrinis diapazonas yra pasiekiamas per netiesinės optikos reiškinius, tokius kaip skirtuminio dažnio generacija bei parametrinis stiprinimas, tačiau femtosekundiniams kelių optinių ciklų trukmės impulsams parametrinio stiprinimo juostos plotis yra nepakankamas. Siekiant išplėsti impulsų spektrą yra pasitelkiama netiesinė impulsų savispūda, kuri remiasi intensyvių šviesos impulsų spektro plėtra dėl fazės moduliavimosi jiems sklindant skaidrioje dielektrinėje terpėje ir dispersijos kompensavimu dispersiniuose elementuose [2]. Šis metodas yra universalus ir itin patrauklus VIR spektriniame diapazone, kadangi fazinė moduliacija yra kompensuojama pačioje netiesinėje terpėje, pasižyminčioje anomaliąja grupinių greičių dispersija (GGD) šioje spektrinėje srityje [3, 4].

Remiantis netiesinės spūdos metodu, sukūrėme kompaktišką ultratrumpųjų impulsų šaltinį, veikiantį VIR spektro srityje ir generuojantį sub-3 optinių ciklų trukmės ir sub-30 µJ energijos impulsus, kurių bangos ilgis derinamas 3-4 µm diapazone. Sukurtas šaltinis sudarytas iš skirtuminio dažnio generacijos, parametrinio šviesos stiprinimo ir netiesinės spūdos pakopų. Pradiniai 3-4 µm diapazone derinamo bangos ilgio, sub-100 fs trukmės impulsai gauti generuojant skirtuminį dažnį tarp komercinio parametrinio šviesos stiprintuvo signalinės ir šalutinės bangų kalio titanilo arsenato (KTA) kristale. Šie impulsai toliau buvo sustiprinti iki 35 µJ energijos plačiajuosčiame ličio jodato (LiIO<sub>3</sub>) parametriniame šviesos stiprintuve, kaupinant pagrindinės Ti:safyro lazerio harmonikos spinduliuote. Netiesinė spūda buvo realizuojama fokusuojant sustiprintus impulsus į keleto milimetrų storio netiesinės medžiagos (YAG, CaF<sub>2</sub> arba BaF<sub>2</sub>) plokštelę, kuri buvo patalpinta ant mechaninio postūmio staliuko. Keičiant plokštelės poziciją geometrinio židinio atžvilgiu, buvo valdomas krintančios spinduliuotės intensyvumas ir pluošto diametras, kas leido pasiekti optimalias savispūdos sąlygas. Netiesinių medžiagų pasirinkimą lėmė jų netiesiškumas ir dispersinės savybės, leidusios pasiekti optimalų balansą tarp fazės moduliavimosi ir anomaliosios GGD ties skirtingais bangos ilgiais.

Pasiekta 3 µm bangos ilgio impulsų savispūda iki 23 fs trukmės (2,3 optinio ciklo) 3 mm storio YAG plokštelėje, 3,5 µm impulsų - iki 31 fs (2,7 optinio ciklo) 4 mm storio CaF<sub>2</sub> plokštelėje ir 4 µm impulsų - iki 42 fs (3,2 optinio ciklo) 4 mm storio BaF<sub>2</sub> plokštelėje, kuomet impulsų laikinės gaubtinės ir fazės buvo atstatytos iš suminio dažnio dažninės skyros optinio strobavimo (SFG-FROG) pėdsakų, zonduojant atraminiais 30 fs trukmės, 720 nm bangos ilgio impulsais iš nekolinearaus parametrinio šviesos stiprintuvo (1 pav.). Erdvinių skirstinių matavimai parodė, kad savispūdos metu pluoštas nebuvo iškraipomas dėl fokusavimosi ir daugiafotonės sugerties reiškinių. Spūdos energinis našumas viršijo 90%, ir buvo sąlygotas tik Frenelio atspindžių nuo neskaidrintų priekinio ir galinio plokštelių paviršių. Sukurto šaltinio potencialą šviesos ir medžiagos (skaidrių dielektrikų bei puslaidininkų) sąveikų tyrimams VIR spektro srityje parodė mūsų atlikti eksperimentai generuojant daugiau nei 3 optinių oktavų ( $10^{-4}$  intensyvumo lygyje) spektro pločio superkontinuumo spinduliuotę BaF<sub>2</sub> ir CaF<sub>2</sub> kristaluose.





Tyrimą finansuoja Lietuvos mokslo taryba (sutarties Nr. APP-8/2016).

Reikšminiai žodžiai: parametrinis šviesos stiprinimas, skirtuminio dažnio generacija, impulsų spūda, superkontinuumo generacija

- J. Biegert, P. K. Bates, O. Chalus, IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. 21, 531-540 (2012).
- [2] C. Rolland, P. B. Corkum, J. Opt. Soc. Am. B 5(3), 641-647 (1988).
- [3] M. Hemmer, M. Baudisch, A. Thai, A. Couairon, J. Biegert, Opt. Express 21(23), 28095-28102 (2013).
- [4] V. Shumakova, P. Malevich, S. Ališauskas, A. Voronin, A. M. Zheltikov, D. Faccio, D. Kartashov, A. Baltuška, A. Pugžlys, Nat. Commun. 7, 12877 (2016).

# Nespindulinių nuostolių tyrimas holografiškai vaizdinant dinaminį šilumos lęšį

Evaluation of non-radiative losses by holographic probing of dynamic thermal lens

Balys Momgaudis, Andrius Melninkaitis

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

B.momgaudis@gmail.com

Lazerio šviesa ypatinga tuo, jog leidžia lokalizuoti didelį energijos kiekį ir dėl to randa pritaikymą daugybėje skirtingų sričių: medžiagų apdirbime, medicinoje, moksliniuose tyrimuose ir kitur. Dažnai tokiuose taikymuose ribojančiu faktoriumi tampa optiniai elementai, o tiksliau – jų optinis atsparumas. Maksimalus spinduliuotės intensyvumas yra ribojama silpniausio sistemos elemento. Taigi, optinis pažeidimas yra aktuali problema, tačiau bendros optinio pažeidimo teorijos vis dar nėra. Šiuo metu norint įvertinti optinių elementų atsparumą dažniausiai yra atliekami lazeriu indukuotos pažaidos eksperimentai [1], tačiau šis metodas turi nemažai trūkumų. Vienas jų negalima įvertinti, kokia dalis energijos dalyvavo sąveikoje. Galima pamatuoti tik pro bandinį prasklidusią ir atsispindėjusią energiją, tačiau nėra aišku, kiek energijos buvo išsklaidyta ir kiek jos liko sugerta medžiagoje, o taip pat, nagrinėjant tik liekamuosius struktūrinius pokyčius nežinoma, kokie procesai ir kada įvyko medžiagoje, kuris procesas lėmė pažaidos susiformavimą.

Šio darbo tikslas geriau suprasti pažeidimo metu vykstančius procesus. Tyrimo objektas yra dinaminiai procesai vykstantis sužadinus dielektrinę terpę intensyvia lazerine spinduliuote, laiko intervale nuo keliu nanosekundžių iki dešimčių mikrosekundžių. Procesų stebėjimui buvo panaudota skaitmeninės holografinės mikroskopijos ir žadinančio-zonduojančio impulso eksperimento metodikos [2]. Norint pasiekti laikinius intervalus ties kuriais stebimi šiluminiai procesai, sistema buvo patobulinta įdiegiant papildomą zonduojantį nanosekundinių impulso trukmių lazerį. Naudoti lazeriai buvo sinchronizuoti ir idiegta programiškai valdoma elektroninė vėlinimo linija. Eksperimento metu lydyto kvarco bandinio žadinimui buvo naudojamas 1,6 µJ, 380 fs trukmės S poliarizacijos impulsas su 1030 nm centrinių bangos ilgiu. Dinaminis medžiagos atsakas į žadinančią spinduliuote buvo registruojamas holografiškai laikiniame intervale nuo 20 fs iki 12 µs. Įvertinta fazės pokyčio priklausomybė nuo laiko pateikta pirmame paveikslėlyje. Procesai nuo 0,1 iki 12 µs buvo atpažinti kaip šilumos plitimas iš sužadintos srities į medžiagos tūrį [3], buvo stebimas nykstantis šiluminio lęšio poveikis. Norint įvertinti šiluminę energiją likusią medžiagoje po jos sužadinimo, buvo parašyta programa šilumos plitimo modeliavimui, paremta paprastu baigtinių skirtumų metodu [4]. Eksperimentiniai duomenys ir duomenys gauti skaitmeniškai modeliuojant davė analogišką fazes pokyčio signalo gesimą. Atliekant simuliacija buvo keičiama pradinė šilumos kiekio vertė ir gauti duomenys mažiausiu kvadratų metodu lyginami su eksperimentiniais. Tokių būdu pirmą kartą holografiškai buvo įvertinta liekamoji šiluminė energija po vieno impulso sukelto medžiagos sužadinimo. Gauta liekamosios energijos vertė medžiagoje 108 nJ su 8 nJ paklaida, sudaro 6,75 % pradinės žadinančio impulso energijos.





Reikšminiai žodžiai: Netiesinė optika, šiluminiai nuostoliai, holografija, optinė pažaida.

- [1] B. C. Stuart, et al. Phys. Rev. Lett. 74(12) 2248 (1995)
- [2] N. Šiaulys, L. Gallais, and A. Melninkaitis, Opt. Lett., 39, 2164–7 (2014).
- [3] M. Sakakura, M. Terazima, Y. Shimotsuma, K. Miura, and K. Hirao, Opt. Express 15, 16800–16807 (2007).
- [4] N.Ozisik, Finite difference methods in heat transfer (CRC press, Boca Raton, Ann Arbor, London, Tokyo, 1994).

### Akustooptinė sąveika YX – LiTaO<sub>3</sub> kristaluose

# Acousto-optic interaction in YX- LiTaO<sub>3</sub> crystals

<u>Romualdas Rimeika</u>, Daumantas Čiplys Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius romualdas.rimeika@ff.vu.lt

Akustooptiniai šviesos valdymo įtaisai pataraisiais dešimtmetčiais plačiai naudojami įvairiuose optinių apdorojimo irenginiuose: deflektoriuose, signalu moduliatoriuose, derinamuosiuose filtruose, dažnio keitikliuose ir kt. Bendras reikalavimas šiems įtaisams kuo didesnis difrakcijos efektyvumas esant kuo mažesnei akustinei valdymo galiai. Daugeliu atvejų to siekiama naudojant tūrines akustines bangas, kurios sužadinamos pjezoelektrinių plokštelių pavidalo keitikliais, pritvirtinamais prie kristalo galinio paviršiaus. Mes tiriame galimybes panaudoti šiam tikslui paviršinių akustinių bangų (PAB) keitiklius, kurių didelis privalumas suderinamumas moderniomis \_ su mikroelektronikos technologijomis.

YX- pjūvio ličio tantalatas pasižymi tuo, kad jame paviršiniais sunertiniais keitikliais galima efektyviai žadinti ne tik Reilėjaus paviršines akustines bangas, bet ir nuotėkio paviršines akustines bangas (NPAB), kurios sklisdamos kristalo paviršiumi dalį savo energijos išspinduliuoja į kristalo tūrį tūrinės akustinės bangos pavidalu [1].

Šio darbo tikslas ir buvo ištirti anizotropinę šviesos difrakcija NPAB spinduliuojamomis tūrinėmis akustinėmis bangomis, šviesai difraguojant skirtingose YX ir ZX kristalo plokštumose. Matavimai buvo atliekami su 24, 40, 50, 60 ir 120 µm periodų sunertiniais keitikliais, fotolitografijos būdu suformuotais ant kristalo Kristale paviršiaus. buvo sužadinama NPAB. Priklausomai nuo lazerio (632,8 nm) spindulio kritimo padėties kristalo paviršiaus atžvilgiu, šviesos difrakcija vyko YX arba ZX plokštumose.



1 pav. Šviesos kritimo ir difrakcijos kampų priklausomybės nuo akustinės bangos dažnio. Difrakcija YX plokštumoje.

l paveiksle pavaizduotos teorinės ir eksperimentinės krintančios ( $\gamma$ ) ir difragavusios ( $\gamma$ ) šviesos kampų priklausomybės nuo akustinės bangos dažnio, difrakcijai vykstant YX kristalo plokštumoje.

2 paveiksle pavaizduotos teorinės ir eksperimentinės krintančios ir difragavusios šviesos kampų priklausomybės nuo akustinės bangos dažnio, difrakcijai vykstant ZX kristalo plokštumoje.



2 pav. Sviesos kritimo ir difrakcijos kampų priklausomybės nuo akustinės bangos dažnio. Difrakcija ZX plokštumoje.

Pagal geriausią teorinių kreivių ir eksperimentinių taškų sutapimą nustatyta, kad nuotėkio paviršinės akustinės bangos išspinduliuota tūrinė akustinė banga sklinda kampu  $\alpha = 30^{0}$  kristalo paviršiaus atžvilgiu. Šios tūrinės akustinės bangos greitis V = 3530 m/s.

Nustatyta, kad difrakcijos efektyvumas, kuris apibrėžiamas kaip difragavusios ir kritusios šviesos intensyvumų santykis, yra žymiai didesnis vykstant difrakcijai ZX plokštumoje. Tai gali būti dėl geresnio akustinio ir optinio pluoštelių persiklojimo. Kita vertus, vykstant difrakcijai skirtingose kristalo plokštumose veikia skirtingos elastooptinės konstantos.

Reikšminiai žodžiai: ličio tantalatas, nuotėkio paviršinės akustinės bangos, tūrinės akustinės bangos, akustooptinė sąveika.

#### Literatūra

[1] M. Yamaguchi, Jpn. J. Appl. Phys. 42, 2909 (2003).

# Femtosekundinių šviesos gijų indukuojamas kelių oktavų pločio superkontinuumo formavimasis bei harmonikų generacija polikristaliniame ZnSe

# Multi-octave supercontinuum and harmonic generation induced by femtosecond filamentation in polycrystalline ZnSe

Rosvaldas Šuminas<sup>1</sup>, Gintaras Tamošauskas<sup>1</sup>, Gintaras Valiulis<sup>1</sup>, Vytautas Jukna<sup>2</sup>, Arnaud Couairon<sup>3</sup>, Audrius Dubietis<sup>1</sup> <sup>1</sup>Department of Quantum Electronics, Vilnius University, Saulėtekio Avenue 10, LT-10223 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Laboratoire d'Optique Appliquée, ENSTA ParisTech, Ecole Polytechnique, Université Paris-Saclay, F-91762 Palaiseau,

France

<sup>3</sup>Centre de Physique Théorique, CNRS, Ecole Polytechnique, Université Paris-Saclay, F-91128 Palaiseau, France rosvaldas.suminas@ff.stud.vu.lt

Nonlinear photonic crystals are the structures with spatially modulated quadratic nonlinearity [1] offering new possibilities to manipulate the nonlinear three wave interactions in a desired way. Naturally grown disordered polycrystalline materials consisting of a large number of single-crystal domains with random orientations, random shapes and random sizes, represent a particular class of nonlinear photonic crystals, often termed as random, or short-range order nonlinear photonic crystals [2]. The so called "random quasi phase matching", which stems from the disorder of nonlinear domains [3], greatly extends the fundamental limits of frequency conversion that are imposed by the phase mismatch between the interacting waves, without any additional adjustments [4]. Due to greatly relaxed phase matching conditions, random quasi phase matching allows phase matching conditions for any second-order (three wave interaction) process to be fulfilled, therefore enabling a broadband frequency conversion within a wide spectral range, with the limitations of the bandwidth being imposed just by the transparency window of the material.



Fig. 1. The output spectra of 5 mm-long polycrystalline ZnSe sample, as generated with incident wavelengths:
(a) λ<sub>i</sub> = 1.55 μm, (b) λ<sub>i</sub> = 1.9 μm, (c) λ<sub>i</sub> = 2.4 μm. The input pulse energies are 1.25 μJ, 1.9 μJ and 3 μJ, respectively. The input spectra are shown by dashed curves.

Polycrystalline materials, such as zinc-blende semiconductors, appear as attractive nonlinear media in the mid-infrared spectral range. These materials are optically isotropic, but do not have a center of inversion as they belong to the point group  $\overline{4}$ 3m, thereby possessing a nonzero second-order nonlinearity. In particular, polycrystalline zinc selenide (ZnSe), owning a promising set of optical properties, is a long-known nonlinear crystal for frequency conversion in the mid-infrared spectral range [5].

In this work we studied self-focusing and filamentation of  $1.5-2.4 \,\mu m$  tunable 100 fs pulses in polycrystalline ZnSe. We have shown efficient generation of infrared SC accompanied by the broadband emissions at second, third and fourth harmonics (see Fig. 1) with the input energy chosen so as to keep a fairly constant ratio of the input power to the critical power for self-focusing ( $\approx 50$ ). In particular, with 2.4  $\mu$ m incident wavelength, the total spectral coverage corresponded to 2.8 optical octaves spanning from 600 nm to 4.2  $\mu$ m. We also demonstrate that the spectral features, polarization properties and linear energy trends prove that harmonics are generated via simultaneous randomly quasi phase matched three-wave mixing processes due to nonvanishing quadratic nonlinearity of the crystal. Extremely high conversion to broadband second and third harmonic (19% and 0.5%, respectively) is achieved due to filamentary propagation.

Summarizing the above, polycrystalline ZnSe shares the properties of both, isotropic nonlinear material and random nonlinear photonic crystal, opening intriguing perspectives in the rapidly developing field of ultrafast mid-infrared nonlinear optics.

This research was funded by a grant No. APP-8/2016 from the Research Council of Lithuania. *Keywords: supercontinuum generation, second harmonic* 

generation, random quasi phase matching

- [1] V. Berger, Phys. Rev. Lett. 81, 4136 (1998).
- [2] A. Arie and N. Voloch, Laser Photon. Rev. 4, 355 (2010).
- [3] M. Baudrier-Raybaut, R. Haïdar, Ph. Kupecek, Ph. Lemasson, and E. Rosencher, Nature 432, 374 (2004).
- [4] S. E. Skipetrov, Nature 432, 285 (2004).
- [5] C. K. N. Patel, Phys. Rev. Lett. 16, 613 (1966).

# Vienalaikis femtosekundinių impulsų charakterizavimas dažnių skyros laiko sklendės (FROG) metodu ploname BBO kristale 1.3-4 µm spektro srityje

# Simultaneous characterization of femtosecond pulses by means of Frequency-Resolved Optical Gating (FROG) in a thin BBO crystal in the 1.3-4 µm spectral range

<u>Gintaras Tamošauskas</u>, Gvidas Beresnevičius, Julius Lukošiūnas, Agnė Marcinkevičiūtė, Audrius Dubietis Vilniaus universitetas, Kvantinės elektronikos katedra, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius gintaras.tamosauskas@ff.vu.lt

Dažnių skyros laiko sklendės metodas (angl. FROG) ir įvairios jo išpildymo versijos yra vienas plačiausiai naudojamų metodų charakterizuoti itin trumpus šviesos impulsus [1]. Šiame darbe pristatome vienalaikį ultratrumpųjų impulsų charakterizavimą FROG metodu 1.3-4 µm spektro srityje, kuris yra nekritiškas šviesos impulsų poliarizacijai.

Tyrimas remiasi keliomis prielaidomis, keliamomis femtosekundinių impulsų netiesinei sąveikai, vykdant optinės sklendės funkciją netiesiniuose kristaluose. Pavyzdžiui, generuojant suminį dažnį, netiesinis kristalas yra plonas, todėl palaiko plačią sąveikos dažnių juostą. Taip pat sąveika neturi būti įsotinta užtikrinant tiesinį signalo atitikimą tiriamo šviesos impulso amplitudei. Šios sąlygos skatina FROG matavimams rinktis itin plonus netiesinius kristalus, net iki 5 µm storio, ypač vienu metu charakterizuojant keleta skirtingo bangos ilgio impulsu [2]. Populiaraus, taikomo artimoje IR srityje, β-BaB2O4 (BBO) kristalo lūžio rodikliai yra apibrėžti iki 3.18 µm [3], o skaidrumo riba vertinama 3.5 µm. Mes išmatavome plono 0.2 mm storio BBO kristalo pralaidumą ir nustatėme, kad egzistuoja praskaidrėjimo juostos, leidžiančios itin plonus, mažiau nei 50 µm storio, kristalus taikyti FROG matavimams iki 4.7 µm. Kol kas negalima apskaičiuoti fazinio sinchronizmo kampų išplėstinėje IR srityje, nes nėra žinomi lūžio rodiklių kitimo dėsniai.



1 pav. Fazinio sinchronizmo kampas I tipo BBO kristale sumuojant 720 nm ir 1-3.5 μm. Ištisinė plona kreivė rodo 20 μm storio kristalo pralaidumą.

Fazinio sinchronizmo kreivė 1 pav. bei pilka zona, apimanti erdvinio priėmimo kampą 20  $\mu$ m storio kristalui, rodo, kad plono kristalo derinti nėra būtinybės, jei skenuojantis šviesos impulsas yra 700-800 nm bangos ilgio ir galima vykdyti vienalaikį skirtingų bangos ilgių impulsų nuo 1.1  $\mu$ m iki, tikėtina, 4.7  $\mu$ m matavimą.

Praktiškai vienu metu išmatuoti trys šviesos

impulsai, generuoti Ti:safyro lazeriu kaupinamo šviesos parametrinio generatoriaus (signalinis 1.3 µm ir šalutinis 2.1 µm statmenų poliarizacijų impulsai) bei skirtuminio dažnio 3.5 µm šviesos impulsas. Visos trys bangos kolineariai sukirstos su nekolinearaus optinio parametrinio generatoriaus (angl. NOPA) 720 nm 30 fs trukmės skenuojančiu impulsu BBO kristale. Kristalo fazinio sinchronizmo plokštuma buvo pasukta 45° kampu s ir p poliarizuotų bangų atžvilgiu, taip pasiekiant, kad visos keturios bangos (trys tiriamos ir skenuojanti) skiltų į e ir o poliarizuotas bangas kristale. dažnį generuoja bangų projekcijos Sumini 0 nepriklausomai nuo pradinės bangos poliarizacijos. Keičiant skenuojančio NOPA impulso vėlinima registruojama visu triju šviesos impulsu vienalaikė kryžminė frogograma, kuri pavaizduota 2(a) pav. Atstatytos iš FROG pėdsakų normuotos amplitudės šviesos impulsų gaubtinės pateiktos 2(b) pav.



Šioje schemoje, išlaikant kristalo orientaciją, charakterizuoti ir 4 µm bangos ilgio impulsai. Dalinė sugertis BBO kristale netrukdo charakterizuoti šviesos impulsus 1.3-4 µm spektro srityje. Toks matavimo metodas gali būti taikomas optimizuoti tribanges netiesines sąveikas, pavyzdžiui, skirtuminio dažnio generavimą.

Reikšminiai žodžiai: ultratrumpieji šviesos impulsai, šviesos impulsų charakterizavimas.

- R. Trebino, Frequency-resolved optical gating: the measurement of ultrashorl laser pulses (Kluwer Academic Publishers, Boston, Dordrecht, London, 2000).
- [2] Y. Nakano, T. Imasaka, Appl. Phys. B 123, 157 (2017).
- [3] D. Zhang et al., Opt. Commun. 184, 485-491 (2000).

#### Erdvėje ir laike koherentinės šviesos parametrinė generacija

# Space- and time-coherent light from optical parametric generator

Viktorija Tamulienė, Rytis Butkus, Valerijus Smilgevičius, Algirdas Stabinis

Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Kvantinės elektronikos katedra, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius viktorija.tamuliene@ff.vu.lt

Parametrinė šviesos generacija (PŠG) yra procesas, kurio metu dažnio  $\omega_p$  kaupinimo banga skaidriame netiesiniame kristale generuoja signalinę ir šalutinę bangas, kurių dažniai atitinkamai  $\omega_s$  ir  $\omega_i$ , taip, kad

$$\omega_p = \omega_s + \omega_i. \tag{1}$$

Esant monochromatiniam kaupinimui, egzistuoja daugybė  $\omega_s$  ir  $\omega_i$  porų, kurios tenkina (1) lygybę. Be to, PŠG prasideda nuo kvantinio triukšmo, todėl kristalo išėjime stebima plačiajuostė nekoherentinė šviesa. Fazino sinchronizmo sąlygos, dėl kurių kiekvienai dažnių kombinacijai priskiriamos tam tikros bangų sklidimo kristale kryptys, lemia tai, kad sugeneruotų bangų erdviniam-laikiniam spektrui būdinga tam tikra kampinė dispersija.

[1-3] darbuose demonstruojama galimybė generuoti erdviškai koherentinę šviesą kaupinant baigtinių matmenų pluoštu. Pagrindiniai parametrai, lemiantys generuojamo pluošto glotnumą yra kaupinimo pluoštelio radiusas – jis turi būti pakankamai mažas, ir intensyvumas – jis turi būti pakankamai didelis. [1] darbe stebimas erdvinių solitonų formavimasis dėl dviejų konkuruojančių reiškinių, vykstančių bangų sklidimo metu – dažnių juostos siaurėjimo ir pluoštelio radiuso mažėjimo kaupinimo pluoštelio lauke. Eksperimentiškai buvo filtruojama vieno dažnio banga, o laikinis koherentiškumas nenagrinėtas.

Iki šiol sąlygos būtinos generuoti vienu metu erdviškai ir laikiškai koherentinę šviesą nėra suformuluotos. Šiame darbe tokią galimybę generuoti erdviškai ir laikiškai koherentinę šviesą demonstruojame kaupinant impulsiniu pluoštu. Nagrinėjimui pasirenkami II tipo KTP kristalas, kaupinimo bangos ilgis 532 nm, išsigimęs režimas. Šiuo atveju būdingas nekritinis fazinis sinchronizmas ir sugeneruotos signalinės bangos erdvinis laikinis spektras yra parabolės formos:  $\omega - \omega_{10} \sim \theta^2$ . Čia  $\theta$  yra sklidimo kampas, o  $\omega_{10}$  centrinis signalinės bangos dažnis. Tam, kad gautume glotnų spektrą, reikia parinkti tam tikras parametrų impulso trukmės, pluoštelio radiuso, netiesinės sąveikos ilgio ir kristalo ilgio – vertes. Šios vertės seka iš sąlygos, kuri reikalauja, kad PŠG dažnių juostos pločio sąlygojami koreliacinė trukmė ir koreliacijos radiusas būtų palyginami su kaupinimo impulso trukme ir pluoštelio matmenimis. Parodoma, kad impulso trukmė gali kisti plačiame intervale, nuo šimtų femtosekundžių iki dešimties pikosekundžių; kartu turėtų keistis kristalo ilgis - nuo milimetro iki centimetro eilės matmenų.

1 pav. pavaizduoti skaitmeniškai suskaičiuoti erdviniai-laikiniai sugeneruoto signalo spektrai, kai parenkami matmenys, atitinkantys optimalų parametrų rinkinį (apatinis paveikslas) ir kai du parametrai – kristalo ilgis z ir netiesinės sąveikos ilgis  $L_n$  - išderinti nuo optimaliųjų verčių  $z_0$  ir  $L_{n0}$  (viršutinis ir centrinis paveikslai). Kaip matome, glotnus vaizdas stebimas apatiniame paveiksle.



1 pav. Sugeneruoto signalo erdvinis-laikinis spektras. Netiesinės sąveikos ilgis  $L_n = L_{n0}/2$  (viršuje ir centre) ir  $L_n = L_{n0}$  (apačioje). Kristalo ilgis  $z = z_0/3$ (viršuje) ir  $z = z_0$  (centre ir apačioje). Apatinis paveikslas atitinka optimalų parametrų rinkinį.

Reikšminiai žodžiai: parametrinė šviesos generacija, koherentinė šviesa.

- P. Di Trapani, G. Valiulis, W. Chinaglia, A. Andreoni, Phys. Rev. Lett. 80, 265-268 (1998).
- [2] P. Di Trapani, A. Beržanskis, S. Minardi, S. Sapone, W. Chinaglia, Phys. Rev. Lett. 81, 5133-5136 (1998).
- [3] V. Pyragaite, V. Smilgevičius, R. Butkus, A. Narmontas, A. Stabinis, A. Piskarskas, Phys. Rev. A 90, 023807 (2014).

# Adityvaus ir subtraktyvaus lazerinių mikroapdirbimų procesų panaudojimas stiklo/polimero mikrosistemoms, skirtoms cheminiam medžiagos nustatymui

# Combination of additive and subtractive laser microprocessing in glass/polymer microsystems for chemical sensing applications

<u>Titas Tičkūnas</u><sup>1</sup>, Matthieu Perrenoud<sup>2</sup>, Simas Butkus<sup>1</sup>, Sima Rekštytė<sup>1</sup>, Mangirdas Malinauskas<sup>1</sup>,

Domas Paipulas<sup>1</sup>, Roaldas Gadonas<sup>1</sup>, Yves Bellouard<sup>2</sup>, Valdas Sirutkaitis<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilnius University, Department of Quantum Electronics, Laser Research Center, Sauletekio Ave. 10, LT-10223 Vilnius <sup>2</sup>Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Galatea, Rue de la Maladière 71b, 2002 Neuchatel, Switzerland <u>titas.tickunas@ff.vu.lt</u>

Ultrashort laser pulses have enabled precise fabrication of 3D structures in fused silica by subtractive laser assisted etching (LAE) as well as additive fabrication of polymers via two-photon polymerization (2PP) [1]. Recently various types of novel applications were shown with an integration of both technologies in one device for cell sorting, counting, liquids mixing and filtering usage [2,3]. Here, we push these concepts further and demonstrate the capability of combining active mechanical deformable devices made of silica with polymer for new sensing application.

Both, the glass structure and the integrated polymer element are fabricated with a single Yb based femtosecond laser system (Fig. 1 (a)). First, a monolithic glass cantilever structure is produced from a single piece of fused silica by combining laser exposure and chemical etching [4]. This beam element has a low stiffness in the plane while remaining stiff for out-of-the-plane movement. Second, using a 2PP process, a polymer (SZ2080) beam is fabricated inside the gap between the deformable cantilever and the frame supporting the glass structure (as illustrated in Fig. 1 (a)). By immersing the composite micromechanical sensor into different chemicals, swelling/shrinkage phenomena of the polymer [5] is observed, causing the cantilever beam to deform. Effectively, the cantilever acts as a motion amplifier: a tiny deformation of its thinnest part is amplified and causes a sizeable motion of the cantilever tip. The composite micromechanical was immersed into different liquids sensor (4-methyl-2-pentanone, ethanol, water), which resulted instantly in different cantilever deflection angles. The observed deformations were reversible and remained the same after changing the surrounded liquid medium at least 5 cycles. Moreover, the same cantilever setup can be applied for quantitative evaluation of shrinkage/swelling forces produced by the polymer in particular during the polymerization process.

The experimental results show that such a novel concept micromechanical sensor could expand the range of active microfluidic devices, in particular to identify a given liquid medium, its concentration, as well as for the implementation of active chemical-based microactuation in lab-on-a-chip devices. In this report, we present the physical and technical background of the integration process as well as the simulated behaviour together with an experimental comparison.



Fig. 1 a) CAD model of a cantilever fabricated out of a fused silica substrate with an integrated polymerized structure attached to it. b) Close-up view of the real structure showing the polymer attached to the cantilever, c) immersed in different liquids (4-ethyl-2-pentanone, ethanol and water), the polymer swelling/shrinkage induces a glass cantilever displacement.

Reikšminiai žodžiai: selektyvus lazerinis ėsdinimas, dvifotonė polimerizacija, subtraktyvus ir adityvus lazerinis mikroapdirbimas

- K. Sugioka, Y. Cheng, Femtosecond Laser 3D Micromachining for Microfluidic and Optofluidic Applications, (Springer, London, 2014).
- [2] K. Sugioka, "Progress in ultrafast laser processing and future prospects", Nanophotonics (2016).
- [3] L. Amato, Y. Gu, N. Bellini, S. M. Eaton, G. Cerulloa and R. Osellame, "Integrated three-dimensional filter separates nanoscale from microscale elements in a microfluidic chip", Lab Chip 12, 1135-1142 (2012).
- [4] T. Yang and Y. Bellouard. "Monolithic transparent 3D dielectrophoretic micro-actuator fabricated by femtosecond laser", J. Micromech. Microeng. 25, 105009 (2015).
- [5] S. Rekštytė, D. Paipulas, M. Malinauskas, and V. Mizeikis. "Microactuation and sensing using reversible deformations of laser-written polymeric structures", Nanotechnology 28 (12), 124001 (2017).

# Fotoninių kristalų šviesolaidžio dispersijos matavimas pasitelkiant superkontinuumo generaciją

# Measurement photonic crystal fiber dispersion by means of supercontinuum generation

Julius Vengelis, Miglė Kuliešaitė, Vygandas Jarutis, Valdas Sirutkaitis

Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, 10223 Vilnius

julius.vengelis@ff.vu.lt

Labai plataus, daugiau kaip oktavos dažnių juostos pločio, optinio diapazono spinduliuotės (superkontinuumo) generacija yra plačiai tiriamas netiesinės optikos reiškinys. Fotoninių kristalų šviesolaidžių (FKŠ) panaudojimas superkontinuumo generacijai suteikė naują impulsą šio reiškinio tyrimams ir leido jį pritaikyti tokiose srityse kaip optinė dažnių metrologija, spektroskopija, optinė koherentinė tomografija ir t.t. [1, 2]. Unikali FKŠ savybė yra tai, kad, keičiant juose esančių mikrostruktūrų formą, matmenis ir atstumą tarp jų, galima keisti FKŠ optinių savybių priklausomybę nuo spinduliuotės bangos ilgio. [3].

Viena iš svarbiausių FKŠ charakteristikų, didžiąja dalimi lemianti superkontinuumo spektro formavimąsi ir dinaminius reiškinius šio proceso metu, yra dispersija. Dėl to labai svarbu turėti patikimus ir tikslius metodus šiai charakteristikai nustatyti. Šiuo metu populiariausias metodas dispersijai įvertinti yra paremtas geometrine FKŠ mikrostruktūrų analize. Deja, šiuo atveju neatsižvelgiama į tai, kad mikrostrukūrų srities parametrai gali kisti išilgai FKŠ.

Šiame pranešime pristatome naują FKŠ dispersijos matavimo metodą, paremtą spektrogramų analize, kurios gaunamos atliekant kryžminės koreliacijos dažninės skyros optinės sklendės (angl. k. cross-correlation Frequency Resolved Optical Gating – XFROG) matavimus tarp tiriamame šviesolaidyje generuoto superkontinuumo ir atraminės spinduliuotės. Nauja metodika išbandyta su poliarizaciją išlaikančiu didelio netiesiškumo FKŠ.

Matavimo eiga: Yb:KGV osciliatoriaus generuojama  $\lambda_c$  = 1030 nm,  $f_r$  = 76 MHz,  $\tau \approx 110$  fs trukmės spinduliuotė yra padalinama pluošto dalikliu ir viena dalis spinduliuotės yra panaudojama tiriamame FKŠ generuoti superkontinuumą. Toliau pasitelkiant kryžminės koreliacijos dažninės skyros optinės sklendės metoda atliekamas spektrogramos matavimas: superkontinuumo spinduliuotė ir kita dalis pradinės spinduliuotės (toliau – atraminė spinduliuotė) yra nekolineariai fokusuojamos į 300  $\mu$ m storio BBO kristalą, išpjautą  $\theta$ =30° ir  $\phi=0^{\circ}$  kampais II tipo faziniam sinchronizmui, kuriame vyksta suminio dažnio generacija. Naudojant mikrometrinio žingsnio transliacinį staliuką, keičiamas atraminio impulso vėlinimas laike superkontinuumo spinduliuotės atžvilgiu ir tokiu būdu fiksuojama spektrograma - suminio dažnio spektro priklausomybė nuo atraminio impulso vėlinimo. Šiame pranešime parodome, kad tuo atveju, kai kaupinimo spinduliuotės bangos ilgis FKŠ yra anomalios grupinių greičių dispersijos srityje ir dėl to vyksta itin staigus spektro plitimas viename FKŠ taške, analizuojant išmatuotą spektrogramą, galima gauti daug informacijos ne vien apie superkontinuumo generacijos dinamiką, bet ir apie patį FKŠ: nustatyti šviesolaidžio dispersinę charakteristiką (1 pav.), bangos ilgius, kuriems dispersija lygi nuliui (2 pav.), poliarizaciją išlaikančio FKŠ atveju šiuo metodu galima atskirai nustatyti dispersinę charakteristiką (1 pav.) bei grupinio lūžio rodiklio skirtumus tarp ortogonalių poliarizacijų modų (2 pav.) ir nustatyti FKŠ poliarizacijos išlaikymo spektrines ribas (2 pav.).



1 pav. Iš matavimo duomenų apskaičiuota dispersija ortogonalioms poliarizacinėms FKŠ modoms (mėlyna vientisa linija) bei gamintojo pateikti duomenys (juodi apskritimai). Raudonos punktyrinės linijos žymi





2 pav. Lūžio rodiklio skirtumo tarp ortogonalių poliarizacinių FKŠ modų priklausomybė nuo bangos ilgio. Taškai su punktyrinėmis linijomis žymi bangos ilgius, kuriems FKŠ dispersija lygi nuliui.

Pristatytas FKŠ dispersijos matavimo metodas yra pakankamai paprastas, tikslus (absoliutinė neapibrėžtis  $<2\times10^{-4}$ ), gali būti naudojamas poliarizaciją išlaikančių FKŠ dispersijos matavimams, o jo spektrinės matavimo ribos yra labai plačios, nes jas apsprendžia superkontinuumo spektro plotis.

Reikšminiai žodžiai: netiesinė optika, superkontinuumo generacija, fotoninių kristalų šviesolaidžiai, šviesolaidžių dispersijos matavimas

- J. C. Knight, J. Broeng, T. A. Birks, and P. St. J. Russell, Science 282, 1476 (1998).
- [2] J. M. Dudley, G. Genty, and S. Coen, Rev. Mod. Phys. 78, 1135 (2006).
- [3] K. Saitoh and M. Koshiba, Opt. Express 13, 267 (2005).

### Optinio židinio linijų kontrolė naudojant vektorinius Matje pluoštus

# Control of optical focal lines using vetor Mathieu beams

Vitalis Vosylius<sup>1,2</sup>, Sergej Orlov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fotoninių technologijų industrinė lab., Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

vitalis.vosylius@ff.stud.vu.lt

Sufokusuoti lazerio pluoštai su ilgomis židinio linijomis ir mažais skersiniais matmenimis yra plačiai pritaikomi lazeriniame medžiagų apdirbime, ypač kai yra formuojamos struktūros, kurių dvdis yra naudojamu ilgiu. palyginamas su bangos Nedifraguojantys Beselio pluoštai yra puikus pavyzdys optinio lauko, kuris dėl savo formos gali būti laikomas optine adata [1]. Kitas nedifraguojančių pluoštų šeimos pavyzdys yra Matje pluoštai, kurie gaunami sprendžiant Helmholtzo lygtį elipsinėje koordinačių sistemoje. Elipsiškumo parametras suteikia dar vieną laisvės laipsni (lyginant su Beselio pluoštais), kuris padeda valdyti pluošto geometriją. Dėl savo unikalios formos asimetrinio skersinio skirstinio, šie pluoštai gali būti laikomi kontroliuojamo pločio optiniais peiliais. nustatyta, kad Eksperimentiškai n110 pluošto poliarizacijos priklauso mikroapdirbimo proceso našumas bei kokybė [2]. Todėl svarbu kontroliuoti optinio židinio linijos poliarizaciją ašies aplinkoje. Šiame darbe lazerio pluoštus aprašome vektorinės teorijos formalizme iš skaliarinių Matje pluoštų gaudami vektorinius, pasinaudojus klasikiniu metodu, apibūdintu [3].

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) = (\nabla \times \boldsymbol{e})\psi(\boldsymbol{r}), \quad \boldsymbol{N}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{L} \nabla \times \boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) \quad (1)$$

Čia e yra vienetinis pastovus vektorius Dekarto koordinačių sistemoje, k – bangos skaičius, skaliarinis *m*-tosios eilės Matje pluoštas [4], N yra skersinė magnetinė, o M yra skersinė elektrinė vektorinės Helmholtzo lygties modos.



1 pav. Skersinė magnetinė elektromagnetinio lauko moda naudojant  $e_z$  vektorizacijios vektorių esant m = 0 (kairėje) ir m = 1 (dešinėje)

Sudėjus vektorinius Matje pluoštus su skirtingomis bangos vektoriaus projekcijomis bei skirtingomis kompleksinėmis amplitudėmis, gauname norimą elektromagnetinio lauko pasiskirstymą ant ašies. Pluošto intensyvumo pasiskirstymas laiptelio funkcijos skirstinio atveju xz ir yz plokštumose pavaizduotas 2 pav.



# 2 pav. Intensyvumo pasiskirstymai ant ašies yz ir xz plokštumose

Pasinaudojus erdviniu šviesos moduliatoriumi eksperimentiškai gauname Matje pluoštus su skirtingomis *m* vertėmis.



3 pav. Eksperimentiškai gauti lyginiai Matje pluoštai, kai m = 0 (kairėje) ir m = 1 (dešinėje)

Šiame darbe bus pristatytas metodas, leidžiantis suformuoti valdomo pločio optinius peilius su kontroliuojamu ašinio intensyvumo profiliu bei dalinai kontroliuojama poliarizacija. Taip pat bus aptarti pirmieji eksperimentiniai rezultatai.

Reikšminiai žodžiai: nedifraguojantys pluoštai, Mathieu pluoštai, erdvinis šviesos moduliatorius.

#### Literatūra

[1] A. Chafiq, Z. Hricha, and A. Belafhal, Opt. Commun., 275, 165-169 (2007).

[2] V. G. Niziev, A. V. Nesterov J. Phys. D: Appl. Phys. **32** 1455 (1999).

[3] J. Stratton, *Electromagnetic Theory*, An IEEE Press classic reissue (Wiley, 2007).

[4] C. Alpmann, R. Bowman, M. Woerdemann, M. Padgett, and C. Denz, Opt. Express 18, 26084-26091 (2010).

[5] M. Zamboni-Rached, E. Recami, and Hugo E. Hernandez-Figueroa. JOSA A, **22**, 2465–2475, (2005).

# Pirmenybinėmis spalvinėmis savybėmis pasižyminčio konversijos fosfore šviestuko prototipavimas ir charakterizavimas

# The Design and Characterization of Phosphor-Converted Light-Emitting Diodes of Preferential Colour Rendition

<u>Akvilė Zabiliūtė-Karaliūnė</u>, Henrikas Dapkus, Pranciškus Vitta, Andrius Petrulis, Artūras Žukauskas Vilniaus universiteto Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius akvile.zabiliute@tmi.vu.lt

Šviesos diodams (šviestukams) našumu pranokus įprastus apšvietimo šaltinius jie įsitvirtino bendrojo ir nišinio apšvietimo rinkose. Šiuo metu šviestukų tobulinimas daugiausiai paremtas Tarptautinės apšvietimo komisijos (CIE) spalvų atgavos indekso ( $R_a$ ) bei santykinio šviesinio veiksmingumo didinimu (SŠV), atitinkamai siekiant pagerinti apšvietimo spalvinę kokybę bei sumažinti energijos sąnaudas. Tačiau psichofizikiniai tyrimai rodo, kad žmonės pirmenybę teikia apšvietimui, šiek tiek sodrinančiam spalvas [1].

Šiame darbe pristatomas konversijos fosfore kietakūnis šviestuvas, pasižymintis pirmenybine spalvų atgava. Mėlynai šviestuvo spektrinės galios skirstinio (SGS) komponentei bei fosforų sužadinimui panaudoti aštuoni prekiniai mėlyni šviestukai (Cree Royal Blue  $\lambda_{max}$  = 455 nm), kurie buvo maitinami 0,5 A srove. Mėlynos šviesos keitikliai pagaminti naudojant skaidraus silikono (Dow Corning AS 70963N) ir žalio silikatinio (Intematix G1758  $\lambda_{\text{max}} = 509 \text{ nm}$ ) bei raudono nitridinio (Intematix ER6436  $\lambda_{max} = 623$  nm) Eu<sup>2+</sup> jonais legiruotų fosforų mišinius. Šie fosforai buvo parinkti pagal fotoliuminescencijų smailių bangos ilgius, atsižvelgiant į ankstesnius psichofizikinius tyrimus bei pirmenybine spalvų atgava pasižyminčių konversijos fosfore šviestukų SGS teorinį optimizavimą [2]. Žalio ir raudono keitiklių storiai ir fosforų masės dalys juose buvo optimizuojami gaminant skirtingų parametrų keitiklius bei matuojant suminius žadinančios mėlynos šviesos, bei fosforų fotoliuminescencijos SGS. Nustatytos optimalios vertės buvo 1 mm keitiklio storis ir 25 wt% fosforo koncentracija bei 0,2 mm keitiklio storis ir 15 wt% fosforo koncentracija atitinkamai žaliam ir raudonam fosforų keitikliams.

Sukurto šviestuvo SGS atvaizduotas 1 pav. Jis pasižymi 2900 K susietąją spalvine temperatūra (SST),  $R_a$ vertė siekia 87, SŠV yra 271 lm/W, o spalvinių koordinačių nuokrypis nuo juodojo kūno spinduliuotę atitinkančio Planko lanko ( $D_{uv}$ ) yra vos 0,0014, kas tenkina baltai šviesai keliamus reikalavimus. Pasitelkus VU mokslininkų sukurtą apšvietimo spalvinės kokybės įvertinimo įrankį [3] bei išanalizavus sukurto šviestuvo SGS, nustatyta, kad jo spalvinio sodrinimo statistinis rodiklis siekia 29%, taigi šviestuvas pasižymi savybe perteikti padidinto sodrio spalvas.

Šviestuvas taip pat testuotas gretutinio psichofizikinio eksperimento metu, kuomet juo ir panašios SST (2912 K) halogenine lempa buvo apšviestos dvi identiškos scenos. Praėjus spalvinei adaptacijai, subjektai vienu metu stebėjo abi scenas ir įvertino apšvietimo šaltinius. Eksperimento metu nustatyta, kad sukurto šviestuvo SGS subjektams malonus ir gali būti naudojamas bendrajame apšvietime, ypač komercinėse patalpose: prekybos ir pramogų centruose bei parduotuvėse.



1 pav. Pirmenybine spalvų atgava pasižyminčio šviestuko spektrinės galios skirstinys.

Reikšminiai žodžiai: šviestukas, LED, spalvos, konversija fosfore, apšvietimas

- A. Žukauskas, R. Vaicekauskas, P. Vitta, A. Tuzikas, A. Petrulis, and M. Shur, Opt. Express 20, 5356 (2012).
- [2] A. Žukauskas, R. Vaicekauskas, P. Vitta, A. Zabiliūtė, A. Petrulis, and M. Shur, Opt. Express 21, 26642 (2013).
- [3] D. Lebedenko, R. Vaicekauskas, http://demo.lrg.projektas.vu. lt/lcq/.

# Vektoriniai Beselio pluoštai, pasižymintys sferinės simetrijos poliarizacijos savybėmis

### Vector Bessel beams, having polarization with spherical symmetry

Ada Gajauskaitė, Sergej Orlov

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fotoninių technologijų industrinė laboratorija, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius ada.gajauskaite@ftmc.lt

Beselio pluoštas ypatingas tuo, kad pluošto skersiniai matmenys sklidimo metu nekinta, todėl jis dar vadinamas nedifraguojančiu pluoštu [1]. Vektorinė lazerio pluoštų prigimtis tampa aktuali tuomet, kai plokščios bangos, sudarančios pluošto erdvinį spektrą, sklinda dideliais kampais. Vektoriniai pluoštai gali turėti santykinai didelę išilginę elektrinio lauko komponentę [2-4].

Šiame darbe nagrinėjami vektoriniai Beselio ir Beselio-Gauso pluoštai, kurie pasižymi sferinės simetrijos poliarizacinėmis savybėmis. Analitiškai vektoriniai pluoštai aprašyti taikant klasikinį metodą [5]. Skaičiavimuose apibrėžiamos dvi ortogonalios vektorinių Beselio pluoštų šeimos:

$$\boldsymbol{M} = \nabla \times \boldsymbol{R} \boldsymbol{\psi}, \quad \boldsymbol{N} = 1/k \nabla \times \boldsymbol{M},$$

kur  $\psi$  – skaliarinio Beselio (arba Beselio-Gauso) pluošto kompleksinė amplitudė,  $\mathbf{R} = (x, y, z)$  – vektorius sferinėje koordinačių sistemoje,  $k = 2\pi/\lambda$  – bangos skaičius, o  $\lambda$  – šviesos bangos ilgis. Beselio pluoštas, turintis fazinio fronto dislokaciją, vadinamas optiniu sūkuriu. Optinį sūkurį charakterizuojantis parametras – topologinis krūvis m, kuris nusako fazinio fronto sukimosi kryptį ir didumą. Pagal apibrėžimą, M vektorinis laukas yra ortogonalus vektoriui  $\mathbf{R}$  ir yra proporcingas elektriniam laukui TEmodoje, o N laukas yra statmenas tiek M laukui, tiek  $\mathbf{R}$ vektoriui ir nusako elektrinį lauką TM modoje [5].

Mūsų nagrinėjamu atveju gauname, kad vektorinio lauko elektrinio lauko skirstinys TE modoje, kai m = 1turi sferinės simetrijos poliarizaciją, kaip parodyta 1 pav. ir 2 pav. Kaip matyti, tiek skersinėje (xy) plokštumoje, tiek išilginėje (xz) plokštumoje elektrinio lauko kryptis nukreipta išilgai azimutinio orto.



1 pav. Elektrinio lauko (E = M) skersinis skirstinys (z = 0), kai m = 1. Rodyklės rodo lauko kryptį.



2 pav. Elektrinio lauko (E = M) išilginis skirstinys (y = 0), kai m = 1. Rodyklės rodo lauko kryptį.

Tokią poliarizacijos būseną būtų galima vadinti sferineazimutine-meridionaline. Šis pluoštas turi centrinę intensyvumo minimumo sritį, kuri yra apribota didesnio intensyvumo barjeru iš visų pusių. Keičiant Beselio pluošto kūgio kampą arba Gauso apertūros plotį, galima valdyti gaunamos intensyvumo minimumo srities matmenis. Tinkamai parinkus parametrus gali būti suformuota "optinė adata", kuri centre atskirta į dvi dalis. Vektorinis pluošto erdvinis spektras apskaičiuojamas taip:

$$\boldsymbol{F}_M = i(\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{R})\boldsymbol{S},$$

kur S – Beselio pluošto spektras, k – bangos vektorius. Dėl suformuoto intensyvumo skirstinio šis pluoštas panašus į "optinę spurgą", todėl galėtų būti potencialiai naudojamas dalelių valdymui, mikroapdirbimui ir židinio inžinerijoje.

Reikšminiai žodžiai: Beselio pluoštai, poliarizacija, difrakcija

- [1] D. McGloin and K. Dholakia, Contemp. Phys. 46, 15-28 (2005).
- [2] R. Dorn, S. Quabis, R. Dorn, M. Eberler, O. Glckl and G. Leuchs, Opt. Comm. **179**, 1-7 (2000).
- [3] Y. Wang, W. Dou, H. Meng, Opt. Express 22, 7821-7830 (2014).
- [4] Z. Bouchal, M. Olivk, J. Mod. Opt. 42, 1555-1566 (1995).
- [5] P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of theoretical physics*, (McGraw-Hill, New York, 1953).

# Vektorinių sufokusuotų židinio modų analizė

### Analysis of vector focus wave modes

Ada Gajauskaitė, Sergej Orlov

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fotoninių technologijų industrinė laboratorija, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius ada.gajauskaite@ftmc.lt

Nedifraguojančių ir dispersiškai neplintančių lazerio šviesos impulsų generavimas ir matematinis aprašymas tiesinėje dispersinėje terpėje yra viena iš aktualių šiandienos klasikinės optikos temų. Šiuo metu esančios technologijos leidžia sukurti trumpus, siekiančius kelių femtosekundžių trukmes, nedifraguojančius impulsus, kurių aprašymui yra sukurta keletas modelių (X bangos, Beselio X impulsai, sufokusuotos židinio modos (angl. *Focus Wave modes*, trump. *FWM*) ir kt.) [1, 2]. Pastarasis modelis yra bendriausias nedifraguojančio impulso aprašymas visoje medžiagos dispersijos srityje. Viena iš įdomių FWM savybių yra galimybė valdyti impulso grupinį greitį. Priklausomai nuo kampinės dispersijos didumo, grupinis greitis gali būti didesnis, mažesnis, lygus šviesos greičiui ar net neigiamas [3, 4].

Šiame darbe aptariamos tiesinės, azimutinės ir radialinės poliarizacijos vektorinės sufokusuotos židinio modos ir jų sklidimas tiesinėje dispersinėje terpėje – BK7 stikle. Sufokusuotos židinio modos sudarytos iš skirtingo dažnio Beselio pluoštų superpozicijos. Impulsai aprašomi skaitiškai integruojant (1) formulę.

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r},t) = \int_0^\infty S(\omega) \boldsymbol{M}_0(\boldsymbol{r};\omega) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} d\omega, \qquad (1)$$

kur  $S(\omega)$  – impulso dažnių spektras,  $M_0(\mathbf{r}; \omega)$  – vektorinis  $\omega$  dažnio pluoštas, t – laikas. Tam, kad FWM impulsas sklistų dispersine terpe nepasireiškiant impulso dispersijai, turi būti suformuojama impulso kampinė dispersija t.y. kiekvienas  $\omega$  dažnio Beselio pluoštas turi būti formuojamas su Beselio kūgio kampu, tenkinančiu sąlygą:

$$\theta(\omega) = \arccos\left[\frac{c}{Vn(\omega)} + \frac{\gamma c}{\omega n(\omega)}\right],$$
 (2)

kur  $n(\omega)$  – medžiagos lūžio rodiklis, c – šviesos greitis, V ir  $\gamma$  – pasirenkamos konstantos. Parametro V fizikinė prasmė – impulso grupinis greitis. Gauti radialinės poliarizacijos elektrinio lauko E = M impulso skirstiniai parodyti 1 pav. ir 2 pav.



1 pav. Radialinės poliarizacijos FWM elektrinio lauko |*E*| skersinis skirstinys. Linijos parodo elektrinio lauko kryptį.



2 pav. Radialinės poliarizacijos FWM elektrinio lauko |E| išilginis skirstinys.

Radialinės poliarizacijos impulsas turi didesnę išilginę elektrinio lauko komponentę lyginant su tiesinės poliarizacijos impulsu. Išilginės elektrinio lauko komponentės  $(E_z)$  santykio su skersine komponente  $[E_r = (E_x^2 + E_y^2)^{1/2}]$ priklausomybė nuo laisvai pasirenkamų V ir  $\gamma$  parametrų parodyta 3 pav.



3 pav.  $E_z/E_r$  santykio priklausomybė nuo V ir  $\gamma$  parametrų radialinės poliarizacijos FWM.

Kaip matyti iš 3 pav. pluošto elektrinio lauko komponenčių santykis didumas gali būti keičiamas parinkus Beselio kūgio kampą ir impulso kampinę dispersiją.

Darbe taip pat aptariamos vektorinių impulsų trukmės priklausomybė nuo V ir  $\gamma$  parametrų bei impulso transformacijos sklindant tiesine dispersine terpe.

Reikšminiai žodžiai: Impulsai, sufokusuotos židinio modos, dispersija

- [1] P. Saari, H. Sonajalg, Laser Phys. 7, 32–39 (1997).
- [2] K. Reivelt, P. Saari, J. Opt. Soc. Am. A 17, 1785–1790 (2000).
- [3] C. J. Zapata-Rodriguez, M. A. Porras, Opt. lett. 31, 3532–3534 (2006).
- [4] M. A. Porras, G. Valiulis, P. Di Trapani, Phys. Rev. E 68, 016613 (2003).

# Topologinio krūvio tvermės dėsnis pusinio topologinio krūvio sūkuriams antros harmonikos generavimo procese

# Topological charge conservation of optical vortices with half integer topological charge in the process of second harmonic generation

<u>Maksym Ivanov</u><sup>1</sup>, Paulius Stanislovaitis<sup>1</sup>, Aidas Matijošius<sup>1</sup>, Titas Gertus<sup>2</sup>, Valerijus Smilgevičius<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius <sup>2</sup>Workshop of Photonics, Mokslininkų g. 6A, LT-08412 Vilnius <u>maks.ivannov@gmail.com</u>

Transformations of wavefront dislocations have been studied in nonlinear regimes. It was shown that for OVs (i.e. screw dislocations) the law of conservation of topological charge (TC) holds in the form of  $l_1 + l_2 = l_3$ during nonlinear processes. Conservation of integer TC was shown for the processes of second harmonic generation (SHG) [1], sum- (difference-) frequency generation [2], nonlinear wave mixing [3]. Wavefront of OV with fractional TC has the form of mixed screw-edge dislocation. These dislocations are unstable and, upon propagation, decay into unit-charged OVs in the far field.

We demonstrate collinear SHG performed with optical vortex with fractional topological charge |l|=1/2. During this process we examine the law of conservation of topological charge. Despite the instability of optical vortices with |l|=1/2, we observe counterintuitive charge doubling. In the second harmonic we observe optical vortex with topological charge |l|=1. The conservation of topological charge is confirmed by both numerical simulations and the experiment.

Topological charges of first and second harmonic optical vortices were measured by the setup based on interferometer of Mach–Zehnder (Fig. 1). Fundamental beam (FB,  $\lambda$ =1064 nm) with a Gaussian profile was split into two beams namely, signal and reference. The signal beam the fractional-charge OV with  $l=\frac{1}{2}$  was generated as a result of conversion of circularly polarized Gaussian beam, with wavelength  $\lambda$ =1064 nm, on the S-waveplate manufactured for  $\lambda$ =532 nm. The horizontally polarized OV was sent to the nonlinear crystal (KTP) to generate second harmonic (SH) beam. Two identical KTP crystals were used in both branches of the setup. The reference Gaussian beam was used to produce the interference pattern with the SH beam.

Intensity distribution of the FH is shown in Fig. 2 (a). Interference patterns of FH and reference beam are shown Fig. 2 (b, c). The interference fringes indicate that a beam has the phase shift  $\pi$  between different areas of the beam, referring to TC  $l_1=\frac{1}{2}$ .

Intensity distribution of the SH beam is shown in Fig. 3 (a). Interference patterns of SH and reference beams are shown in Fig. 3 (b, c). The forked interference pattern indicates that the SH beam carries optical vortex. Initial OV with  $l_1=\frac{1}{2}$  has integer TC  $l_3=1$  in second harmonic. The experimental results are in the good agreement with theoretical predictions.



Fig. 1. Experimental setup. BP - Brewster thin-film polarizer, BS - beam splitter, M - mirror, QWP - quarter waveplate, SWP - S-waveplate, CC - calcite cube, KTP - nonlinear crystal, F - filter, Cam - CCD camera.



Fig. 2. CCD-acquired images of (a) the FH OV of topological charge  $l = \frac{1}{2}$  and its (b, c) interference with reference pattern.



Fig. 3. CCD-acquired images of (a) the SH OV of topological charge l = 1 and its (b, c) interference with reference pattern.

Keywords: optical vortex, fractional topological charge, second harmonic generation, law of conservation of topological charge.

- [1] K.Dholakia, N.B.Simpson, M.J.Padgett and L.Allen, Phys. Rev. A 54, R3742 (1996).
- [2] A.Berzanskis, A.Matijosius, A.Piskarskas, V.Smilgevicius and A.Stabinis, Opt. Commun. 140, 273 (1997).
- [3] A.Bahabad and A.Arie, Opt. Express 15, 17619 (2007).

# Daugeliu ir pavieniais femtosekundiniais lazerio impulsais indukuotos plazmos spektroskopijos taikymas skaidrių terpių mikroapdirbimo proceso monitoringui

# Multiple and single pulse femtosecond laser induced plasma spectroscopy application for monitoring of transparent media micromachining process

Julius Skruibis, Ona Balachninaitė, Simas Butkus, Valdas Sirutkaitis Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius VU Kvantinės elektronikos katedra ir Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius julius.skruibis@gmail.com

Femtosekundiniai lazerio impulsai leidžia vykdyti medžiagu apdirbima esant mažai impulso energijai. Proceso monitoringas ir nuoseklus valdymas yra būtini lazeriniam apdirbimui. Viena iš potencialių monitoringo technologijų yra ultratrumpaisiais lazerio impulsais indukuotos plazmos spektroskopija (LIPS), išsiskirianti savo stabilumu ir tikslumu. Darbo metu buvo orientuojamasi į pavieniais ir daugeliu femtosekundinių impulsų indukuotos plazmos spektroskopijos metodo taikymą skaidrių terpių mikroapdirbimo proceso stebėjimui ir pagrindinių dėsningumų vertinimą. Eksperimentų metu buvo tiriamos plazmos spektro intensyvumo priklausomybės nuo ivairiu mikroapdirbimo parametrų ir terpių, kuriose vykdomas apdirbimas. Atliekant bandymus buvo išlaikoma ta pati vidutinė į bandinį krintanti galia. Užfiksuoti ir išanalizuoti plazmos spektrai esant įvairiems skenavimo greičiams, bei jų priklausomybė nuo pasikartojimų skaičiaus. Tokie matavimai atlikti bandinį panardinus po vandeniu ir sausumoje.



1 pav. LIPS signalo intensyvumo priklausomybė nuo lazerio vidutinės galios žadinant daugeliu ir pavieniais impulsais.



2 pav. Stikle indukuotos plazmos emisijos Na I linijos intensyvumo kitimas priklausomai nuo skenavimų skaičiaus ir greičio, naudojant vieno ir daugelio impulsų konfigūracijas. Matavimai atlikti esant sausam bandiniui. Krintančios ant bandinio spinduliuotės vidutinė galia 5W

Gauti rezultatai leido ivertinti LIPS signalo vykdant pagerėjima, kuris buvo pasiektas mikroapdirbimą po vandeniu ir sausumoje, naudojant daugelio impulsų konfigūraciją. Šis pagerėjimas buvo ir atliekant mikroapdirbima skirtingais stebimas greičiais. Daugelio impulsų indukuotas plazmos signalas, palyginus su vienu impulsu indukuotos plazmos signalu, buvo daugiau nei ~2,5 karto stipresnis, stebimas ankstesniuose lazerinio apdirbimo proceso etapuose ir jo gyvavimo trukmė yra ilgesnė.

Apibendrinant, plazmos žadinimui daugeliu (seka) femtosekundinių impulsų sukonstruota eksperimentinė schema gali būti naudojama ne tik mikroapdirbimo proceso monitoringui, sluoksninių nevienalyčių medžiagų pjovimo kontrolei, bet ir jautriai medžiagų analizei atlikti.

Reikšminiai žodžiai: femtosekundinis lazerinis apdirbimas, lazeriu indukuotos plazmos spektroskopija, (LIPS).
### Vektoriniai pluoštai absorbuojančioje terpėje lazerinio mikroapbirbimo taikymams

#### Vector electromagnetic fields in absorbing medium for laser microfabrication applications

Alfonsas Juršėnas, Sergej Orlov

Fizinių ir technologijos mokslų centras, fotoninių technologijų industrinė laboratorija, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius alfonsas.jursenas@ftmc.lt

Silicio fotonikoje yra didelis funkcinių elementų (šviesos moduliatorių, bangolaidžių bei detektorių ir k.t.) poreikis. Įprastai šie elementai yra suformuojami naudojantis litografijos arba ėsdinimo metodais, tačiau tokiu būdu panaudojamas tik paviršinis apdirbamos medžiagos sluoksnis. Siekiant sukurti trimates struktūras reikalingas lazerinis mikroapdirbimas medžiagos tūryje, tai jau yra taikoma dielektrinėms medžiagoms, tačiau silicio atveju iškyla sunkumų dėl stiprios šviesos sugerties [1, 2].

Šiame darbe pristatome metodą, kurį taikant galima sudaryti stacionarų šviesos intensyvumo pasiskirstymą viduje absorbuojančios terpės ir net kompensuoti tiesinę sugertį pluoštui skverbiantis į medžiagą. Šiame metode lazerio šviesą aprašome vektoriniais Beselio pluoštais, kurie yra analitiniai vektorinės Helmholco lygties sprendiniai ir juos apskaičiuojame iš skaliarinių sprendinių naudodami formalizmą, pateikiamą [3]

$$\boldsymbol{M} = \nabla \times (\boldsymbol{a}\Phi), \quad \boldsymbol{N} = \frac{1}{k}\nabla \times \boldsymbol{M}$$
 (1)

čia  $\Phi$  – skaliarinis m-tos eilės Beselio pluoštas, k – bangos skaičius, Elektromagnetiniai laukai M, N - tarpusavyje statmeni vektorinės Helmholco lygties sprendiniai. Elektrinis laukas, yra nusakomas vektoriniais sprendiniais M arba N. Čia N - skersinė magnetinė moda, M - skersinė elektrinė moda.



1 pav. Išilginis elektrinio lauko modulio |E| pasiskirstymas absorbuojančioje terpėje.



2 pav. Elektrinio lauko modulio |E| bei komponenčių  $(E_x, E_y, E_z)$  modulių skersiniai pasiskirstymai

Tinkamai parinkus fazes bei amplitudes vektorinių Beselio pluoštų superpozicijoje gauname, jog ši superpozicija įveikia tiesinę absorbciją ir gali pasiekti mikroapdirbimui reikšmingus intensyvumus medžiagos gylyje. Šiame darbe taip pat nagrinėjame fizinius apribojimus pluošto skvarbos gyliui, pateikiame galimas eksperimentines realizacijas.

Reikšminiai žodžiai: lazerinis mikroapdirbimas, lazerio pluoštų formavimas

- EV Zavedeev, VV Kononenko, VM Gololobov, and VI Konov., Laser Physics Letters, 11:036002, 2014.
- [2] PC Verburg, GR Römer, AJ Huis In't Veld., Optics express, 22:21958–21971, 2014.
- [3] J. Stratton, *Electromagnetic Theory*, An IEEE Press classic reissue (Wiley, 2007).

#### Vektorinių Beselio pluoštų linijinių optinių židinių inžinierija

#### Engineering of optical focal lines with vector Bessel beams

Alfonsas Juršėnas, Sergej Orlov

Fizinių ir technologijos mokslų centras, fotoninių technologijų industrinė laboratorija, Sauletekio al. 3, LT-10257 Vilnius alfonsas.jursenas@ftmc.lt

Daugelyje lazerinio mikroapdirbimo taikymų naudojami pluoštai, pasižymintys ilga ašinio intensyvumo zona, bei mažais skersinio intensyvumo matmenimis. Tokios intensyvumo formos pluoštai dar vadinami optinėmis adatomis. Naudojant optinių adatų pluoštus galima suformuoti struktūras, kurių matmenys yra artimi (arba mžesni) negu krentančio pluošto bangos ilgis [1].

Yra žinoma, jog mikroapdirbimo metu suformuojamų struktūrų kokybė (pjūvių, gręžimo kraštų lygumas ir kita) priklauso nuo poliarizacijos [2], todėl svarbu kontroliuoti optinės adatos poliarizaciją. Kitas atvejis, kai svarbu kontroliuoti pluošto poliarizaciją, yra elektrinį krūvį turinčių dalelių lazerinis greitinimas [3].

Dažnai kaip optinė adata yra naudojamas Beselio pluoštas, jis įprastai aprašomas skaliarine teorija. Šiame darbe taikome vektorinį Beselio pluošto aprašymą, kuris galioja ir tada, kai pluoštas yra fokusuojamas didelės skaitinės apertūros lęšiais. Vektoriniai Beselio pluoštai yra apskaičiuojami iš skaliarinių taikant formalizmą aprašytą [4]

$$\boldsymbol{M} = \nabla \times (\boldsymbol{a}\Phi), \quad \boldsymbol{N} = \frac{1}{k}\nabla \times \boldsymbol{M}$$
 (1)

čia a - pastovus vektorius Dekarto koordinačių sistemoje, k - bangos skaičius,  $\Phi$  - skaliarinis m-tos eilės Beselio pluoštas, kur m reiškia topologinį krūvį, M - statmena vektoriui a skersinė elektrinė moda, N - skersinė magnetinė moda. Elektromagnetiniai laukai E = M ir E = N tenkina vektorinę Helmholco lygtį bei yra tarpusavyje statmeni vektoriniai laukai. Elektrinių laukų funkcijas M bei N naudojame kaip bazines funkcijas optinių adatų sudarymui.

Šiame darbe nagrinėjame, kaip parenkant topologinį krūvį m, bei vektorines kraštines sąlygas nustatantį vektorių a, galima valdyti elektrinio lauko poliarizaciją pluošto sklidimo ašies aplinkoje.



1 pav. Išilginis optinės adatos elektrinio lauko modulio |E| pasiskirstymas.



2 pav. Skersinis optinės adatos elektrinio lauko modulio  $|\mathbf{E}|$  (bei el. lauko komponenčių modulių:  $|E_x|, |E_y|, |E_z|$ ) pasiskirstymas.

Šiame darbe parodome, jog galima valdyti elektrinio lauko E ašinio intensyvumo pasiskirstymą šioms poliarizacijoms: dvi skersinės ir viena išilginė. Taip pat mes pademonstruojame būdą, sumažinti vektorinio Beselio pluošto skersinius matmenis.

Aptariamas eksperimentinis įgyvendinimas naudojant erdvinius šviesos moduliatorius bei alternatyvius metodus.

Reikšminiai žodžiai: lazerinis mikroapdirbimas, lazerio pluoštų formavimas

- [1] H. Misawa, S. Juodkazis (ed.), *3D laser microfabrication: principles and applications*, John Wiley & Sons, 2006.
- [2] V. G. Niziev, A. V. Nesterov 1999 J. Phys. D: Appl. Phys. 32 1455
- [3] M. Zhu, Q. Cao, H. Gao, JOSA A 31(3), 500–504 (2014).
- [4] J. Stratton, *Electromagnetic Theory*, An IEEE Press classic reissue (Wiley, 2007).

#### Persiskirstymo efektai kompozituose su nanodariniais

#### **Redistributions effects in composites with nanoinclusions**

Jan Macutkevic<sup>1</sup>, Artyom Plyushch<sup>1</sup>, Juras Banys<sup>1</sup>, Alesya Paddubskaya<sup>2</sup>, Polina Kuzhir<sup>2</sup>, Olga Shenderova<sup>3</sup> <sup>1</sup>Vilnius university, Physics faculty, Saulėtekio av. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Institute of Nuclear problems, Belorussian State university, Minsk, Belorus <sup>3</sup>Adamas Nanotechnology, Inc, Raleigh, USA jan.macutkevic@gmail.com

Nowadays polymer composites with nanoiclusions are very attractive due the possibility to manipulate with polymer properties adding a very small amount of nanoparticles. Here can be mentioned polymer composites with carbon nanotubes, grafene, onion like carbon, feromagnetic and ferroelectric nanoinclusions. Although electromagnetic properties of all these inclusions are quite different, some general tendency for broadband electrical behaviour of composites can be drawn. First of all for composites of electrical conductive particles/insulator matrix for some certain concentration (called as the percolation threshold) occurs the electrical percolation (i. e. transition from electrically insulator to electrically conductive state). Although according to the excluded volume theory the percolation threshold is mainly determined by geometrical parameters of nanoparticles (like length or diameter) such correlation was never observed experimentally [1]. This suggests that other things: the distribution of nanoparticles inside polymer matrix and electrical contacts between nanoparticles are the most important factors for composites electromagnetic propeties. Secondly, the electrical percolation occurs at relatively low concentrations of nanoparticles and the tunneling conductivity is very important in this case. Also usually the properties of polymer matrix is strongly temperature dependent (especially close to the glass transition and melting temperatures), while properties of nanoinclusions are stable in much wider temperature range. Therefore in composites is possible to observe a lot of temperature dependent phenomena, which are closely related with so called positive and negative (for resistivity) temperature effects. In this presentation the broadband electromagnetic properties of polymer composites with various nanoinclusions are considered as the model of infinite RC circuit connected in serial. According to this model the complex impedance spectra can be presented as

$$Z(\nu) = Z_{\infty} + \Delta Z \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\tau) dlg\tau}{1 + i\omega\tau}$$
(1)  
where f(\tau) is the distribution function and \tau=RC.

For example, the calculated distributions of relaxation times for Onion Like Carbon (OLC)/Polyurethane (PU) composites are presented in Fig. 1. In the not annealed sample on heating the distributions of relaxation times exhibit pronounced temperature dependence, the maximum of distributions shifts from milliseconds to several tens of microsecond and distributions become narrower. After the annealing the position of maximum of distributions of relaxation times shifts by two orders of magnitude. In contrast on cooling the distributions of relaxation times are only very weak temperature independent. Considering, the physical interpretation of distribution of relaxation times in composites, the relaxation time  $\tau$ =RC=C/ $\sigma$ , where C is the capacitance of one OLC cluster, R is the resistivity and  $\sigma$  is the conductivity inside one OLC cluster or between neighborhood OLC clusters. The capacitance of OLC clusters is dependent only from geometrical parameters of OLC clusters, for example if we assume spherical OLC clusters its capacitance is proportional to effective radius of carbon clusters.



Fig. 1 Temperature evolution of the distribution function a) not annealed OLC/PU, b) annealed OLC/PU composites

Keywords: nanoparticles, composites, polymers.

#### Literatūra

[1] H. Deng, J. Lin, M. Ji, Sh. Zhang, M. Yang, and Q. Fu, Prog. Polym. Sci. 39, 627 (2014).

#### Netiesinio dielektrinio jautrio matavimo metodo taikymas feroelektrinėms medžiagoms

# Application of non-linear susceptibility measurement method to ferroelectric materials

Džiugas Jablonskas, Maksim Ivanov, Robertas Grigalaitis, Jūras Banys Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius dziugas.jablonskas@ff.vu.lt

The relationship between polarization P and external electric field E, is well known:

$$P = \varepsilon_0 \chi_1 E, \tag{1}$$

where  $\varepsilon_0$  – electric permittivity of the free space and  $\chi$  – the linear electric susceptibility f a dielectric material under test. Such relationship is valid, where condition of small external electric field applies. Experiments, where large electric field is introduced, the P(E) relationship is no longer linear and higher order susceptibilities have to be taken into account:

$$P = \varepsilon_0 \Big( \chi_1 E + \chi_2 E^2 + \chi_3 E^3 + ... \Big), \qquad (2)$$

here  $\chi_i$  – are non-linear susceptibilities(where *i* – positive integers). These non-linear components show the non-linear contribution to the polarization.

The measurements of the non-linear dielectric susceptibility of polar dielectrics give useful information on phase transitions [1]. Namely, it is possible to unambiguously recognize the type of the phase transition. Ferroelectric systems, which display continuous or second order phase transition, have negative third order susceptibility  $(\chi_3)$  in paraelectric state and, with decrease of temperature,  $\chi_3$  change sign to positive at the temperature of the phase transition. In case of a discontinuous phase transitionor a first order transition the sign of  $\chi_3$  is positive and remains unchanged throughout the vicinity of temperature of the phase transition. So is explained by the theory of Landau Ginzburg Devonshire and was proved by measurements of Triglycine Sulfate and Barium Titanate [2]. As well, it may prove to be a useful tool to investigate essential differences between relaxor ferroelectrics and dipolar glasses. [3]

The usefulness of measurements of non-linear susceptibility in characterizing phase transitions of polar dielectrics is clear, the problem is that such susceptometer is not available commercially, thus we made one ourselves. The concept of our susceptometer is based on equipment presented in [4]. It utilizes zero biased alternating voltage signal with amplitude, which allows to observe nonlinear response, but is rather small in comparison with coercive field. We use data acquisition module to generate the excitation signal and to gather the response of the sample under test. The current of the response signal is converted to measurable voltage signal using low-noise current preamplifier with wide range of sensitivities. Our equipment allows us to perform measurements of samples with capacitance in range of 10 pF up to10 nF. Estimated frequency range of excitation signal is 8 Hz – 20kHz and we gather data of harmonics up to 5th. As the sample is put in separate cryostat, it is possible to perform measurements in wide temperature range 100 K –500 K. In order to obtain a large signal to noise ratio, the equipment is implemented with averaging algorithm. The novelity of our implementation is calibration procedure using Solartron dielectric reference module, which consists of four high quality linear capacitors. The calibration allows to take into account the phase and amplitude distortions of the equipment. The characteristics of the equipment and experiment performance is the goal of the presentation.



Fig. 1. Calibration signal, calibration response and spectrum

*Key words: phase transition, dielectic spectroscopy, non-linear susceptibility*.

#### Literatūra

[1] Y. Ishibashi, Ferroelectrics 195, 81 – 86, 1997.

- [2] J. Dec, S. Miga, W. Kleemann, ICSD 2010 Proceedings, 1 5, 2010
- [3] S. Svirskas, M. Ivanov, S. Bagdzevicius, J. Macutkevic, A. Brilingas, J. Banys, J. Dec, S. Miga, M. Dunce, E. Briks, M. Antonova, A. Sternberg, Acta Mater. 64, 123 132, 2014.
- [4] S. Miga, J. Dec, W. Kleemann, Rev. Sci. Instr. **78**, 033902, 2007.

# Pažangus keturių elektrodų pilnutinės varžos spektrometras kietakūnių joninių laidininkų tyrimui

# Advanced four electrode impedance spectrometer for characterization of ionic conductors

Dalius Petrulionis<sup>1</sup>, Algimantas Kežionis<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Nanojonikos laboratorija, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva dalius.petrulionis@ff.stud.vu.lt

Vienas pagrindinių įrankių tiriant kietuosius joninius laidininkus yra pilnutinės varžos spektroskopija. Nepaisant plataus šio metodo taikymo, minėtujų medžiagų elektrinių savybių matavimas vra problematiškas. Išskirtinai joniniai laidininkai iš principo yra tokios medžiagos, kurių elektrinių savybių matavimas yra sudėtingas dėl krūvininkų - šiuo atveju jonų - susikaupimo ties, kaip taisyklė, jonams nelaidžiais matavimo elektrodais. Ši problema gali būti dalinai išspręsta panaudojant gerai žinomą keturių elektrodų matavimo metodiką. Matuojant medžiagas keturiais elektrodais įtampos matavimas vyksta tiesiogiai bandinio tūryje, o srovė teka pro atskirus tam skirtus elektrodus. Taip išvengiama jonų sankaupų sukeliamų efektų, nes galima laikyti, jog per įtampos elektrodus tekanti srovė vra labai maža.

Komerciniai prietaisai, pasitelkiantys keturių elektrodų metodiką yra reti. Apžvelgus tokių komercinių prietaisų pasiūlymus matyti, jog jų savybės neatitinka specifinių reikalavimų, atsirandančių dėl kietakūnių joninių laidininkų matavimo specifikos. Joniniai laidininkai yra ypatingi savo didele varža (paprastai viršijančia  $10^6 \Omega$  kambario temperatūroje), smulkios bandinių geometrijos (paprastai nei viena bandinio dimensija neviršija 5 mm) bei plataus matavimo temperatūrų diapazono, reikalingo pilnai suprasti fizikinius procesus šiose medžiagose.

Tęsiant ankstesnį autorių darbą [1], šiame darbe yra pristatomas keturių elektrodų spektrometras, įgalinantis atlikti matavimus nuo 1 Hz iki 2 MHz temperatūrose nuo kambario iki 1273 K ore arba inertinių dujų atmosferoje. Šis prietaisas išsiskiria iš egzistuojančių prietaisų ypatingai maža savo jėjimo talpa (mažesne už 0,4 pF) ir aukšta įėjimo varža (didesne už 10 G  $\Omega$ ). Viena pagrindinių šio prietaiso savybių yra naudojamas naujas matavimo sistemos modelis (MSM), kuriame bandinys modeliuojamas penkiomis kompleksinėmis yra varžomis. Kartu su elektroninės matavimo schemos ekvivalentiniu modeliu MSM leidžia apskaičiuoti visų bandinys-elektrodas sandūrų kompleksinius elektrinius parametras kartu su bandinio tūrio elektriniais parametrais. Šie duomenys taip pat yra panaudojami išplėsti matavimo dažnių diapazoną, atmetant jų sukeltus nepageidaujamus efektus aukštame dažnyje. Tokiu atveju ekvivalentinė prietaiso talpa sumažėja iki mažiau nei 0.1 pF.

Galimybė suskaičiuoti ir kompensuoti matavimo prietaiso parazitines talpas leidžia atlikti tikslius matavimus aukštame dažnyje. Eksperimento tikslumas gali būti užtikrintas stebint visų elektrodų ir bandinio sandūrų varžas. Prietaisas matavimo metu taip pat pateikia potencialo pasiskirstymą bandinyje. Tai taip pat padeda užtikrinti patikimus matavimo rezultatus.

Visi aukščiau išvardinti privalumai leidžia ženkliai palengvinti pilnutinės varžos spektroskopijos rezultatų interpretaciją. Pranešime yra pateikiami pavyzdžiai su gadoliniu legiruoto cerio oksido keramikomis, kuriuo atveju šis matavimo prietaisas leidžia nustatyti minėtųjų keramikų tarpkristalitinės terpės pilnutinę varžą nepaisant elektrodo įtakos tokiems matavimams. Taip pat yra pateikiami pavyzdžiai su monokristalinio pilnai itriu stabilizuoto cirkonio matavimais, kur yra stebima papildoma antra elektrinių parametrų dispersija žemame dažnyje, nematoma su kitais prietaisais. Ši dispersija priskiriama jonų sankaupomis ties priemaišomis ar kitais nereguliarumais kristalinėje gardelėje.

Pranešime taip pat yra pateikiami matavimai iliustruojantys prietaiso elektrines savybes. Šie pavyzdiniai matavimai, atlitkti matuojant standartinius SMD (Surface mount device) tipo komponentus ir jų grandines, parodo, jog keturių elektrodų spektrometras gali atlikti tikslius vektorinius įtampos ir srovės matavimus dažniuose nuo 1 Hz iki 2 MHz kai tan( $\delta$ ) (nuostolių kampo tangento) vertė svyruoja nuo 10<sup>-3</sup> iki 10<sup>3</sup>.

Reikšminiai žodžiai: spektroskopija, varža, kietieji elektrolitai, joniniai laidininkai.

# Literatūra

[1] A. Kežionis et. al., Rev. Sci. Instrum., Vol. 84 (2013) 013902.

# Chiralinio atsako nanodalelių klasteriuose modeliavimas T matricų metodu

#### Modelling chiral response in nanoparticle clusters with T matrix method

Dominykas Bričkus<sup>1</sup>, Sergejus Orlovas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

dominykus@gmail.com

Chiralinės medžiagos reaguoja skirtingai į dešinės ir kairės apskritiminės poliarizacijos šviesos pluoštą. Šis skirtingas atsakas pasireiškia arba skirtingu lūžio rodikliu, ir yra vadinas optiniu aktyvumu, arba skirtingu sugėrimo koeficientu, tada jis vadinamas apskritiminiu dichroizmu. Natūralios chiralinės medžiagos turi ribotą pritaikymą dėl palyginus silpnos sąveikos, dėl to reikalingas žymiai didesnis medžiagos kiekis nei bangos ilgis. Tačiau metamedžiagos su specialiai parinktomis nanostruktūromis gali turėti žymiai stipresnį chiralinį atsaką, kuris leistų įgalinti daugelį naujų pritaikymų [1].

Tam kad paskaičiuoti chiralinį atsaką nanodalelių klasteriuose, buvo naudojamas, taip vadinamas T matricos metodas [2]. Šis metodas naudoja bazines sferines funkcijas iš Mie šviesos išbarstymo problemos sprendimo sferinei dalelei. T matrica susieja išbarstytos spinduliuotės bazinių funkcijų koeficientus su pradinės spinduliuotės išskleidimu bazinėmis funkcijomis. Sferinei dalelei ši matrica turi tik įstrižainės narius, tačiau sudėtingesnėms struktūroms atsiranda papildomi nariai, nusakantys tam tikrų sferinių funkcijų keitimasi į kitas. Nanodalelių klasteriui T matrica gali būti paskaičiuota iš atskirų dalelių T matricų ir transliacinių matricų kombinacijos.



1 pav. Pralaidumo erdvinis profilis kairinės apskritiminės poliarizacijos pluoštams.

Tam kad išgauti chiralinį atsaką dažnai naudojamos spiralinės nanostruktūros [3]. Tačiau, net ir nanosferų klasteris iš trijų dalelių gali turėti chiralinį atsaką priklausomai nuo jų išsidėstymo [4, 5]. Jeigu trys sferos išsidėsčiusios palei tiesę (180 laipsnių kampu) arba trikampiu (60 laipsnių kampu) dėl struktūros simetrijos tiek dešinės apskritiminės, tiek kairės apskritiminės poliarizacijos pluoštas turės tokį patį išbarstymą. Parinkus kurį nors kitą kampą tarp dalelių, simetrija suyra ir galima stebėti skirtingą pralaidumą, priklausomai nuo kurios poliarizacijos pluoštą siunčiame.



2 pav. Pralaidumo erdvinis profilis dešininės apskritiminės poliarizacijos pluoštams.



3 pav. Pralaidumo minimumas kairinės ir dešininės apskritiminės poliarizacijos pluoštams.

T matrica priklauso tik nuo sklaidančio objekto parametrų. Vadinasi, paskaičiavus T matricą, galima laisvai keisti ateinančio pluošto parametrus, ir sudauginus su ta pačia T matrica gauti išbarstytą šviesą. Pavyzdžiui galima pritaikyti transliacinę matricą krentančiam spinduliui taip keičiant jo poziciją palyginus su nanodalelių klasteriu. Šitokiu metodu skenuojant erdvę aplink nanodalelių klasterį suskaičiuotas pralaidumas kiekviename taške (žr. pav. 1,2) abiejų apskritiminių poliarizacijų pluoštams.

Tam kad surasti optimalią geometriją buvo paskaičiuoti pralaidumo minimumai (žr. pav. 3) dešinės ir kairės poliarizacijos pluoštams. Buvo ištyrinėta koks išsidėstymas duoda maksimalų chiralinį atsaką, bei kaip jis priklauso nuo įvairių geometrijos ir medžiagos parametrų. *Reikšminiai žodžiai: metamedžiagos, plazmonika, chiralinės nanomedžiagos* 

- [1] Wang Z et al., Nanotechnology, 27(41):412001(20pp) (2016).
- [2] Bo Peterson and Staffan Ström, Phys. Rev. D 8, 3661 (1973).
- [3] M. Esposito, et al. ACS Photonics 2, 105114 (2015).
- [4] C. Helgert, C. et al. Nano Lett. 11, 44004404 (2011).
- [5] P. Banzer et al. Nature Communications 7, 13117 (2016).

#### Silikatinio stiklo pjovimas asimetriniu Beselio-Gauso pluoštu

#### Asymmetrical Bessel-Gaussian beam for soda-lime glass cutting

<u>Juozas Dudutis</u>, Paulius Gečys, Rokas Stonys, Gediminas Račiukaitis Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius juozas.dudutis@ftmc.lt

Stiklo pjovimui naudojami įvairūs lazeriniai metodai [1]. Itin tikslaus tiesioginės lazerinės abliacijos metodo našumą riboja įvairūs akumuliaciniai reiškiniai, spinduliuotės ir abliacijos produktų sąveika ir sklaida nuo pjūvio sienelių. Nesudėtingus kontūrus efektyviau išpjauti suformuojant modifikacijas stiklo tūryje ir atliekant mechaninį arba terminį perpjautų detalių atskyrimą. Tokiu būdu suformuojamas itin siauras pjūvio plotis, sumažinamas pjovimo produktų kiekis ir išpjautos detalės pasižymi aukštu sienelių statmeniškumu.

Modifikacijos storo stiklo padėklo tūryje gali būti suformuojamos skenuojant bandinį aštriai fokusuotu pluoštu skirtingame aukštyje, apdirbant šviesos gijomis arba panaudojant įvairius pluošto formavimo metodus. Vieni iš perspektyviausių yra Beselio pavidalo pluoštai, kurie pasižymi dideliu difrakciniu nuotoliu ir mažu centrinės smailės diametru, taip pat yra atsparesni netiesinei sąveikai, sferinėms aberacijoms bei gali atsistatyti, kuomet dalis pluošto yra užblokuojama.

Beselio-Gauso pluoštas efektyviausiai formuojamas kūgine prizme - eksikonu, tačiau dėl technologinių apribojimu pagaminti optiniai elementai nukrypsta nuo idealaus kūgio formos ir turi užapvalinta viršūne [2] bei elipsinį pagrindą [3]. Užapvalinta viršūnė lemia pluošto suformavima didesniu atstumu nuo eksikono viršūnės, ašinio intensyvumo moduliacijas bei centrinės smailės diametro mažėjimą didėjant pluošto sklidimo nuotoliui. Del eliptinio optinių elementų pagrindo atsiranda astigmatinės aberacijos, kurios eksikono su smailia viršūne atveju lemia pluošto centrinės smailės simetrinį suskilimą į atskirus maksimumus, didėjant pluošto sklidimo nuotoliui. Užapvalintą eksikono viršūnę galima aproksimuoti sferiniu lęšiu, kurio astigmatinės aberacijos lemia elipsinio pluošto suformavima [4], todėl tokiu elementu suformuotas pluoštas yra asimetrinis, tačiau pasižymi santykinai dideliu difrakciniu nuotoliu (1 pav.).

Asimetriniu Beselio-Gauso pluoštu paveikus stiklą, medžiagoje susiformuoja skersiniai įtrūkiai, kurie išplinta statmena pluošto sklidimo kryptimi, sutampančia su elipsinio pluošto ilgesniąja ašimi (2 pav.) [5]. Stiklo apdirbimui buvo naudojama Atlantic HE (Ekspla) lazerio fundamentinė harmonika (1064 nm) su 300 ps impulso trukme ir 1 kHz impulsų pasikartojimo dažniu. Beselio-Gauso pluoštas buvo formuojamas fokusuojant Gauso pluoštą 5° pagrindo kūgine prizme su užapvalinta viršūne ir elipsiniu pagrindu. Suformuoto skirstinio centrinės smailės diametras buvo sumažintas 4F sistema. Tyrimų metu nustatyta, kaip keičiasi skersinių įtrūkių ilgis bandinio tūryje, keičiant impulso energiją. Maksimalus suformuotų įtrūkių ilgis siekė 180 µm, naudojant 2 mJ energijos impulsus. Suformuoti skersiniai įtrūkiai, orientuoti išilgai pluošto skenavimo krypties, buvo panaudoti sparčiam 1 mm storio silikatinio stiklo pjovimui. Pjovimo procesas buvo optimizuojamas keičiant lazerio impulsų energiją, skirstinio padėtį vertikalia kryptimi ir pluošto skenavimo greitį. Maksimalus stabilaus pjovimo greitis siekė 240 mm/s.



suformuotas intensyvumo skirstinys XY ir XZ plokštumose.



2 pav. Stiklo tūryje suformuotų įtrūkių (a) išilgai ir (b) statmenai elipsinio pluošto ilgesniosios ašies optinio mikroskopo nuotraukos tamsaus lauko režime.

Reikšminiai žodžiai: subnanosekundinis lazeris, pluošto formavimas, Beselio-Gauso pluoštas, kūginės prizmės aberacijos, silikatinis stiklas, stiklo pjovimas.

- S. Nisar, L. Li and M. A. Sheikh, Laser glass cutting techniques—A review, J. Laser Appl. 25(4), p. 042010 (2013).
- [2] O. Brzobohaty, T. Cizmar and P. Zemanek, High quality quasi-Bessel beam generated by round-tip axicon., Opt. Express 16(17), pp. 12688–12700 (2008).
- [3] X. Zeng and F. Wu, Effect of elliptical manufacture error of an axicon on the diffraction-free beam patterns, Opt. Eng. 47(8), pp. 1–6 (2008).
- [4] T. Tanaka and S. Yamamoto, Comparison of aberration between axicon and lens, Opt. Commun 184, pp. 113–118 (2000).
- [5] J. Dudutis, P. Gečys, G. Račiukaitis, Non-ideal axicon-generated Bessel beam application for intra-volume glass modification, Opt. Express, 24, pp. 28433-28443 (2016).

# Didelio našumo trimačių mikrostruktūrizuotų karkasų lazerinis formavimas kremzlės regeneracijos tyrimams *in vitro* ir *in vivo*

# High throughput laser fabrication of 3D microstructured scaffolds for cartilage regeneration studies *in vitro* and *in vivo*

Sima Rekštytė<sup>1</sup>, Justinas Mačiulaitis<sup>2,3</sup>, Romaldas Mačiulaitis<sup>2</sup>, Mangirdas Malinauskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, 10223 Vilnius

 $^2 Lietuvos sveikatos mokslų universitetas, Medicinos akademija, Fiziologijos ir farmakologijos institutas,$ 

A. Mickevičiaus g. 9, 44307 Kaunas

<sup>3</sup>Lietuvos sveikatos mokslų universitetas, Medicinos akademija, Sporto institutas, Kalniečių g. 231, 50108 Kaunas sima.rekstyte@gmail.com

Tiesioginis lazerinis rašymas polimerų pirmtakuose (TLR-PP) naudojant femtosekundinius lazerio impulsus yra plačiai taikomas būdas formuoti polimerinius mikrostruktūrizuotus karkasus, skirtus in vitro audinių inžinerijos tyrimams [1]. TLR-PP populiarumas yra nulemtas didele apdirbamų medžiagų įvairove, galimybe laisvai parinkti formuojamo darinio geometriją, matmenis bei kitus parametrus. Nepaisant viso to, šiuo metodu suformuotų karkasų tyrimai *in vivo* vis dar atliekami retai [2, 3]. Taip yra dėl ilgos makro-darinių (milimetrų dydžio, tinkamų valdyti chirurgui) formavimo trukmės, kuri yra nulemta pataškinio rašymo proceso bei yra ribojantis veiksnys atliekant tyrimus, kuriems reikalingas didelis kiekis tokių karkasų. Vis dėlto, spartus TLR-PP vystymas, ypač audinių inžinerijos srityje, leidžia tikėtis, kad greitu metu tai taps iprastu metodu gaminant konkrečiam pacientui pritaikytus mikrostruktūrizuotus karkasus.

Šiame darbe mes pristatome naujausius kremzlės audinio regeneracijos rezultatus panaudojant polimerinius mikrostruktūrizuotus karkasus, suformuotus TLR-PP metodu. Pasirinktas hibridinis organinis-neorganinis polimero pirmtakas SZ2080 - optimali šiam taikymui medžiaga vertinant biosutaikomumą bei apdirbimo našumą ir patogumą. Darinių formavimas buvo vykdomas pasitelkus lazerinę sistemą, kurios spinduliuotės šaltinis yra femtosekundinis lazeris Pharos ( $\nu$ =200 kHz,  $\tau$ =300 fs,  $\lambda$ =515 nm). Fokusuoto lazerio pluošto padėtis polimero pirmtako tūryje keičiama naudojant sinchronizuotą galvanometrinių skenerių bei linijinių poslinkio stalų judėjimą. Tai leidžia išnaudoti abiejų pozicionavimo sistemų gerąsias savybes - atitinkamai spartą bei didelį apdirbimo plotą. Parodome, kad optimizavus formavimo parametrus bei darinio geometriją pernakt galima suformuoti kelias dešimtis 1,5×1,5×0,2 mm<sup>3</sup> dydžio karkasų, išlaikant 15  $\mu$ m struktūrinių elementų dydį. Toks našumas yra būtinas atliekant statistinius ląstelių augimo bei elgsenos trimačių karkasų aplinkoje tyrimus.

In vitro tyrimų metu stačiakampės bei heksagoninės porų formos polimeriniai mikrostruktūrizuoti karkasai buvo užsėti chondrocitais (1 pav.). Ląstelių morfologijos ir gyvybingumo nustatymui buvo vertinti histologiniai pjūviai ir skenuojančios elektroninės mikroskopijos (SEM) vaizdai. Nustatyta, kad ląstelės gyvybingos, geba prisitvirtinti prie karkaso vidinių struktūrų, formuoti jungtis su kitomis ląstelėmis ir gaminti gausėjantį ekstraląstelinį matriksą. Atliekami tyrimai, siekiant nustatyti optimalią karkasų morfologiją analizuojant porų formos įtaką baltymų ekspresijai.

Heksagoninės poros formos karkasai buvo pirmą kartą panaudoti tyrimams gyvūno modelyje *in vivo* (implantuoti į triušio sąnario kremzlės defektą). Po 6 mėnesių atlikta apžiūra parodė, kad gydymo efektyvumo rezultatai naudojant mikrostruktūrizuotus polimerinius karkasus buvo reikšmingai geresni nei kontrolinėje (be gydymo) grupėje ir ne blogesni nei naudojant komercinę kolageninę membraną.

Toliau vykdomi tyrimai leisiantys išnaudoti unikalią TLR-PP suteikiamą galimybę varijuojant tvarkaus karkaso geometrija bei porėtumu tirti šių parametrų įtaką audinio formavimuisi.



1 pav. Stačiakampio (a) ir heksagoninio (b) tipo karkasų, apaugintų chondrocitais, optinio mikroskopo vaizdai (įklijose pateikti karkasų SEM vaizdai).

Reikšminiai žodžiai: trimačiai karkasai, tiesioginis lazerinis rašymas, hibridiniai polimerų pirmtakai, kremzlės audinio regeneracija

- M.T. Raimondi, S.M. Eaton, M.M. Nava, M. Lagana, G. Cerullo, and R. Osellame, J. Appl. Biomater. Funct. Mater. 10, 56–66 (2012).
- [2] J. Mačiulaitis, M. Deveikytė, S. Rekštytė, M. Bratchikov, A. Darinskas, A. Šimbelytė, G. Daunoras, A. Laurinavičienė, A. Laurinavičius, R. Gudas, M. Malinauskas, and R. Mačiulaitis, Biofabrication 7, 015015 (2015).
- [3] P. Timashev, D. Kuznetsova, A. Koroleva, N. Prodanets, A. Deiwick, Y. Piskun, K. Bardakova, N. Dzhoyashvili, S. Kostjuk, E. Zagaynova, Y. Rochev, B. Chichkov, and V. Bagratashvili, Nanomedicine 11, 1041-1053 (2016).

### Link 3D gamtinės kilmės dervų fotostruktūrinimo dinaminės projekcinės litografijos būdu

# Towards 3D photostructuring of naturally derived resins employing dynamic projection lithography

Edvinas Skliutas<sup>1</sup>, Sigita Kašėtaitė<sup>2</sup>, Linas Jonušauskas<sup>1</sup>, Jolita Ostrauskaitė<sup>2</sup>, Mangirdas Malinauskas<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Kvantinės elektronikos katedra, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, 10223 Vilnius

<sup>2</sup>Kauno technologijos universitetas, Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Radvilėnų pl. 19, 50254 Kaunas edvinas.skliutas@ff.vu.lt

Pastaraisiais metais trimatis (3D) optinis spausdinimas iš sintetinių šviesai jautrių medžiagų tapo itin populiaria prototipavimo technologija ir yra pradedamas diegti i gamyba [1]. Nors sukurti staliniai 3D spausdintuvai (3DS) jau yra prieinami asmeniniam vartojimui, komercinės dervos vis dar yra santykinai brangios. Be to, dažnai nežinoma jų cheminė sudėtis, negalima reguliuoti naudojimui paruoštų medžiagų fizikinių, cheminių bei biologinių savybių. Dėl to jų panaudojimas ribojamas ir tinkamas tik prototipavimo srityje. Naujausiais tyrimais parodyta, kad ir atsinaujinančios žaliavos gali būti pritaikytos fotostruktūrinamų medžiagų gamyboje [2]. Pavyzdžiui, rafinuojant biodyzeliną, gaunamas šalutinis produktas glicerolis. Tiek grynas, tiek chemiškai modifikuotas glicerolis gali būti naudojamas kaip monomeras polimerų sintezei [3]. Manoma, kad gamtinės kilmės monomerų pagrindu paruoštos dervos galėtų konkuruoti su komercinėmis ne vien kaina, bet ir biologinio suderinamumo bei skaidumo savybėmis.

Šios tendencijos paskatinti ėmėme domėtis organinių bio-medžiagų, pritaikomų 3DS technologijoje, sinteze ir fotostruktūrinimu. Kaip pradinė medžiaga buvo pasirinktas glicerolio diglicidileteris [4]. Į jį buvo įmaišyta fotoiniciatoriaus ir kitų priedų (pvz., reaktyviojo tirpiklio) ir taip gautos šviesai jautrios dervos. Jos buvo fotostruktūrinamos dinaminės projekcinės litografijos (DPL) būdu. Tam naudotas Autodesk įmonės optinis 3DS Ember, spinduliuojantis 405 nm bangos ilgio šviesą. Prietaisas leidžia sukurti norimo vaizdo projekcijas, kuriomis buvo apšviečiami dervų lašeliai. Po ekspozicijos buvo stebima selektyvioji fotopolimerizacija (1 pav.). Gamtinės kilmės dervos palygintos su standartinėmis: Formlabs Clear ir Autodesk PR48. Nustatyta, kad paruoštos dervos buvo mažiau jautrios spinduliuotei ir joms reikėjo ilgų ekspozicijos trukmių (>10 min.). Nepaisant to, buvo ištirti jose suformuoti struktūriniai elementai - įvairaus storio linijos su kintančiu atstumu tarp jų. Matavimai parodė, kad ploniausios suformuojamos linijos yra apie 110  $\mu$ m storio, kai tarpas 200  $\mu$ m ar didesnis. Taip pat buvo įvertinti linijų morfologija optiniu profilometru. Įvertinta, kad didinant sugertos energijos doze, polimerizuojama daugiau medžiagos ir suformuojami aukštesni dariniai (1 lentelė). Stebima tiesinė priklausomybė.

Taigi, šiame darbe mes parodėme, kad iš gamtinės kilmės monomerų paruoštos dervos gali būti pritaikytos DPL, tačiau jos yra mažiau jautrios šviesai, joms reikia papildomų cheminių modifikacijų arba optimizuoto fotoiniciatoriaus. Taip pat tikimasi, kad pažangus medžiagų apdorojimas ultrasparčiaisiais impulsais dėl aukšto intensyvumo spinduliuotės ir atsirandančios netiesinės medžiagos-šviesos sąveikos padidintų tokių dervų fotostruktūrinimo efektyvumą [5].



 pav. Selektyviai polimerizuota gamtinės kilmės derva.
 a) – suformuoti dariniai po skirtingų ekspozicijos trukmių.
 b) – jų vaizdai, atlikti skenuojančiuoju elektronų mikroskopu (SEM). Buvo įvertinta, kad darinių aukštis tiesiškai priklauso nuo sugertos energijos dozės.

1 lentelė. Suformuotų darinių aukščiai d, esant skirtingoms energijos dozėms E.

$E (J/cm^2)$	<i>d</i> (µm)
16	120
21	200
24	265

Reikšminiai žodžiai: trimatis (3D) spausdinimas, fotostruktūrinimas, dinaminė projekcinė litografija (DPL), gamtinės kilmės dervos, atsinaujinantys ištekliai

- M. Molitch-Hou, Adidas Uses Carbon's 3D Printing to Mass-Produce Futurecraft 4D Shoes (2017-06-30).
- [2] J. Chen, et al., Polymer **43**(20), 5379-5389 (2002).
- [3] S. Kašėtaitė, et al., Polym. Bull. 72, 3191-3208 (2015).
- [4] E. Skliutas, et al., Proc. SPIE **10115**, 1011514 (2017).
- [5] M. Malinauskas, et al., Light Sci. Appl. 5(8), e16133 (2016).

# NaYbF4:Er<sup>3+</sup> nanokristalų panaudojimas lokalių temperatūros pokyčių vaizdinimui trimatės lazerinės litografijos metu

# NaYbF4:Er<sup>3+</sup> as luminescent temperature probes for local heating imaging during direct laser writing nanolithography

Simonas Varapnickas<sup>1</sup>, Dovilė Baziulytė-Paulavičienė<sup>2</sup>, Simas Šakirzanovas<sup>2</sup>, Mangirdas Malinauskas<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius <sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius s.varapnickas@gmail.com

Trimatės lazerinės litografijos (3DLL) metodas vis plačiau pritaikomas įvairių funkicnių mikroir nanodarinių gamybai. Nepaisant to, mokslo bendruomenėje dar nėra vieningai sutariama dėl polimerizacijos reakcijos inicijavimo mechanizmo, eksponuojant medžiagas skirtingos trukmės lazeriniais impulsais. Literatūroje paskelbtas vos vienas bandymas tiesiogiai išmatuoti kiekybinius temperatūros pokyčius 3DLL metu [1], o netiesioginių matavimų rezultatai yra prieštaringi net bandymus atliekant su vienodomis medžiagomis ir panašiais eksponavimo paramterais [2-4]. Eksperimentiškai parodyta galimybė 3DLL metodu darinius struktūruoti polimerinius nenaudojant fotoiniciatorių [2]. Tai leidžia manyti, jog egzistuoja polimerizacijos inicijavimo mechanizmas, kurio metu dominuoja ne daugiafotonė sugertis (klasikinis požiuris), o griūtine jonizacija, dėl kurios tikėtinas ir didesnis medžiagos kaitimas. Sukurti vieningą teorinį modelį įmanoma tik detaliai ištyrus terminių reiškinių dinamiką reakcijų metu, tad patikimų temperatūros vaizdinimo metodų paieška išlieka aktualus uždavinys.

Šiame darbe pristatomi lokalių temperatūros pokyčių vaizdinimo in-situ polimerizacijos metu hibridiniame fotopolimere organiniame-neorganiniame SZ2080 rezultatai. Kaip temperatūrai jautrūs fotopolimero legirantai panaudoti dvipakopiškai perspinduliuojantys (DP) (angl. upconverting) NaYbF4:Er<sup>3+</sup> nanokristalai (NK). Eksperimentams naudotų  $\beta$ -NaYbF<sub>4</sub>:Er<sup>3+</sup> NK sintezė atlikta pagal modifikuotą literatūroje aprašytą procedūrą [5]. Pagaminti nanokristalai specifikuoti Rentgeno difrakcijos, skenuojančios elektronų mikroskopijos (SEM) bei liuminescencijos spektroskopijos metodais. Nustatyta, kad susintetinti heksagoninių plokštelių formos DP nanokristalai, kurių skersiniai matmenys 300 nm, o storis 100 nm.

Nanokristalų polimero pirmtako aplnkoje liuminescencijos dėsningumai tirti žadinimui panaudojant  $\lambda=980$  nm nuolatinės veikos lazerį. Nustatyta, kad  $^2H_{11/2}{\rightarrow}^{4}I_{15/2}$  ir  $^4S_{3/2}{\rightarrow}^{4}I_{15/2}$  Er $^{3+}$ jonų emisijos integrinių intensyvumų santykis priklauso nuo aplinkos temperatūros ir gali būti aprašomas Bolcmano tipo skirstiniu:

$$R(T) = \frac{I_{525}}{I_{549}} = A \exp \frac{-\Delta E}{k_{\rm B}T}$$
(1)

čia R – termiškai surištų juostų integrinių intensyvumų santykis,  $I_{525}$ ,  $I_{549}$  – integriniai spektrinių juostų aplink 525 nm ir 549 nm intensyvumai, A – konstanta, priklausanti nuo sužadintų lygmenų gyvavimo trukmės ir

registruojančio detektoriaus jautrumo,  $\Delta E$  – energijos tarpas tarp surištųjų lygmenų, k<sub>B</sub> – Bolcmano konstanta, T – absoliutine temperatūra. Optinio atsako kalibracija atlikta temperatūrų intervale nuo 24 iki 70 °C ir ekstrapoliuota plačiame intervale pagal (1) sąryšį.

Užregistruotas termiškai surištųjų Er<sup>3+</sup> jonų liuminescencinio atsako spektrinių juostų intensyvumų santykio kitimas, kai polimero pirmtakas apdirbamas skirtingais 3DLL režimais. Formavimui naudoti tipiniai lazerinio pluošto parametrai (1030 nm, 300 fs, 200 kHz, NA = 0.8) o impulso energija ( $E_{imp.}$ ) keičiama nuo ikislenkstinės iki optinio medžiagos pramušimo verčių. Apskaičiuotos vidutinės temperatūros kitimo polimerizacijos zonos aplinkoje vertės:  $\Delta T_1 < 3$  K, kai rašoma apdirbimo lango ribose;  $\Delta T_2 \approx 170$  K pereksponuojant polimero pirmtaką.





Reikšminiai žodžiai: trimatė lazerinė litografija, temperatūrai jautrūs nanokristalai, lokalios temperatūros vaizdinimas

- [1] J. B. Mueller, J. Fischer, Y. J. Mange, T. Nann, and M. Wegener, Appl. Phys. Lett. **103**(12), 123107 (2013).
- [2] M. Malinauskas, P. Danilevicius, and S. Juodkazis, Opt. Express 19(6), 5602 (2011).
- [3] T. Baldacchini, S. Snider, and R. Zadoyan, Opt. Express 20(28), 29890 (2012).
- [4] K. Takada, K. Kaneko, Y. D. Li, S. Kawata, Q. D. Chen, and H. B. Sun, Appl. Phys. Lett. 92(4), 041902 (2008).
- [5] F. Wang, R. Deng, and X. Liu, Nat. Protocols 9(7), 1634 (2014).

#### Nekoherentinė šviesos konversija modifikuotuose antraceno junginiuose

#### Noncoherent light upconversion in modified anthracene compounds

<u>Greta Bučytė</u>, Steponas Raišys, Karolis Kazlauskas, Povilas Adomėnas, Saulius Juršėnas Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius greta@fidi.lt

Tripletinių eksitonų anihiliacijos salygota šviesos konversija, kurios metu mažesnės energijos fotonai yra konvertuojami į didesnės energijos fotonus, jau dešimtmečius sulaukia išskirtinio dėmesio dėl to, kad jai vykti pakanka santykinai mažo galios tankio  $(\sim 10 \text{ mW/cm}^2)$ nekoherentinės žadinančiosios spinduliuotės [1]. Tokia šviesos konversija yra itin patraukli saulės energetikoje, kadangi saulės spinduliuotės galios tankis yra pakankamas šviesos konversijai vykti. Saulės elementai paprastai nepajėgia sugerti visos saulės spinduliuotės ir ilgabangė jos dalis lieka nepanaudota. Pasinaudojus šviesos konversija būtų galima konvertuoti ilgabangius fotonus į trumpesnių bangų šviesą, kuri jau gali būti efektyviai sugeriama saulės elemento, taip išplečiant jo sugerties spektrą ir padidinant jo našuma. Šviesos konversijos kvantinis našumas tirpaluose siekia 26% [2], tačiau praktiniams taikymams reikalingų sluoksnių našumas yra daugiau kaip 10 kartų mažesnis lyginant su našumu pasiekiamu tirpaluose [3]. Šios našumo sumažėjimo priežastys galutinai dar nėra suprastos, tačiau manoma, kad viena iš pagrindinių priežasčių yra pasireiškiantis savaiminis 9.10-difenilantraceno (DPA) fluorescencijos gesinimas. Norit išlaikyti aukštą šviesos konversijos kvantinį našumą yra būtina taip modifikuoti difenilantraceno molekulinę struktūrą, kad šis emisijos gesinimas būtų minimalus.

Šiame darbe yra pristatomos struktūriškai modifikuotų DPA junginių (1 pav.) šviesos konversijos savybės. Polimeriniai sluoksniai pagaminti terminio lydimo metodu [4] buvo sudaryti iš polimetilmetakrilato ir polivinilbutiralio matricos, spinduolio – DPA junginių ir platinos oktaetilporfirino atliekančio tripletinių eksitonų sensibilizatoriaus funkciją.

Atlikus fotofizikinių parametrų, tokių, kaip šviesos konversijos ir fluorescencijos kvantinio našumo, fluorescencijos, fosforescencijos ir šviesos konversijos kinetikų priklausomybių nuo spinduolio koncentracijos polimero matricoje matavimus nustatyta, kad ties maža spinduolio koncentracija eksitonų difuzija ir energijos pernaša iš sensibilizatoriaus į DPA molekules yra nepakankamai efektyvi našiai konversijai pasiekti, tuo tarpu esant per didelei DPA koncentracijai pasireiškia koncentracinio gesinimo efektas, kuris stipriai sumažina konversijos našuma. Prijungus papildomas alkil grupes prie DPA kamieno galima maždaug dvigubai padidinti spinduolio koncentraciją, lyginant ją su nemodifikuotu DPA, ir stipriai sumažinti tripletinių eksitonų nespindulinį gesinimo kanalą, o tai leidžia pasiekti šviesos konversijos našumą viršijantį 2% kietuose polimeriniuose sluoksniuose.



1 pav. Modifikuotų difenilantraceno junginių struktūrinės formulės.

Reikšminiai žodžiai: šviesos konversija, tripletinių eksitonų anihiliacija, kvantinis našumas.

- S. Baluschev, T. Miteva, V. Yakutkin, G. Nelles, A. Yasuda, and G. Wegner, Phys. Rev. Lett. 97, 143903 (2006).
- [2] A. Monguzzi, R. Tubino, S. Hoseinkhani, M. Campione, and F. Meinardi, Phys. Chem. Chem. Phys. 14, 4322 (2012).
- [3] D. Dzebo, K. Börjesson, V. Gray, K. Moth-Poulsen, and B. Albinsson, J. Phys. Chem. C 120, 23397 (2016).
- [4] S. H. Lee, J. R. Lott, Y. C. Simon, and C. Weder, J. Mat. Chem. C 1, 5142 (2013).

# Greitas, jautrus, plokščias perovskitinis fotodetektorius suformuotas ant periodinės *Pt* elektrodų matricos.

# High-speed, sensitive planar perovskite photodetector based on interdigitated Pt electrodes

Rokas Gegevičius, Marius Franckevičius, Vidas Pakštas, Ramūnas Augulis, Vidmantas Gulbinas Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius rokas.gegevicius@ftmc.lt

Pastaraisiais metais mokslo pasaulyje itin aktyviai tyrinėjamos medžiagos – metalorganiniai perovskitai. Jų pritaikymas saulės energetikos srityje davė stebėtinų rezultatų. Pagaminti itin veiksmingi saulės elementai, kurių efektyvumas viršija 22%. Šių medžiagų savybės, tokios kaip draustinės juostos plotis, sugerties koeficientas, krūvininkų judris yra artimos neorganiniams puslaidininkiams, o tai skatina ieškoti kuo įvairesnio tokių medžiagų pritaikymo.

Naudojamos trys pagrindinės metalorganiniu perovskitų fotodetektorių konfigūracijos: plokščia, vertikali ir lauko fototranzistoriaus. Vertikali konfigūracija pasižymi dideliu jautriu ir greitu momentiniu atsaku, tačiau tokių fotodetektorių pagaminimui reikalingos papildomos elektronų ir skylių transportinės medžiagos. Lauko fototranzistoriaus konfigūracija pasižymi dar geresniais jautrumo parametrais, bet gamybos procedūra nepalyginamai sudėtingesnė. Plokščios konfigūracijos fotodetektoriai parametrais kol kas savo veikimo nusileidžia sudėtingesnės architektūros prietaisams. Tačiau paprasta jų gamybos technologija reikalaujanti tik dviejų simetriškų kontaktų ir fotoaktyvios medžiagos tarp jų skatina ieškoti būdų leisiančių patobulinti šių prietaisų veikimo parametrus.

Šiame darbe pristatomas plokščios konfigūracijos  $CH_3NH_3PbI_3$  fotodetektorius veikiantis regimojoje spektro dalyje, suformuotas ant komerciškai prieinamos periodiškai išdėstytų elektrodų matricos (1 pav., a). Prietaiso gamybai buvo panaudota modifikuota vieno žingsnio plėvelės liejimo technologija, kuri nereikalauja nei inertinių dujų sąlygų, nei anti – tirpiklio panaudojimo, o taip pat užtikrina homogenišką fotoaktyvios medžiagos struktūrą ant elektrodų matricos (1 pav., b, c).

Tiriant fotodetektoriaus veikimą matuotos voltamperinės charakteristikos, žadinimui naudojant 523 nm bangos ilgio šviesą emituojantį fotodiodą ir keičiant šviesos intensyvumą nuo 1  $\mu$ W/cm<sup>2</sup> iki 330  $\mu$ W/cm<sup>2</sup>. (2 pav., a) Iš gautų rezultatų buvo įvertinti pagrindiniai charakterizavimui fotodetektoriaus naudojami parametrai: prietaiso atsako stipris - 9,2 AW<sup>-1</sup> esant 4V įtampai, išorinis kvantinis našumas – 2179% (2 pav., b), savitoji aptikimo geba - 7,6x1012 Džonsų. Taip pat ištirtas ir pagaminto fotodetektoriaus momentinis atsako laikas, kuris siekia 30 µs.

Gauti rezultatai yra ne tik vieni geriausių lyginant su tokios pat konfigūracijos perovskitiniais fotodetektoriais, bet ir yra palyginami su daug sudėtingesnės vertikalios ar



1 pav. Prietaiso struktūra a) schematinis vaizdas, SEM vaizdai b) iš viršaus, c) skerspjūvis.

lauko fototranzistoriaus architektūros prietaisais. Tai skatina toliau ieškoti būdų plokščios konfigūracijos detektorių veikimo parametrams gerinti, nes dėl savo pagaminimo paprastumo bei žemos kainos jie gali turėti svarų pranašumą galvojant apie alternatyvių prietaisų taikymą bei komercializavimą.





Reikšminiai žodžiai: perovskitas, fotodetektorius.

#### Literatūra

[1] F. P. G. De Arquer, A. Armin, P. Meredith, E. H. Sargent, *Nat. Publ. Gr.* 2017, 1.

#### Nitrilo junginių struktūros įtaka nanoagregatų formavimui ir jų optinėms savybėms

### Impact of nitrile compound structure to nanoaggregate formation and their optical properties

<u>Gintarė Kuksėnaitė<sup>1</sup></u>, Karolis Kazlauskas<sup>1</sup>, Gediminas Kreiza<sup>1</sup>, Arūnas Miasojedovas<sup>1</sup>, Edvinas Radiunas<sup>1</sup>, Paulius Baronas<sup>1</sup>, Aurimas Bieliauskas<sup>2</sup>, Vytautas Getautis<sup>2</sup>, Algirdas Šačkus<sup>2</sup>, Saulius Juršėnas<sup>1</sup>
 <sup>1</sup>Taikomųjų Mokslų Institutas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
 <sup>2</sup>Organinės Chemijos Katedra, Kauno Technologijos Universitetas, K. Donelaičio g. 73, LT-44249 Kaunas gintare.kuksenaite@gmail.lt

Fluorescuojantys organiniai nanodariniai vra patrauklūs dėl savo tinkamumo technologiniams taikymams. Buvo pademonstruota, kad fluorescuojančių nanoagregatų panaudojimas yra tinkamas konstruojant organinius šviestukus, organinius lauko tranzistorius ir kitus optoelektroninius prietaisus. Taip pat, šie dariniai tinkami biologiniam vaizdinimui ir fluorescenciniams jutikliams, kadangi fluorescuojantys organiniai nanoagregatai paprastai formuojami iš persuktos erdvinės struktūros molekulių, kurioms būdingas agregacijos sukeltos fluorescencijos reiškinys. [1]

Šiame darbe ištirti ir aptarti aštuoni nitrilo klasės junginiai su identiškais kamienais, bet skirtingomis funkcinėmis grupėmis (1 pav.). Funkcinės (diheksilo, fenilo, heksilo, butilo) šoninės grupės prijungtos per papildomas deguonies, acetileno, metilo jungtis. Junginių kamiene esanti nitrilo grupė dėl erdvinės sąveikos lemia centrinio fenilo žiedo išsisukimą. Pirazolo funkcinė grupė yra įvesta į junginių kamieną siekiant sustiprinti tarpmolekulinius vandenilinius ryšius bei  $\pi$ - $\pi$ sąveikas, kurios yra svarbios agregatų susidaryme. [2]



1 pav. Tirtų junginių struktūrinė formulė

Šių junginių nanoagregatai buvo formuojami precipitacijos metodu. Tirtos molekulės prastai fluorescuoja mažos koncentracijos tirpaluose (10<sup>-5</sup> mol/L) dėl sparčios nespindulinės relaksacijos, o iš jų suformuotos nanodalelės demonstruoja agregacijos sukeltos fluorescencijos reiškinį - fluorescencijos intensyvumo augimą (2 pav.). Nustatyta, jog siekiant stipresnio agregacijos sukeltos fluorescencijos efekto, reikalinga naudoti fenilo grupes, kurios yra prijungtos trumpomis (viengubomis) jungtimis prie centrinio nitrilo junginio kamieno, o ne ilgas konjuguotas jungtis (pavyzdžiui, acetileno jungtimi prijungta fenilo grupė). Taip pat, pavienių nitrilo molekulių mažam fluorescencijos kvantiniam našumui (≤1%) tirpale didžiausią įtaką daro jų kamieno centrinio fenilo sukamieji virpesiai, sąlygojantys sparčią nespindulinę relaksaciją. Šiame darbe buvo pademonstruota, jog keičiant technologinius parametrus (THF/H2O tūrio proporcijas), galima kontroliuoti nanoagregatu dydį, morfologiją ir kvantinį fluorescencijos našumą.





Reikšminiai žodžiai: nanoagregatai, fluorescuojantys organiniai nanodariniai, agregacijos sukelta fluorescencija, precipitacijos metodas.

- [1] J. Mei, N. L. C. Leung, R. T. K. Kwok, J. W. Y. Lam, ir B. Z. Tang, "Aggregation-Induced Emission: Together We Shine, United We Soar!", Chem. Rev., t. 115, nr. 21, p. 11718–11940, 2015.
- [2] K. Kazlauskas et al., "Morphology and emission tuning in fluorescent nanoparticles based on phenylenediacetonitrile", J. Phys. Chem. C, t. 118, nr. 43, p. 25261–25271, 2014.

# Itin didelį fotosintetinį fotonų srautą generuojantis kietakūnis šviesos šaltinis nitratų redukcijos valdymui augaluose

# Solid-state lighting source producing extra high photosynthetic photon flux for control of nitrate reduction in plants

Algirdas Novičkovas<sup>1</sup>, Akvilė Viršilė<sup>2</sup>, Aušra Brazaitytė<sup>2</sup>, Viktorija Vaštakaitė<sup>2</sup>, Julė Jankauskienė<sup>2</sup>, Jurga Miliauskienė<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Lietuvos agrarinių ir miškų mokslų centro Sodininkystės ir daržininkystės institutas,

Kauno g. 30, LT- 54333 Babtai, Kauno raj.

algirdas.novickovas@tmi.vu.lt

Vidutinis žemės paviršių pasiekiančios saulės fotosintetiškai aktyvios spinduliuotės fotonų srauto tankis (PPFD) yra 2000 µmol·m<sup>-2</sup>·s<sup>-1</sup> (450 W·m<sup>-2</sup>). Lietuvos geografinėje platumoje itin dideliu galima vadinti fotosintetinį fotonų srauto tankį didesnį už 500 µmol·m<sup>-2</sup>·s<sup>-1</sup>. Per pastaruosius 5-8 metus įvyko didelė pažanga augalininkystei skirtu šviesos diodu srityje. Sukurti našūs didelės galios gilios raudonosios (650-670 nm) bei tolimosios raudonosios (730-750 nm) spektro sričių šviesos diodai puslaidininkinių AlInGaP junginių pagrindu, jų gamybą įsisavino dauguma gamintojų. Tai atvėrė galimybes sukurti itin didelį fotosintetinį fotonų srautą generuojančius kietakūnius šviesos šaltinius augalininkystei. Nitratų kiekis augaluose priklauso nuo apšvietimo sąlygų, ypač nuo spinduliuotės srauto dydžio. Šviesa tiesiogiai ir per fotosintezės biocheminius signalus itakoja nitratu metabolizma.

Pranešime pristatomas itin didelį fotosintetinį fotonų srautą generuojantis kietakūnis šviesos šaltinis, skirtas trumpalaikiam žalumyninių daržovių švitinimui prieš derliaus nuėmimą fitotrone – nitratų redukcijos šviesos pagalba augaluose padidinimui.

Šviesos diodai buvo parenkami atsižvelgiant į augalų vystymuisi svarbią šviesos spektrinę sudėtį ir remiantis mūsų daugiamečių tyrimų rezultatais. Buvo pasirinkti šviesos diodai: LED Engin LZ1-00B202 (JAV) mėlynai spektro sričiai, Luxeon Rebel LXM2-PD01-0050 (JAV) raudonai spektro sričiai, Luxeon Rebel LXM3-PD01 (JAV) gilios raudonosios šviesos spektro sričiai ir Cree XPEFAR-L1-0000-00601 (JAV) tolimosios raudonosios šviesos spektro sričiai. Kietakūnį šviesos šaltinį sudaro šviestuvas su šviesos diodais bei maitinimo ir valdymo blokas. Šviestuvo pagrindą sudaro metalinis stovas, ant kurio sumontuotas radiatorius su šoniniais reflektoriais iš lakštinio aliuminio lydinio. Prie radiatoriaus pritvirtintos spausdintinės plokštės su aliuminio pagrindu, ant kurių prilituoti šviesos diodai, bei apsauginis PMMA stiklas. Šviestuve taip pat sumontuoti šviesos diodų apsaugos nuo viršitampio, viršsrovio ir perkaitimo elementai. Šviesos diodai aušinami ventiliatoriais.

Maitinimo ir valdymo blokas sukonstruotas kaip atskiras prietaisas, kuris dviem maitinimo kabeliais sujungiamas su šviestuvu. Valdymas atliekamas per maitinimo kabelius. Valdymo bloke sumontuoti du impulsiniai įtampos šaltiniai, srovės stabilizatoriai, kurie tiekia valdomo stiprio sroves šviestuvo šviesos diodų vienspalvėms grupėms, šviesos diodų grupių srovės matavimo prietaisai bei kitos veikimą ir valdymo funkcijas užtikrinančios elektroninės grandinės.

Keturi reguliuojami srovės stabilizatoriai nepriklausomai valdo atitinkamą vienspalvių šviesos diodų grupę maitinančios srovės stiprį, o tuo pačiu ir grupių spinduliuojamo fotosintetinio srauto tankį. Visu srovės stabilizatorių schemos yra analogiškos, tačiau surinktos atsižvelgiant į stabilizuojamos srovės maksimalia verte, kuri lemia stabilizatoriu aušinimo realizavimo ypatumus. Pradiniame eksperimentų etape naudojamas analoginis šviesos diodų maitinimo srovių valdymas potenciometru ir ampermetru pagalba, tačiau vra realizuota galimybė srovės valdymą vėliau atlikti programiškai su HMI (Human Machine Interface) valdymo paneliu, o per pastarajį - kompiuteriu ar išmaniuoju telefonu, sukūrus reikiamą programinę irangą.

Šviestuvo apšviečiamas plotas – 0,2 m<sup>2</sup>, šviesos diodų naudojama elektrinė galia – iki 350 W, bendra naudojama elektros galia iš tinklo – iki 500 W. Šviesos diodų generuojamo fotosintetinio fotonų srauto vertės pateiktos 1 lentelėje (matuota 28 cm atstumu). Bendras šviestuvo fotosintetinis fotonų srauto tankis siekia 1000  $\mu$ mol·m<sup>-2</sup>·s<sup>-1</sup>, apšvietimo netolygumas – 15 %.

fotosintetinio srau	ito tankis.		
Spektro sritis	$\lambda$ (nm)	Kiekis	PPFD
		(vnt.)	$(\mu mol \cdot m^2 \cdot s^{-1})$

1 lentelė. Šviesos diodų bangos ilgiai, kiekis šviestuve ir

Spekilo situs	$\lambda$ (IIIII)	RICKIS	гггр
		(vnt.)	$(\mu mol \cdot m^2 \cdot s^{-1})$
Mėlyna	455	18	20
Raudona	638	81	350
Gili raudona	662	108	580
Tolimoji	727	0	50
raudona	131	9	50

Buvo sukonstruoti du identiški kietakūniai šviesos šaltiniai. Jie yra naudojami atliekant eksperimentus LAMMC Sodininkystės ir daržininkystės instituto fitotrone.

Pristatomi tyrimai remiami Lietuvos mokslo tarybos (sutarties Nr. MIP-060/2015).

Reikšminiai žodžiai: šviesos diodas, kietakūnis apšvietimas, augalininkystė.

#### Dielektrinės ir feroelektrinės P(VDF-TRFE)/LiNbO<sub>3</sub> kompozitų savybės

# Effect of LiNbO<sub>3</sub> nanofillers on dielectric and ferroeletric properties of P(VDF-TRFE) copolymer based composites

Jaroslavas Belovickis<sup>1</sup>, <u>Vytautas Samulionis</u><sup>1</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup>, Maxim Silibin<sup>2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup>Vilnius National Research University of Electronic Technology, Bld. 5, Pas. 4806, Zelenograd, 124498 Moscow,

Russia

Vytautas.Samulionis@ff.vu.lt

Composites are considered to be any multiphase materials that show a combination of properties of their components. PZT, LiNbO3 and BaTiO3 are one of ingredients that can change the dielectric properties and the ferroelectric properties of polymer based composites [1, 2]. In this work we report on both the dielectric and the ferroelectric properties of the conventional polymer polyvinylidene fluoride trifluoroethylene / (P(VDF-TrFE)) of the composition 70/30 mol% with various concentrations of lithium niobate (LiNbO<sub>3</sub>) fillers. By the means of dielectric spectroscopy it is shown that the dielectric properties may be tuned by varving the volume fraction of the ferroelectric fillers. Although, the dependencies of the dielectric, piezoelectric and ferroelectric properties of these composites on filler volume fraction could not be analyzed so simply by analytical Lichtenecker's model which was used for P(VDF-TrFE) based composites with BPZT fillers. It can be explained by lower value of the dielectic constant of lithium niobate fillers as compared to barium doped lead zirconate fillers.



Fig. 1. Piezoelectric strain coefficients of P(VDF-TrFE) and  $P(VDF-TrFE)/LiNbO_3$  composites at different temperatures.

*Keywords: P*(*VDF-TrFE*), *LiNbO*<sub>3</sub>, *ferroelectricity*, *dielectric spectroscopy*,

#### References

 T.R. Dargaville, M.C. Celina, J.M. Elliott, P.M. Chaplya, G.D. Jones, D.M. Mowery, R.A. Assink, R.L. Clough, J.W. Martin, Characterization, performance and optimization of PVDF as a piezoelectric film for advanced space mirror concepts, Sandia Report, Sandia National Laboratories, 2005, pp. 1-49. [2] M.V. Silibin, J. Belovickis, S. Svirskas, M. Ivanov, J. Banys, A.V. Solnyshkin, S.A. Gavrilov, O.V. Varenyk, A.S. Pusenkova, N. Morozovsky, V.V. Shvartsman, A.N. Morozovska, Polarization reversal in organic-inorganic ferroelectric composites: Modeling and experiment, Appl Phys Lett, 107, pp. (2015).

# CuInP<sub>2</sub>S<sub>6</sub>- sluoksninis feroelektrikas kambario temperatūroje

# CuInP<sub>2</sub>S<sub>6</sub>- Room Temperature Layered Ferroelectric

Alex Belianinov<sup>1</sup>, <u>Andrius Dziaugys<sup>2</sup></u>, Qian He<sup>1</sup>, Petro Maksymovych<sup>1</sup>, Eugene A. Eliseev<sup>3a</sup>, Albina Borisevich<sup>1</sup>, Anna Morozovska<sup>3b</sup>, Juras Banys<sup>2</sup>, Yulian Vysochanskii<sup>4</sup>, Sergey Kalinin<sup>1</sup> <sup>1</sup>The Institute for Functional Imaging of Materials and the Center for Nanophase Materials Sciences, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN 37831 <sup>2</sup> Vilnius University, Vilnius, Lithuania LT-01513 <sup>3a</sup>Institute for Problems of Material Sciences, <sup>3b</sup>Institute of Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine <sup>4</sup> Institute of Solid State Physics and Chemistry, Uzhgorod University, Uzhgorod, Ukraine 88000 <u>andrius.dziaugys@ff.vu.lt</u>

So far the realization of ultrathin ferroic materials has been limited by instability of remnant polarization in 2D structures. At the same time, integration of ferroelectric and 2D electronic functions, as well as ultimate size effects presently faces a challenge of defect-free surfaces and interfaces. Currently most ferroics are 3D crystalline materials, these surfaces have dangling bonds and rich intrinsic and extrinsic defect chemistry impeding the control and coupling across interfaces. An effective solution would be a van-der-Waals crystal with ferroic surface properties, where the energy is and there exists a clear drastically reduced pathway to a 2D material through a simple preparation method such as exfoliation.

Here, we explore the ferroelectric properties of copper indium thiophosphate.  $CuIn_{III}P_2X_6$ , and expound on size effects and presently achievable limits of ferroelectric phase stability. We explore ferroelectric properties of 2-D copper cleaved flakes of indium thiophosphate, CuInP<sub>2</sub>S<sub>6</sub> (CITP), and probe size effects along with limits of ferroelectric phase stability, by Ultra Vacuum ambient and High Scanning Probe Microscopy. CITP belongs to the only material family known to display ferroelectric polarization in a van-der-Waals, layered crystal at room temperature and above. Our measurements directly reveal stable, ferroelectric polarization as evidenced by domain structures (Fig. 1), switchable polarization, and hysteresis loops. We found that at room temperature the domain structure of flakes thicker than 100 nm is similar to the cleaved bulk surfaces, whereas below 50 nm polarization disappears. We ascribe this behavior to a well-known instability of polarization due to depolarization field. Furthermore, polarization switching at high bias is also associated with ionic mobility, as evidenced both by macroscopic measurements and by formation of surface damage under the tip at a bias of 4 V likely due to copper reduction. Mobile Cu ions may therefore also contribute to internal



Fig. 1 Ambient Band Excitation PFM, 5x5um

screening mechanisms. The existence of stable polarization in a van-der-Waals crystal naturally points toward new strategies for ultimate scaling of polar materials, quasi-2D and single-layer materials with advanced and non-linear dielectric properties that are presently not found in any members of the growing "graphene family."

*Keywords: 2D crystals; Atomic force microscopy; ferroelectricity; layered materials* 

### Tvarkių Ag nanokubų masyvų formavimas ir tyrimas

# Formation and Investigation of Regular Ag Nanocube Arrays

<u>Mindaugas Juodėnas</u><sup>1</sup>, Tomas Tamulevičius<sup>1</sup>, Svajūnas Korsakas<sup>1</sup>, Joel Henzie<sup>2</sup>, Sigitas Tamulevičius<sup>1</sup> <sup>1</sup>Institute of Materials Science of Kaunas University of Technology, K. Baršausko St. 59, LT-51423 Kaunas, Lithuania <sup>2</sup>International Center for Materials Nanoarchitectonics, National Institute for Materials Science, 1-1 Namiki, Ibaraki 305-0044, Tsukuba, Japan

mindaugas.juodenas@ktu.lt

Α high-throughput, high-yield formation of well-ordered nanoparticle arrays is still an intensively researched topic. One way of achieving high spatial reproducibility and regularity of nanostructures is by using deposition on pre-structured templates [1]. One of the most prominent techniques to deposit nanoparticles on such substrates is capillary force assisted assembly (CAPA) [2]. Specifically engineered nanoparticles can exhibit properties useful in photonic, biomedical and energy applications [3]. Briefly, CAPA process can be described as a combined evaporation induced flux and capillary force confinement effect that produces conditions where nanoparticles can be trapped into predefined positions, even controlling their orientation (Figure 1).



Figure 1. Graphical representation of the CAPA process (not to scale)

Here we present our most recent achievements in nanoparticle deposition research area. Dynamics of the assembly yield was investigated, specifically during the beginning of a deposition. Recently we investigated this process using fluorescent 270 nm sized polystyrene beads and image analysis and found its dependencies on process parameters, i.e. substrate translation velocity and temperature [4]. We demonstrate that the same tendencies obeyed when silver nanocubes were deposited into hexagonally arranged pits on a PDMS template. During the deposition, various transitional states of the assembly yield development could be achieved, leading to a change of the concentration of nanocubes in the accumulation region near the assembly zone therefore influencing the number of particles per trap. Resulting nearly 100% deposition yield assemblies (at least 1 particle per trap) demonstrated different colors of scattered light in the dark field microscopy images. SEM inspection and optical spectroscopy measurements were performed. Number of particles per trap as well as particle to particle spacing had a direct influence on the scattered light properties. Therefore, the optical response of different nanocube configurations were modeled employing the Finite Element Method (FEM) (Figure 2). Experimental and modeling results showed good correlation as well as an applicable representation of the assembly yield transition investigation and plausible applications for structural coloring.



Figure 2. FEM model of 4 nm spaced 80 nm edge length Ag nanocubes. Gray mesh represents the nanocube geometry and the contour plot represents the time average of scattered EM energy density

#### Keywords: CAPA, nanocubes, plasmonics

#### References

- [1] R. Hughes et al., Nanotechnology 28 282002 (2017)
- [2] L. Malaquin et al., Langmuir 23 11513-21 (2007)
- [3] D. J. de Aberasturi et al., Advanced Optical Materials 3 602-17 (2015)
- [4] D. Virganavičius et al., Appl. Surf. Sci. 406 136-43 (2017)

# Fizikiniai procesai kvantinėje duobėje

#### Insights into nitrogen doped diamond micro-nano dot

Nerijus Karalius<sup>1,2</sup>, Vytautas Lapeika<sup>2</sup>, Virginijus Bukauskas<sup>3</sup>, Jelena Tamulienė<sup>4</sup>, Wouter H. Roos<sup>5</sup>, Laima Plėšnienė<sup>6</sup>,

Vitalij Kovalevskij<sup>7</sup>, Amir Fahmi<sup>8</sup>, Marius Franckevičius<sup>3</sup>, Loreta Rastenienė<sup>2</sup>, Augustinas Kulbickas<sup>2</sup>, Rimantas

Vaišnoras<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius

<sup>2</sup>Lietuvos edukologijos universitetas, Studentų g. 39, 08106 Vilnius

<sup>3</sup>Vilniaus universitetas, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

<sup>4</sup>Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

<sup>5</sup>Molecular Biophysics laboratory of Zernike Institute of Groningen University, Nijenborgh 4, 9747 AG Groningen, The

Netherlands

<sup>6</sup>Nacionalinis vėžio institutas, Santariškių g. 1, 08660 Vilnius

<sup>7</sup>Vilniaus universitetas, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

<sup>8</sup>Materials Science, Rhein-Waal University of Applied Sciences, Nollenburgerweg 115, D-46446 Emmerich, Germany

nerijus.karalius@ff.vu.lt

Single nitrogen defects created on diamond surface due to their unique size-dependent optical properties, have been as a good candidate as bio-electrodes or for molecular imaging of the cancered cells [1,2,3]. In this report, single nitrogen defects by low energy and by high energy proton irradiation were created, after theoretical and experimental study of this implanted surface was performed. By irradiation process one carbon atom is removed from diamond lattice and nitrogen atom is replaced in this position. Structural and morphological studies by AFM and HRTEM reveal non-heterogeneity of the destroyed diamond surface. During bombardment process to the (001) diamond surface size-dependent dots from different proton energy power were observed.

For nitrogen ions implanted into diamond with low energies few nanometers size dots were registered by HRTEM. As the ion energy increases to the MeV range or until 10 MeV micro-nano dots recorded as result broadening of the ion-implanted volume (see Fig. 1.).

Fig. 1. Image of nitrogen doped diamond surface.

This occurs due to the multiple collisions of the moving protons with the carbon atoms perpendicular to the (001) diamond plane and quantitatively is defined as the square root of the variance of the ion distribution. Response of the I-V electrical signal insight dot and close to the dot differs. The voltage drops mainly across the less-conducting barrier. Registered the current changes in the *I-V* characteristics appear as pronounced steps, the so-called Coulomb staircase [2] what demonstrate quantum nature of the dot. The current steps  $\Delta I$  occur at voltage intervals  $\Delta V \approx e/C$ . This agree with measured capacity C results.

The strong red florescence spectra in the dot center were detected when fluorescence images were acquired on confocal laser scanning microscope. Irradiated damaged surface consisting from nanodiamonds with specific nitrogen replacement in lattice was simulated theoretically. Low-energy irradiation could be used with spatial accuracy in the nanometer range for nanoscale ion implantation. In this case, however small amount of nitrogen ions was implanted and ions come to rest in close proximity to the surface, at a depth of a few nanometers. High-energy proton irradiation till 10 MeV implants more nitrogen ions but with damaged diamond surface.

Fig. 2. High resolution TEM image of nitrogen doped

Key words: nitrogen defect, diamond, quantum dot, Coulomb blockade.

#### References

diamond dot center.

- [1] M. Aramesh, O. Shimoni, K. Fox, T.J. Karle, A. Lohrmann, K. Ostrikov, S. Prawer, and J. Cervenka, Nanoscale, 7, 5998-6006, (2015).
- [2] K. Merchant and S. K. Sarkar, IEEE J. Sel. Topics Quantum Electron, 22, 235-245, (2016).
- S. R. Hemelaar, A. Nagl, F. Bigot, M. Rodriquez Garcia, M.P. de Vries, M. Chipaux, and R. Schirhagl, Microchimica Acta, 184(4), 1001-1009, (2017).

#### Mikrobangų spinduliuotės plačiajuosčio absorberio tobulinimas

### The development of carbon nanotubes based broadband absorber of microwave radiation

Darya Meisak<sup>1</sup>, Dzmitry Bychanok<sup>2</sup>, Jan Macutkevic<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Research Institute for Nuclear Ploblems BSU, Bobruiskaya st. 11, 220030 Minsk dariameysak@gmail.com

In present work, the carbon nanotube-based composites are considered for their potential use as the broadband radar absorbers in Ka-band (26-37GHz). The considered composites have a filler concentration above the percolation threshold, thus they possess a macroscopic conductivity, as well as the pronounced dispersion of the dielectric permittivity [1].

When considering a normally incident electromagnetic wave on a plane parallel layer of composite located on the metallic substrate, one may write the reflection amplitude as follows[2-3]:

$$S_{11}(\lambda,\tau,\varepsilon) = \frac{-k_z (\exp[2i\pi_{2z}]-1)+k_{2z} (1+\exp[2i\pi_{2z}])}{k_z (1-\exp[2i\pi_{2z}])+k_{2z} (1+\exp[2i\pi_{2z}])},$$
(1)

with

$$k_{z} = \frac{\pi}{\lambda a} \sqrt{4a^{2} - \lambda^{2}}, k_{2z} = \frac{\pi}{\lambda a} \sqrt{4aa^{2} - \lambda^{2}}, \qquad (2)$$

where  $\tau$  is the thickness of the composite, *a* the width of the waveguide (set to 7.2 mm),  $\lambda = c/\nu$  the wavelength, *c* the vacuum light velocity, *v* the frequency, and  $\varepsilon = \varepsilon' + \varepsilon''$  the complex (relative) permittivity. From Eq. (1), it is easy to calculate the absorption coefficient as  $A = 1 - S_{11}^2$ .

Analysis of Eq. (1) shows that the absorption coefficient, and thus the absorption maxima are strongly dependent on the frequency, thus it is impossible to develop a broadband absorber unless one uses dispersive materials. The easiest way of obtaining the dispersive materials is the use of the conductive inclusions in the composite [3]. Dispersion of the dielectric permittivity allows for the significant broadening of the absorption peak. For a composite on a metallic substrate, the absorption in free space was theoretically predicted to be 97-100% in the entire Ka-band region [4].

The commercially available epoxy resin (ED-22) and multiwall carbon nanotubes were used in the manufacturing process as a matrix and filler respectively.

The microwave measurements were conducted with the use of the scalar network analyzer ELMIKAR2-208R [2]. All the measurements took place in the  $7.2 \times 3.4$ mm waveguide system, and the only considered mode was H<sub>10</sub>.

Fig. 1 shows the experimental data of absorption coefficient A of the 1.12mm thick composite material with 1.5% wt. filler concentration placed on the metallic substrate inside the waveguide. The predicted absorption in free space are also presented in Fig. 1.



Fig. 1. Measured A absorption coefficient for 1.12 mm-thick composite with 1.5% wt. MWCNTs inside the waveguide and expected A absorption for 1.20 mm-thick composite in free space

As it can be seen from Fig. 1, the above-mentioned composites when studied in the waveguide, have their absorption coefficient in the range 84-100% for the entire Ka-band region.

These results show, that the carbon-nanotube-based composites with 1.5% wt filler concentration may be potentially used as the effective microwave absorbers in the 26-37GHz frequency range.

Keywords: Multiwall carbon nanotubes, dispersive materials, electromagnetic response of composites in microwave.

#### References

- [1] K. Gaylor, Materials Research Labs Ascot Vale (Australia, 1989).
- [2] D.S. Bychanok, G.V. Gorokhov, D.N. Meisak et al., Prog. In Elect. R. 66, 77-85 (2016).
- [3] D.S. Bychanok, S. Li et al., Appl. Phys. Lett. 108, 013701 (2016).
- [4] D.S. Bychanok, G.V. Gorokhov, D.N. Meisak et al., Prog. In Elect. R. 53, 9-16 (2017).

### Tiesioginė grafeno sintezė ant dielektrinių ir puslaidininkinių pagrindų

#### Direct graphene synthesis on dielectric and semiconductor substrates

Rimantas Gudaitis, Andrius Vasiliauskas, Šarūnas Meškinis

Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas sarunas.meskinis@ktu.lt

Dvimatė (2D) nanomedžiaga grafenas susilaukė didelio mokslininkų dėmesio dėl labai įdomių savybių tokių kaip milžiniškas elektronų ir skylių judris (iki 350000 cm<sup>2</sup> V<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>), lankstumas, skaidrumas, cheminis inertiškumas [1]. Grafenas - tai 0 eV draustinių energijų tarpo monosluoksnis. Tai ES Grafeno platformos lyderį prof. Ferrari verčia abejoti grafeno kaip puslaidininkio ateitimi (pranešimas EMRS 2015 konferencijoje). Tačiau neseniai parodyta, kad grafenas yra puiki Šokio kontakto medžiaga [2]. Tai sudaro prielaidas kitokiam grafeno taikymui puslaidininkiniuose prietaisuose. Monosluoksnyje nėra laisvųjų krūvininkų sklaidos problemos, todėl visi fotogeneruoti krūvio nešėjai sėkmingai pasiekia potencialo barjerą reikiamu kampu, nėra atspindimi ir patenka i puslaidininki. Taip galima pagaminti fotojutikli daug jautresni nei IR fotojutikliai su metaliniais Šotkio kontaktais [3].

Grafeno Šotkio kontaktai ant Si formuojami pernešimo būdu. Grafenas užauginamas ant Cu ar Ni folijos arba ekstrafoliuojamas, o paskui perkeliamas ant galutinio pagrindo [4]. Tai ilga ir komplikuota technologija, labai apsunkinanti grafeno/Si kontakto savybių kontrolę. Neseniai parodyta, kad grafeno sluoksnį galima tiesiogiai užauginti ant dielektrinių arba puslaidininkinių pagrindų [5]. Tačiau kol kas šios technologijos yra užuomazgoje. Dauguma atvejų grafenas augintas ant dielektrikų [5]. Todėl šiame darbe atlikti tiesioginio grafeno auginimo ant silicio bei silicio dioksido eksperimentai. Tirta užaugintų nanosluoksnių struktūra.

Šiame darbe grafeno tiesioginės sintezės eksperimentai atlikti naudojant mikrobange plazma aktyvuotą cheminį nusodinimą iš garų fazės. Sintezei naudotos metano dujos. Auginimui naudoti monokristalinio Si(100) ir silicio padengto terminio oksidavimo būdu suformuoto SiO<sub>2</sub> pagrindai. Palyginimui grafenas mikrobange plazma aktyvuoto cheminio nusodinimo iš garų fazės būdu sintezuotas ant vario folijos. Užaugintų nanosluoksnių struktūra tirta Raman'o sklaidos spektroskopijos bei atominių jėgų mikroskopijos būdais.

Auginant grafeną mikrobange plazma aktyvuoto cheminio nusodinimo iš garų fazės būdu ant vario folijos nustatyta, kad sintezuoto grafeno struktūrai didelę įtaką turi vario folijos paviršiaus morfologija. Įvairūs vario folijos paviršiaus netobulumai skatina defektų susidarymą grafene, kuris pasireiškia žymiu Raman'o sklaidos spektros D smailės intensyvumo padidėjimu. Anglies sluoksnio, mikrobange plazma aktyvuoto cheminio nusodinimo iš garų fazės būdu tiesiogiai sintezuoto ant SiO<sub>2</sub>, Raman'o sklaidos spektras pavaizduotas 1 pav. Šalia grafenui būdingos 2D smailės matyti D, G ir D+G smailės. [6] toks Raman'o sklaidos spektro pobūdis aiškintas nanometrinių matmenų (80-100 nm) grafeno domenų susidarymu. Mūsų darbe atliktas tyrimas atominių jėgų mikroskopu patvirtino tokių grafeno nanodomenų susidarymą. Tai, kad 2D smailės intensyvumas daug mažesnis nei G smailės rodo, kad susidarė daugiasluoksnis grafenas. Didelis santykinis D smailės intensyvumas rodo didelį defektų kiekį nusodintuose nanografeno sluoksniuose. Sluoksnių, mikrobange plazma aktyvuoto cheminio nusodinimo iš garų fazės būdu tiesiogiai sintezuotų ant Si, struktūra buvo panaši.



1 pav. Nanografeno tiesioginės sintezės būdu užauginto ant SiO<sub>2</sub>, Raman'o sklaidos spektrai.

Apibendrinant, šiame darbe mikrobange plazma aktyvuoto ceminio nusodinimo iš garų fazės būdu ant silicio dioksido ir silicio pagrindų buvo tiesiogiai nusodintas daugiasluoksnis grafenas. Tiesiogiai sintezuotas grafenas susidėjo iš atskirų 80-100 nm dydžio domenų. Ateityje planuojama šiuos sluoksnius išbandyti kaip Šotkio kontakto elektrodą ir sugėriklį Si infraraudonosios spinduliuotės fotojutikliuose.

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

- [1] L. Banszerus et al. Science Advances 1, e1500222 (2015).
- [2] C.-C. Chen, M. Aykol, C.-C. Chang, A. F. J. Levi, and S. B. Cronin, Nano Letters 11, 1863–1867 (2011).
- [3] F. H. L. Koppens et al. Nature Nanotechnology 9, 780-792 (2014).
- [4] S. J. Haigh et al. Nature Materials 11, 764–767 (2012).
- [5] M. Li, Advanced Science **3**, 1600003 (2016).
- [6] G. Kalita et al. RSC Advances 2, 3225–3230 (2012).

#### Kompozitų su trgilicinsulfato ir grafeno nanodalelėmis dielektrinės savybės

#### Dielectric properties of composites with triglicinsulphate and graphene

<u>A.Plyushch</u><sup>1</sup>, J. Macutkevic<sup>1</sup>, V. Samulionis<sup>1</sup>, J. Banys<sup>1</sup>, Dz. Bychanok<sup>2</sup>, P. Kuzhir<sup>2</sup>, V. Fierro<sup>3</sup>, A. Celzard<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup> Institute for Nuclear Problems, Belarus State University, Bobruiskaya 11

Minsk, 220030, Belarus

<sup>3</sup> IJL–UMR Université de Lorraine–CNRS, 7198, ENSTIB, 27 Rue Philippe Seguin, CS 60036, 88026 Epinal Cédex,

France

artyom.plyushch@ff.vu.lt

Triglycine sulfate (TGS) is one of the most well-studied ferroelectric crystal with a second-order ferroelectric phase transition close to 322 K [1]. The ferroelectric phase transition is of order-disorder type with strong dielectric dispersion in the microwave frequency range and a typical critical slowing-down effect [2]. On the other hand, composites with nanocarbon inclusions is one of the most intensively studied field of material science. It was therefore assumed to be interesting to investigate the possibility of designing composite materials based on epoxy resin filled with both TGS particles and conductive inclusions. The main idea of the study is to find possible synergy effect in three-phase composite materials.

Monocrystals of triglycine sulfate (TGS) were first dissolved in distilled water and, after evaporation, TGS powder was obtained which was further ground in an agate mortar. Graphite nanoplatelets (GNP) were obtained by a succession of grinding and sonication steps applied to a suspension of exfoliated graphite in cyclohexane. Isopropyl alcohol was used as dispersion medium for sonication of TGS and GNP suspensions. During the sonication process, the alcohol was exchanged by epoxy resin (Buehler EpoThin Resin) and, after complete evaporation of alcohol, a curing agent was added. Dielectric properties were investigated in wide frequency (20 Hz - 30 GHz) and temperature (300 -400 K) ranges, piezoelectric properties were studied by an automatic computer-controlled pulse-echo method [3].

Epoxy resin filled with TGS particles (30 wt.%) and with different addition of GNP present a second-order ferroelectric phase transition close to 322 K. The addition of GNP particles to TGS composites was found to substantially improve dielectric and piezoelectric properties of composites due to a strong synergy effect.

In particular, composites with only TGS particles does not show piezoelectric response without the external polarization field (see Fig. 1). Addition 0.5 wt. % of GNP significantly changes the situation: the weak piezoelectric response appears even without the external electric field. And finally, adding 1 wt. % of GNP provides the strong piezoelectric response without the external polarization. Even more, the difference between responses with and without the polarisation decreases with increasing GNP amount. Dielectric permittivity demonstrates a maximum close to T=322 K for all studied composites is typical for ferroelectric phase in pure TGS crystals, except the substantially lower dielectric permittivity peak value due to the random orientation of TGS crystalites. Addition of GNP also does not affect the temperature of the phase transition. However, it increases the absolute value of the complex permittivity in wide temperature range, especially the real part, while the shape of curves does not changes strongly. This should be also considered as the strong synergy effect between TGS particles and grafene.





Keywords: Dielectric properties, piezoelectric properties,

#### References

- [1] R. M. Hill and S. K. Ichiki, Phys. Rev. 128, 1140 (1962).
- [2] R. Blinc, S. Detoni, M. Pintar, Phys. Rev. 124, 1036 (1961).
- [3] V. Samulionis, V. Valevicius, J. Banys and A. Brilingas, Journal de Physique IV 6, 405 (1996).

#### Nanodeimantų su papildoma –N=N-Ph-COOH grupe įmagnetėjimo tyrimai ab initio metodais

# Ab initio study of the suspensibility of nanodiamonds with additinal groups

Jelena Tamulienė<sup>1</sup>, Jonas Šarlauskas<sup>2</sup>, Audrius Šileikis<sup>,3</sup>, Rimas Vaišnoras<sup>4</sup>, Nerijus Karalius<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

<sup>21</sup>Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Saulėtekio al. 7, LT-10222 Vilnius

<sup>3</sup>Vilniaus universitetas, Medicinos fakultetas, M.K. Čiurlionio g. 21, LT-03101 Vilnius

<sup>4</sup>Lietuvos edukologijos universitetas, Studentų g. 39, LT-08106 Vilnius

<sup>5</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

Jelena.Tamuliene@tfai.vu.lt

Pastaraisiais dešimtmečiais didelis dėmesys yra skiriamas įvairių anglies darinių, tokių kaip anglies nanovamzdeliai, grafenas, fulerenai, nanodeimantai ir kt., tyrimams. Minėtuose dariniuose, nepaisant to kad jie yra sudaryti iš tokių pačių atomų, susidaro  $sp^2$  ( pvz. grafito dariniai), sp<sup>3</sup> (pvz. deimantai) ar abi šios jungtys. Tai viena iš priežasčių, kodėl anglies darinių savybės yra skirtingos ir, kaip pasekmė, juos galima panaudoti įvairiose srityse, tokiose kaip biomedicina, elektronika, energetika, vaizdinimas ir t.t. Nanodeimantai, kaip tyrimo objektai, yra įdomūs dar ir tuo, kad jie netoksiški, gali būti/yra panaudojami kaip vaistų nešėjai ir tuo pačiu metu jie yra aukšto biostabilumo fluorescenciniai žymekliai, skirti ląstelių stebėjimui. Tačiau ju panaudojimas vaizdinimui neinvaziniu būdu šiuo metu yra ribotas.

Mūsų ankstesni tyrimai, parodė, kad nanodeimantų su defektais, inkorporuotais N atomais, ir be įmagnetėjimas priklauso nuo išorinio elektrinio lauko stiprio: kai išorinio elektrinio lauko nėra, tirti nanodeimantai yra diamagnetikai, o juos "patalpinus" į išorinį elektrinį lauką, kurio stipris didėja – šios dalelės tampa paramagnetikais, o jų įmagnetėjimas didėja. Šių rezultatų pagrindu buvo padaryta prielaida, kad nanodeimantai gali būti naudojami kaip kontrastų agentai magnetinio rezonanso vaizdinimo įrenginiuose (MRI).

Neseniai David E.J. Waddington ir kt. atliko 4-125 nm dydžio nanodeimantu tyrimus tam, kad nustatyti, ar nanodeimantai gali būti panaudoti vaizdinimui [1]. Gauti rezultatai parodė, kad 125 nm nanodeimantai nesiagreguoja dejonizuotame vandenyje maždaug 30 dienų, ir, kas yra ypatingai svarbu, gali būti naudojami vaizdinimui. Vaizdo kontrastas, minėto darbo autorių nuomone, nanodeimantu - vandens tirpaluose atsiranda dėl Overhauser efekto: dalinai poliarizuoti nanodeimantu elektronu sukiniai veikiami yra magnetiniu lauku; rezonansas įvyksta tada, kai nanodeimantų elektronų sukinių ir aplinkos <sup>1</sup>H atomų svyravimo dažniai sutampa.

Tad kyla klausimas, ar *Overhauser* efektas bus stebimas ir tada, kai nanodeimantai bus funkcionalizuoti specifinėmis grupėmis, pavyzdžiui, savitai reguojančios į auglius, t.y. kyla klausimas ar funkcionalizuotuose nanodeimatuose bus dalinai poliarizuotų elektronų sukinių. Norėdami atsakyti į šį klausimą atlikome nanodeimanto su –N=N-Ph-COOH grupe preliminarius įmagnetėjimo tyrimus taikant B3LYP/6-31G metodą (Pav. 1).



 pav. Tiriamo nanodeimanto su papildoma grupe vaizdas. C atomai – pilkos spalvos, O- raudonos, Nmelsvos, H – gelsvos.

Atliktuose preliminariuose tyrimuose papildomos grupės padėtis nanodeimante yra parinkta atsižvelgus į erdvinius efektus ir nėra atsižvelgta į galimus struktūros pakitimus dėl elektrinio lauko poveikio.



2 pav. Tiriamo nanodeimanto su ir be papildomos grupės įmagnetėjimo priklausomybė nuo išorinio elektrinio lauko.

Remiantis gautais rezultatais (Pav. 2) galime teigti, kad ir funkcionalizuotuose nanodeimantuose bus pakankamai poliarizuotų elektronų sukinių, tad jie taip pat galės būti naudojami kaip kontrastų agentai MRI.

Reikšminiai žodžiai: nanodeimantas, įmagnetėjimas, ab initio

#### Literatūra

 D. E. J. Waddington et al. Nanoscale Physics (cond-mat.mes-hall) arXiv:1611.05167vl [cond-mat.mes-hall]

# Pikosekundinių procesų impulsinės elektronikos elementuose skaičiavimo metodai

# Methods of calculation of picosecond processes in pulsed electronics elements

Ferdinandas Vaitiekūnas Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT- 10222 Vilnius ferdinandasv@gmail.com

Impulsinės elektronikos [1] elementuose dominuoja tokie fizikiniai reiškiniai: diodo bazėje sukaupto krūvio išsiurbimo, tranzistorinis, lauko, griūtinės jonizacijos, rezonansinio tuneliavimo, fotonų generacijos, sinchrofotoelektroninis.

Vieningą matematinį modelį sudaro dvimatės tolydumo, Puasono, srovės ir kitos lygtys [2, 3]. Jis skirtas diodų, bipolinių ir lauko tranzistorių dariniuose su įvairia jų geometrija bei priemaišų koncentracija, su skirtingais legiravimo profiliais ir kontaktų išdėstymu pernašos procesų skaičiavimui. Šių vienmačių lygčių su griūtinės jonizacijos įvertinimu sistema, modeliuoja plazmos susidarymo mechanizmus TRAPATT diodų bazėje [4].

Impulsinių virpesių generavimą rezonatoriuje su TRAPATT diodu, įvertinus rezonatoriaus ir diodo bei generuojamų virpesių parametrus, skaičiuoja sintezės uždavinys [5].

Pagal bipolinio tranzistoriaus fizikinę ekvivalentinę schemą sudaryta integro-diferencialinių lygčių sistema. Ji sprendžiama grandinių teorijos metodais ir skaičiuoja pereinamuosius procesus, įvertina induktyvumų, talpų bei varžų įtaką [6].

Pernašos metodą sudaro lygčių sistema, kuri išreiškia impulsinio proceso dinamiką bipolinio ir lauko tranzistoriaus kanale. Skaičiuojami decimetrinėse bangose generuojamų impulsinių virpesių parametrai, kurie priklauso nuo darinio ribinio dažnio reikšmių jo lauke, darbo režimo, reaktyvumų ir kitų faktorių. [7].

Paskaičiuota tunelinių diodų ir supergardelių veikimo sparta, padaryta šio parametro skirtumų palyginamoji analizė [8]. Sprendžiant Šredingerio lygtį išskirtos supergardelės energinės minizonos. Pasiūlytos supergardelės su įvairiu potencinių duobių ir barjerų periodiškumu, tai praplėtė jų funkcionalumą [9].

Sprendžiant greičio lygtis išanalizuota lazerių moduliacija įtampos, srovės, galios ir decimetrinių bangų signalu. Optimizuoti lazerio suderinimo su bangolaidžiu būdai, gautos minimalaus atspindžio sąlygos [10].

Aptikta trumpų šviesos impulsų generacija, lazeriui dirbant subharmoninio rezonanso režimu. Sprendžiant greičio lygčių sistemą pateiktas fizikinių procesų išaiškinimas ir generavimo sąlygos [11].

Lazerio, veikiančio išoriniame rezonatoriuje, analizė parodė, kad generuojamų šviesos impulsų pasikartojimo dažnis priklauso nuo moduliacijos dažnio santykio su rezonatoriaus rezonansiniu dažniu [12]. Balansinių lygčių modeliu įvertinta pernašos metu fotonų bei elektronų tankio dinamika, išaiškinti femtosekundinių impulsų formavimo mechanizmai. Į lazerį arba į elektriškai veikiantį darinį, impulsinio įjungimo proceso metu, iš šalutinio lazerio, sinchroniškai su moduliuojančios srovės signalu, injektuojamas nepalyginamai mažesnės trukmės šviesos impulsas. Greičio lygčių sistema aprašo optimalias tokio pereinamojo proceso sąlygas [13]. Elektrinis darinys vienu metu gali būti moduliuojamas elektros srove ir šviesos srautu.

Vidinis foto efektas elektriniame darinyje padidina srovės tankį ir elemento ribinį dažnį. Darinio geba generuoti impulsinius virpesius su maksimaliu pasikartojimo dažniu skaičiuojama formule [14].

Skaičiavimai vienodais metodais leidžia tiksliau palyginti dariniuose veikiančių skirtingų dominuojančių fizikinių mechanizmų impulsines savybes. Šių metodų visuma sudaro impulsinės elektronikos teoriją, kuri patvirtina ir išaiškina eksperimentiškai stebimus impulsinius procesus decimetrinėse bangose.

#### Reikšminiai žodžiai: impulsinis procesas, modelis.

#### Literatūra

[1]. F. Vaitiekūnas. Impuls ele. // 39th LNCF. (2011).
 [2]. Ф.К. Вайтекунас, В.И. Жалкаускас, Г.П. Казакявичене. Электронная техника, сер. 2. Полупровод-вые приборы. Москва, 1 (180), 8–15 (1986).
 [3]. Ф. Вайтекунас, В. Жалкаускас, Г. Казакявичене. Л. физ. сбор. 32(4), 578–588 (1992).
 [4]. Vaitiekūnas, J. Vyšniauskas. Electron. Letters. V. 7 (21), 822–824 (1981).

[5]. Ф. Вайтекунас, Г. Дземида, Ю. Вишняускас и др. Теория оптимальных решений. Инст. Мат. Киберн. АН Лит. ССР, Вильнюс, (1984) 10, 77–97.
[6]. Ф.К. Вайтекунас, Ч.И. Павасарис, А.М. Власкин, А.А. Волгин. Материалы 1 Республ. н.-т. конф. по генерир. иьпульсов. Вильн., 1978, 85–88.
[7]. F. Vaitiekūnas. // 40th LNCF. (Viln. 2013). – 38.

[8]. Ф.К. Вайтекунас, К.В. Суткус. Электрон. тех. Серия полупродниковые приборы. **1**, 3–6 (1979).

[9]. Ф.К. Вайтекунас, К.В. Суткус. Осциллогракие методы измерений. III Всесо. конф., М., 1979.
[10]. Ф. Вайтекунас, С. Куршялис. Лит. физическ. сборник. **31** (6), 441–452 (1991).

[11]. Ф. Вайтекунас, С. Куршялис, С. Стасявичюс. Лит. физический сборник, **30** (6), 732–741 (1990).
[12]. S. Kuršelis, K. Sutkus, G. Šimėnas, F. Vaitiekūnas. ISRAMT'89 Beijing, China, (1989), 21.
[13]. Ф.К. Вайтекунас, С.К. Куршялис, Г.Ф. Вайтекунас. Электронная тех., серия Лазерная техника и оптоэлектроника. **1**, 46–50 (1987).
[14]. F. Vaitiekūnas.// 41th LNCF. (V, 2015), 207.

#### Ultragarso tyrimai PDMS/OLC kompozituose

#### Ultrasonic studies of onion-like carbons/polydimethysiloxane composites

<u>Vytautas Samulionis</u><sup>1</sup>, Jan Macutkevic<sup>1</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup>, Jaroslavas Belovickis<sup>1</sup>, Olga Shenderova<sup>2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>International Technology Center, Raleigh, NC 27715, USA vytautas.samulionis@ff.vu.lt

The integration of nanoparticles into a polymer matrix allows both properties from nanoparticles material and polymer to be combined, thus obtaining advanced polymer nanocomposites. In particular, additional nanoscale fillers such as carbon nanotubes or onion-like carbons, can be used to reinforce polymer matrices [1]. Their high specific surface area enables the formation of a large interphase in the composite and strong filler-matrix interactions. Earlier we exploited ultrasonic spectroscopy to study and evaluate relaxation processes that govern elastomer nano- composite elastic behaviour and to depict variation of these processes because of the change of the inorganic nanofiller content in polyurea elastomers [2,3]. For their elastic properties and low glass transition temperature polydimethysiloxane (PDMS) with onion-like carbons (OLCs) composites are similar to those of polyurea elastomer/ inorganic nanotube composites. Earlier we studied electric and dielectric properties of PDMS/OLC composites [4]. In this contribution we present temperature measurements of longitudinal ultrasonic velocity and attenuation in PDMS with OLCs nanofilers. The OLC nanocarbon dependant attenuation maxima together with velocity dispersion have been observed above the glass transition temperature. The addition of OLC nanocarbons resulted in the increase of ultrasonic velocity in low temperature region and the increase of attenuation at room temperature.

The OLC samples which we used to fabricate OLC/PDSM composites were prepared according procedure described in [3]. NDs with appropriative aggregate size were heated in vacuum ( $10^{-2}$  Torr) at 850 °C for 3 h providing the production of OLC with corresponding size of aggregates. It should be mentioned that primary OLC aggregates can form larger secondary aggregates which may be disintegrated in appropriate solvent or polymer matrix characterized by high wetting ability of graphene-like surface of OLC. The polydimethylsiloxane, Sylgard, was purchased from Dow-Corning as a two part material. When forming PDMS-OLC composites, an intermediate solvent was employed that served as a dispersion medium for the nanoparticles prior to mixing with the polymer matrix. The ultrasonic studies were carried out by means of automatic computer controlled pulse-echo ultrasonic system as described in [3]. The large dynamic range and large input ultrasonic power allowed the large ultrasonic attenuation values to be measured. The procedure of attenuation and velocity measurement in polymer composites was presented earlier [2].

The temperature dependencies of longitudinal ultrasonic attenuation at 10 MHz frequency for PDMS/OLC composites are shown in Fig. 1. All these graphs show that there are attenuation peaks characteristic of relaxation phenomena. Low temperature onset of the attenuation correlate with the glass transition temperature  $T_g \approx 140 - 160$  K, known from earlier publications [4, 5]. Maxima of ultrasonic attenuation slightly shift towards higher temperatures after addition of OLC nanoinclusions and it is possibly related to the shift of  $T_g$ . The peak also widens with increasing of nanoparticle concentration.



Fig. 1. Temperature dependencies of ultrasonic attenuation in composites PDMS /OLC: 1 - 0, 2 - 5, 3 - 10 wt% of OLC nanoinclusions

*Keywords: ultrasonic attenuation; OLC nanoparticles; polymer nanocomposites* 

#### References

- D. Mari, R. Shaller, "Mechanical spectroscopy of carbon nanotube reinforced ABS," Materials Science and Engineering, A 521, pp. 255-288, 2009.
- [2] V. Samulionis, J. Banys, A. Sanches-Ferrer and R. Mezzenga, "Ultra-sonic characterization of dynamic elastic properties of polymer compo-sites with inorganic nanotubes," Sensors & Transducers, 12, pp. 66-70, 2011.
- [3] V. Samulionis, S. Svirskas, J. Banys, A. Sánchez-Ferrer, S. Jecg Chin, T. McNally, "Ultrasonic properties of composites of polymers and inorganic nanoparticles," Phys. Status Solidi, A 210, pp. 2348-2352, 2013.
- [4] J. Macutkevic, I. Kranauskaite, J. Banys, S. Moseenkov, V. Kuznetsov, and O. Shenderova, "Metal-insulator transition and size dependent electrical percolation in onion-like carbon/polydimethylsiloxane compo-sites," J. Appl. Phys., 115, pp. 213702-213709, 2014.
- [5] D. Fragiadakis, P. Pissis, "Glass transition and segmental dynamics in polydimethylsiloxane/silica nanocomposites studied by various techniques," J. Non-Crystalline Solids, 353, pp. 4344-4352, 2007.

# Šiluminio ciklavimo įtaka feroelektriniam faziniam virsmui PVDF-TrFE pagrindu pagamintuose kompozituose: ultragarsinės spektroskopijos tyrimas

# Effect of thermal cycling on ferroelectric phase transition of PVDF-TrFE based composites as investigated by ultrasonic spectroscopy

Jaroslavas Belovickis<sup>1</sup>, <u>Vytautas Samulionis<sup>1</sup></u>, Jūras Banys<sup>1</sup>, Maxim Silibin<sup>2</sup>, Alexander Solnyshkin<sup>2, 3</sup>, Artem Sysa<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup>National Research University of Electronic Technology, Bld. 5, Pas. 4806, Zelenograd, 124498 Moscow, Russia

<sup>3</sup>Tver State University, 170100 Tver, Russia

Vytautas.Samulionis@ff.vu.lt

Piezoelectric polymeric materials have a number of advantages in comparison with electroceramics, e.g., good mechanical flexibility, processability and robustness, lightness and the main one- low cost of production, whereas ceramics are brittle and difficult to process [1, 2]. Therefore, in this research work we focus our attention on copolymer of vinilidenefluoride and trifluoroethilene (PVDF-TrFE) based piezoelectric composites. P(VDF-TrFE) copolymer with a molar ration of 70/30 mol. % provides a reversible ferroelectric state with a high degree of crystallinity (more than 80 %) that is responsible for its strong electromechanical properties [1, 3-7].

In this paper we report on the investigation of ultrasonic wave attenuation, velocity and ultrasonically induced piezoelectric voltage in P(VDF-TrFE) composites with fillers of conductive carbon nanotubes (CNT). Measurements have been carried out over a temperature range from 300 K to 390 K using ultrasonic automatic pulse-echo method.

The temperature dependencies of ultrasonic velocity and attenuation showed anomalies attributed to Curie temperature  $T_c$  and a structural relaxation also known as  $\beta$  - relaxation process. Large thermal hystereses have been observed in both temperature dependences of ultrasonic velocity and piezovoltage. Moreover, temperature dependences of ultrasonic velocity and attenuation were shown to be sensitive to thermal cycling over ferroelectric transition (Fig. 1).

The existence of the shoulder in the ultrasonic loss curve may be explained by the proposed elsewhere [8-10] existence of a crystalline intermediate  $\gamma$  phase or a recrystallization of an anchored amorphous phase and thus a change of the amount of the imperfect crystallites on cooling after it was annealed near  $T_{\rm m}$ . Our measurements have confirmed results observed by [8-10] when the shoulder disappears in beforehand annealed samples. As seen from Figure 1 the shoulder observed on heating (Fig. 1a) vanishes after the sample was annealed near 415 K (Fig. 1b).



Fig. 1. Temperature dependences of the ultrasonic attenuation in 1 vol. % P(VDF-TrFE)/CNT composite (a) before and (b) after annealing near 415 K. Arrows show direction of temperature variation

Keywords: Annealing, thermal cycling, P(VDF-TrFE)

#### References

- T. R. Dargaville, M. C. Celina, J. M. Elliott, P. M. Chaplya, G. D. Jones, D. M. Mowery, R. A. Assink, R. L. Clough and J. W. Martin, *Characterization, Performance and Optimization of PVDF as a Piezoelectric Film for Advanced Space Mirror Concepts* (Sandia National Laboratories, United States, 2005).
- [2] M. V. Silibin A. V. Solnyshkin, D. A. Kiselev, A. N. Morozovska, E. A. Eliseev, S. A. Gavrilov, M. D. Malinkovich, D. C. Lupascu and V. V. Shvartsman, Journal of Applied Physics, J. Appl. Phys. **114**, 144102 (2013).
- [3] T. Furukawa, Ferroelectric properties of vinylidene fluoride copolymers, Phase Transitions, 18, 143-211 (1989).
- [4] K. Tashiro, Crystal structure and phase transition of PVDF and related copolymers (Ferroelectric polymers, New York 1995).
- [5] R. A. Pethrick, *The applications of ferroelectric polymers* (Applications of ferroelectric polymers, Glasgow, 1988).
- [6] H. Kawai, Japanese Journal of Applied Physics, 8, 975 (1969).
- [7] J. F. Legrand, J. Lajzerowicz, B. Berge, P. Delzenne, F. Macchi, C. Bourgaux-Leonard, A. Wicker and J. K. Kruger, Ferroelectrics, 78, 151 (1988).
- [8] R. L. Moreira, P. Saint-Gregoire, M. Lopez and M. Latour, Journal of Polymer Science: Part B: Polymer Physics, 27,709 (1989).
- [9] R. L. Moreira, P. Saint-Gregoire and M. Latour, Phase Transitions, 14, 243 (1989).
- [10]R. L. Moreira, R. Almairac and M. Latour, J. Phys.: Condens. Matter, I, 4273 (1989).

#### Medžiaginiai ryšiai klasikinėje ir reliatyvistinėje optikoje GA požiūriu

#### Classical and relativistic constitutive relations from GA point of view

Adolfas Dargys

<sup>1</sup>Nacionalinis fizinių ir technologijos mokslų centras, Puslaidininkių fizikos institutas, Saulėtekio 3, LT-10257 Vilnius

adolfas.dargys@ftmc.lt

Diferencialinių Maxwell'o lygčių sistema nėra pilna. Ją reikia papildyti medžiaginiais ryšiais tarp pirminių laukų (**E**, **B**), elektrinio ir magnetinio, ir medžiagoje indukuotų antrinių laukų (**D**, **H**) [1]. Ryšiai gali nusakyti medžiagos inertiškumą ar netiesiškumą ją žadinant, histerezę ir pan. Paprasčiausiu atveju manoma, kad ryšis tarp pirminių laukų (**E**, **B**) ir indukuotų medžiagoje (**D**, **H**) yra momentinis. Klasikinės elektrodinamikos atveju medžiaginiai ryšiai tokiais atvejais užrašomi per 3 × 3 matricas  $\bar{\varepsilon}, \bar{\gamma}, \bar{\beta}$  ir  $\bar{\mu}^{-1}$  [1]:

$$\mathbf{D} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathbf{E} + \bar{\boldsymbol{\gamma}} \mathbf{B},$$

$$\mathbf{H} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{E} + \bar{\boldsymbol{\tau}}^{-1} \mathbf{D}$$
(1)

 $\mathbf{H} = \bar{\boldsymbol{\beta}} \mathbf{E} + \bar{\boldsymbol{\mu}}^{-1} \mathbf{B}.$ 

Kyla klausimas, koks bendriausias tokių matricų pavidalas ir kaip jas konstruoti tuo atveju, kai medžiaga yra homogeniška. Į tokius klausimus leidžia atsakyti Cliffordo (*Cl*) geometrinė algebra (GA): klasikiniu atveju  $Cl_{3,0}$ , o reliatyvistiniu atveju Cl<sub>1,3</sub>, kur apatiniai indeksai nusako erdvės (medžiagos) metriką [2]. Mūsų darbuose [2, 3] parodyta, kad elektromagnetinių bangų sklidimo terpėse savybės tokiais atvejais seka iš algebrų  $Cl_{3,0}$  ir  $Cl_{1,3}$  vidinės sandaros, ir todėl medžiaginiai ryšiai, t. y. matricų  $\bar{\varepsilon}, \bar{\gamma}, \bar{\beta}$  ir  $\bar{\mu}^{-1}$  pavidalas, seka iš GA multivektorių simetrijos savybių. Konkrečiai PT simetrija įskaityta  $Cl_{3,0}$ , o erdvėlaikio CPT simetrija –  $Cl_{1,3}$  algebroje. Darbe [3] pateikti bendri medžiagų saryšiai klasikinės elektrodinamikos atvejui, t. y. kai terpės greitis yra žymiai mažesnis už šviesos greitį, o straipsniuose [4, 5] – reliatyvistinei elektrodinamikai.

Reliatyvistinės eletrodinamikos atveju turime vienintelį lauką, taip vadinamą Faraday'aus lauką medžiagoje  $\mathcal{F} = \mathcal{E} + \mathcal{B}$ . Geometrinėje algebroje laukai nusakomi bivektoriais (orientuotomis plokštumos). Plokštumos dydis nusako lauko stiprį, o plokštumos orientacija – lauko kryptį. Matuojami elektrinis  $\mathcal{E}$  ir magnetinis  $\mathcal{B}$  laukai priklauso nuo stebėtojo. Invariantu išlieka tik ju suma  $\mathcal{F}$ . Panašiai užrašomas sužadintas medžiagoje laukas,  $\mathcal{G} = \mathcal{D} + \mathcal{H} = \chi(\mathcal{F})$ , kur  $\chi$  yra apibendrinta medžiagos juta, kurią galima susieti su medžiaginėmis matricomis  $\bar{\varepsilon}$ ,  $\bar{\gamma}, \bar{\beta}$  ir  $\bar{\mu}^{-1}$  formulėje (1). Bivektoriai  $\mathcal{F}$  ir  $\mathcal{G}$  turi po šešias dedamąsias, todėl medžiagos sąryšius yra patogu nusakyti  $6 \times 6$  matricomos:

$$\begin{bmatrix} \mathcal{D} \\ \mathcal{H} \end{bmatrix} = \left( \begin{vmatrix} \frac{\text{Diel.Birefr.}}{\text{Fizeau}} & \frac{\text{Fizeau}}{\text{Magn.Birefr.}} \end{vmatrix} + \\ \frac{\frac{\text{Diel.Faraday}}{\text{Opt. Aktyv.}} & \frac{\text{Opt. Aktyv.}}{\text{Magn.Faraday}} \end{vmatrix} \right) \begin{bmatrix} \mathcal{E} \\ \mathcal{B} \end{vmatrix}.$$
(2)

Į kiekvieną iš  $3 \times 3$  blokų įrašėmę po vieną jam charakteringą reiškinį (Fizeau  $\rightarrow$  Fizeau reiškinys, Birefr.  $\rightarrow$  dvejopas lūžimas, Opt. Aktyv. → optinis aktyvumas). Bivektoriai  $\mathcal{E}$  ir  $\mathcal{D}$  yra erdviškieji, o bivektoriai  $\mathcal{B}$  ir  $\mathcal{H}$  – laikiškieji, t. y. jų kvadratai yra atitinkamai teigiami/neigiami dydžiai. Taigi  $6 \times 6$  matrica, kurios pirmoji dalis yra simetrinė, o antroji antisimetrinė, galima interpretuoti kaip bendrojo bivektoriaus  $\mathcal{F}$  transformaciją į kitą bivektorių. Kadangi Cl<sub>1,3</sub> algebra automatiškai įskaito erdvėlaikio simetrijos savybes (CPT simetriją) per involiucijas, atskiri matricų blokai (2) formulėje taip pat pasižymi tam tikromis simetrijos savybėmis, kurios ir nusako mežiagos reliatyvistinius sąryšius. Atitinkamos  $6 \times 6$  matricos (jų yra penkios) yra suskaičiuotos su geometrine Cliffordo algebra ir pateiktos straipsniuose [4, 5], kurias sudedant įvairiomis kombinacijomis galima gauti pačius įvairiausius medžiaginius sąryšius, kurie seka iš relatyvistinės elektrodinamikos. Iš pateiktų visų galimų reliatyvistinių 6×6 matricų galima sukonstruoti klasikinio pavidalo (1) sąryšius, kurie dažniausiai ir nauduojami bangų sklidimo analizėje. Smulkiai tokie sąryšiai išrašyti [5] darbe. Juos galima palyginti su klasikinės elektrodinamikos ryšiais [3], iš kur seka, kad klasikinė elektrodinamika įskaito ne visus bangų sklidimo reiškinius.

Reikšminiai žodžiai: medžiaginiai sąryšiai, elektromagnetinių bangų sklidimas, Cliffordo algebra

- [1] M. Born and E. Wolf, 1999 *Principles of Optics* (Cambridge, CUP), 1999.
- [2] A. Dargys, A. Acus, 2015 Cliffordo geometrinė algebra ir jos taikymai (UAB Petro ofsetas), 2015.
- [3] A. Dargys, Lith. J. Phys. 55, 92-99 (2015)
- [4] A. Dargys, Opt. Comm. 354, 259-65 (2015)
- [5] A. Dargys, arXiv:1609:04261v1, [physics.class-ph] (2016)

#### Puslaidininkių jonizacijos potencialo matavimas Geigerio-Miulerio skaitikliu

# Measurement of the ionization potential of semiconductors by the Geiger-Müller counter

Jonas Nekrasovas, Valentas Gaidelis, Vygintas Jankauskas, Egidijus Kamarauskas, Mindaugas Viliūnas Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius jonasnekrasovas@gmail.com

Elektronikos prietaisų kūrimui ir jiems skirtų medžiagų charakterizavimui yra svarbūs jonizacijos potencialo (Ip) matavimai, kurie paprastai yra atliekami elektronų fotoemisijos ore metodu [1]. Fotosrovės matavimų elektrometrais riba sudaro  $10^{-16}$ - $10^{-15}$  A ir dažnai būna nepakankama, todėl buvo išbandytas laisvų elektronų skaičiavimu paremtas būdas. Tam tikslui buvo pagaminta atvira jonizacijos celė, veikianti pagal Geigerio-Miulerio skaitiklio principus ore ar kitose dujose. Prietaisas registruoja pavienius laisvus elektronus, jo jautrio riba yra apie vieną elektroną per sekundę, t. y. ~0,1 aA. Buvo sukurtas veikiantis jonizacijos potencialo matavimo stendas, susidedantis iš monochromatoriaus su deuterio šviesos šaltiniu ir matavimo kameros, kurioje patalpinamas tiriamasis bandinys ir minėta celė. Kai bandinys apšviečiamas UV šviesa, iš jo emituojami elektronai, jie patenka į celę ir sukelia dujų molekulių jonizaciją, įvyksta trumpi išlydžiai, per celę teka srovės impulsai. Šie impulsai skaičiuojami specialaus valdiklio, sujungto su pagalba. Vieno impulso kompiuteriu. atsiradima sąlygoja vienas fotoemituotas elektronas.

Buvo atlikta daug matavimu, kuriu metu nustatyti organinių puslaidininkių jonizacijos potencialai. 1 pav. pavaizduoti transportinės medžiagos TPD (N,N'diphenyl-N,N'-bis(3-methylphenyl)-(1,1'-biphenyl)-4,4'diamine) tyrimo rezultatai. Gauti impulsų skaičiai N buvo koreguoti izoenergetinio spektro atvejui  $(N^*)$ , po to naudojant centruotų skirtumų metodą skaitmeniškai rasta N\* išvestinė kvantų energijos atžvilgiu D. Gauta Ip vertė 5,24 eV yra kiek mažesnė už anksčiau elektrometro pagalba nustatyta 5,37 eV vertę. Skirtumas gali būti paaiškintas tuo, kad skyrėsi medžiagos pavyzdžiai, be to, matuojant senu metodu paklaida didina tamsinio signalo svyravimai ir silpnas signalas ilgabangėje srityje. Įvairių medžiagų tyrimai naujuoju stendu parodė, kad silpna fotoemisija vyksta ir tada, kai šviesos kvantų energija žymiai mažesnė už Ip. 2 pav. atvaizduota impulsų skaičiaus priklausomybė nuo kvantų energijos 4-6 eV srityje. Vidutinis impulsų skaičius tamsoje buvo apie 3 impulsus per 5 s. Šie rezultatai rodo, kad fotoemisija gali vykti ne tiktai iš pagrindinės, bet galbūt ir iš sužadintų būsenų.

Apskritai šis naujas *Ip* matavimo būdas yra žymiai operatyvesnis, nei matuojant elektrometru, nes dėka didesnio jautrio gali būti žymiai trumpesnės matavimo trukmės. Be to, didesnis jautris leidžia tirti tokias medžiagas, kurioms anksčiau fotoemisijos signalas tradiciniu būdu buvo nedetektuojamas.



1 pav. TPD jonizacijos potencialo radimas



2 pav. Ilgabangė fotoemisija iš TPD

Reikšminiai žodžiai: jonizacijos potencialas, srovės impulsai, organiniai puslaidininkiai.

#### Literatūra

 E. Miyamoto, Y. Yamaguchi, M. Yokoyama, Ionization Potential of Organic Pigment Film by Photoelectron Emission, Electrophotography, 28, 364-370 (1989).

#### TDCR įrenginio stabilumo tyrimas

### Stability analysis of the TDCR instrument

Lina Gaigalaitė, Arūnas Gudelis

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

lina.gaigalaite@ftmc.lt

Sprendžiant radionuklidų metrologijos uždavinius svarbu tiksliai nustatyti radionuklidų aktyvumą. Precizinis aktyvumo matavimas vadinamas radionuklidų standartizavimu. Nacionalinių metrologijos institutų (NMI) laboratorijose elektrono pagavos ir beta skilimo būdais skylančių radionuklidų standartizavimui naudojamas trigubų ir dvigubų sutapčių santykių metodas TDCR – nuo *Triple-to-Double Coincidence Ratio (angl.).* Šį metodą pirmieji aprašė Lenkijos mokslininkai [1].

Prancūzijos NMI sukūrė elektroninį modulį MAC3, jo pagalba analizuojami trijų fotodaugintuvų užregistruoti impulsai, mėginyje atsirandantys dėl radioaktyviojo preparato sąveikos su skystojo scintiliatoriaus molekulėmis [2].

Valstybiniame mokslinių tyrimų institute Fizinių ir technologijos mokslų centre (FTMC) yra naudojamas TDCR įrenginys, jo korpusas pagamintas EMPOS firmos, o formuojantysis stiprintuvas HUB ir 10 kanalų skaitiklis CNT10 – BQM firmos (abi – Čekijos). Įrenginio sandara pavaizduota 1 pav.



1 pav. TDCR skaitiklio sandaros schema.

Įrenginyje yra Burle firmos 8850 modelio fotodaugintuvai, jie pozicionuoti 120 laipsnių kampu vienas kito atžvilgiu, tarp jų dedamas mėginys standartiniame 20 ml tūrio matavimo indelyje. Matavimai valdomi specialia programine iranga CNT10, ji leidžia pasirinkti matavimų kartojimų skaičių ir duomenis, išsaugo kurie vėliau analizuojami TDCRB-02, TDCR07c arba TDCR2014 programomis. yra TDCR irenginys svarbus eksperimentinis instrumentas radionuklidų metrologijoje, naudojantis pirmini metoda [3].

2013 m. vykusio trišalio palyginimo tarp FTMC, LNE-LNHB (Prancūzija) ir VNIIM (Rusija) metu FTMC gauto rezultato palyginimo neapibrėžtis standartizuojant tritį buvo ne didesnė kaip 0,38 % – toks buvo FTMC rezultato poslinkis nuo pamatinės vertės, susietos su tarptautinio palyginimo CCRI(II)-K2.H-3 2009 verte [4].

Iki 2017 m. TDCR skaitikliu FTMC yra standartizuoti šie radionuklidai: <sup>3</sup>H, <sup>14</sup>C, <sup>36</sup>Cl, <sup>63</sup>Ni, <sup>90</sup>Sr, <sup>99</sup>Tc ir <sup>129</sup>I. Standartizuotų radionuklidų tirpalai panaudoti ypač žemo fono scintiliacinių tirpalų skaitiklio Quantulus-1220 kalibravimui [5].

Standartizuojant tritį atliktas TDCR įrenginio stabilumo tyrimas, jo metu stebėta, kaip matavimo rezultatas atsikartoja esant skirtingam, pakankamai trumpam laikotarpiui tarp atskirų matavimų, lyginant su radionuklido pusėjimo trukme 12,312 (25) m.; matavimų rezultatų neapibrėžtis laikyta lygi trišalio palyginimo neapibrėžties vertei (0,38 %). Gauti rezultatai taip pat palyginti su pamatinės medžiagos gamintojo sertifikato vertėmis, kurios pakoreguotos matavimo datai, įvertinus savitojo aktyvumo sumažėjimą dėl radioaktyviojo skilimo (1 lentelė).

1 lentelė. Tričio standartizavimo rezultatai.

Matavimo data	Savitasis aktyvumas (kBq/g)	
	TDCR	Sertifikatas
2016-05-02	$24,571 \pm 0,094$	$25,057 \pm 0,401$
2016-05-17	$24,517 \pm 0,094$	$24,999 \pm 0,400$
2016-11-17	$23,896 \pm 0,091$	$24,300 \pm 0,378$

Nustatyta, kad, atsižvelgiant į neapibrėžtis, eksperimentinės TDCR vertės gerai atitinka sertifikato vertes, o TDCR skaitikliu užtikrinamas aukštas matavimų stabilumas.

Reikšminiai žodžiai: radionuklidų standartizavimas, pirminis metodas, TDCR įrenginys, tritis.

- R. Broda, K. Pochwalski, and T. Radoszewski, Appl. Radiat. Isot. 39, 159 (1988).
- [2] J. Bouchard and P. Cassette, Appl. Radiat. Isot. 52, 669 (2000).
- [3] R. Broda, P. Cassette, and K. Kossert, Metrologia 44, S36 (2007).
- [4] P. Cassette, P. Butkus, A. Gudelis, and T. Shilnikova, Appl. Radiat. Isot. 109, 41 (2016).
- [5] A. Gudelis, L. Gaigalaité, I. Gorina, and P. Butkus, Book of abstracts, 103 (2017), 21<sup>st</sup> International Conference on Radionuclide Metrology, Buenos Aires, Argentina, 15<sup>th</sup> -19<sup>th</sup> May 2017.

### Paslėptų mažos sugerties objektų aptikimas naudojant terahercinę spinduliuotę

# **Detection of Low Absorption Hidden Objects Using Terahertz Radiation**

Domas Jokubauskis, Linas Minkevičius, Dalius Seliuta, Irmantas Kašalynas, Gintaras Valušis Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius domas.jokubauskis@ftmc.lt

Terahercų (THz) dažnių ruožas tarp 100 GHz ir 10 THz yra intensyviai naudojamas vaizdinimui saugumo [1], medicinos [2] ir kokybės kontrolės [3] taikymuose. Dažniausiai tokiems taikymams yra naudojama Rentgeno spinduliuotė, kuri dėl fotono didelės energijos yra jonizuojanti ir pavojinga sveikatai. Dėl to yra reikalingi novatoriški sveikatai nepavojingi sprendimai, kurie leistų aptikti objektus, pagamintus iš mažo tankio medžiagų tokių kaip tekstilė, plastikai, popierius ir kt. Tokiems taikymams siūlome naudoti THz spinduliuotę, galinčią prasiskverbti per šviesai nelaidžias medžiagas, kurios gali būti skaidrios Rentgeno spinduliams.

Šiame darbe mes parodome THz spinduliuotės taikymą paslėptų medvilniniame audinyje objektų, pagamintų iš mažo ir didelio tankio medžiagų, vaizdinimui.

THz vaizdinimo eksperimento stendas sudarytas iš grandininio dažnio daugiklio THz šaltinio, didelio tankio polietileno (HDPE) lęšių, keleto neašinių parabolinių veidrodžių, elektroniškai valdomų X-Y ašių ir titano mikro-bolometrinis [4] arba InGaAs peteliškės formos diodo THz detektorius. Bandiniai buvo patalpinti į fokusuojančio veidrodžio židinį pralaidumo matavimui. Prasiskverbusi per bandinį spinduliuotė buvo registruojama THz detektoriumi, kurio išėjimo signalas buvo stiprinamas sinchroniniu stiprintuvu.

Plieninė geležtė, poodinė adata ir nitrilinės pirštinės gabalėlis buvo pasirinkti kaip bandiniai, kurie buvo įvynioti į medvilninį audinį su skirtingu sluoksnių skaičiumi. Terahercų vaizdai buvo užrašyti 100 GHz, 300 GHz ir 600 GHz dažniuose pralaidumo geometrijoje.

Teraherciniame vaizde galima išskirti paslėptų objektų kontūrus. Vaizdinimo rezoliucija leidžia išskirti 0,6 mm diametro adatą ir atskiri nitrilinės pirštinės sluoksnius. Tai leidžia teigti, jog THz vaizdinimas gali būti naudojamas mažos sugerties objektų aptikimui medvilniniame audinyje.



1 pav. Vaizdas, užfiksuotas naudojant 0.6 THz šaltinį, sudarytas iš plieninės geležtės, adatos ir nitrilinės pirštinės gabalėlis tarp 6 medvilninio audinio sluoksnių.

Reikšminiai žodžiai: terahercų, THz, vaizdinimas.

- M. Kowalski, N. Palka, M. Piszczek, and M. Szustakowski, Hidden object detection system based on fusion of THz and VIS images, Acta Phys. Pol. A, 124, 490–493, (2013).
- [2] F. Wahaia, I. Kasalynas, D. Seliuta et al., Study of paraffinembedded colon cancer tissue using terahertz spectroscopy, J. Mol. Struct., 1079, 448-453, (2015).
- [3] M. Dohi et al., Application of terahertz pulse imaging as PAT tool for non-destructive evaluation of film-coated tablets under different manufacturing conditions, J. Pharm. Biomed. Anal., 119, 104–113, (2016).
- [4] J. Trontelj and A. Sešek, Micro-machined millimeter wave sensor array for FM radar application, Proc. SPIE 8544, Millimetre Wave and Terahertz Sensors and Technology V, 8544, 85440G (2012).

#### Puslaidininkinio tetrodo taikymas sparčiosiose skaitmeninėse schemose

# Semiconductor tetrode application in high-speed digital circuits

Česlovas Pavasaris

Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Radiofizikos katedra, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius ceslovas.pavasaris@ff.vu.lt

Puslaidininkinis tetrodas (PT) pasižymi visa eile savybių [1], leidžiančių jį taikyti įvairios paskirties elektroniniuose įtaisuose [2], tame tarpe skaitmeninių elementų schemose. 1 pav. parodyta "pusiau sumatoriaus" (PS) schema su PT [3], atliekančios dviejų bitų "a"-{0; 1} ir "b"-{0; 1} sumos "c" = "a" + "b" operaciją, čia "c"-{0; 1}.



1 pav. PS – "pusiau sumatoriaus" principinė schema su PT

PS sumos išėjime  $c = ...0^{\circ}$  – loginis nulis, kai a = b == "1"- loginis vienetas. Todėl PS turi papildomo (keliamojo) bito  $,s^{*}-\{0; 1\}$  pernašos išėjimą s. 1 pav. parodyta PS schema turi dvi galvaniškai išrištas "žemes" –  $\perp$  ir  $\perp$ , ir tai padidina PS funkcines galimybes: veikia su bet kokio poliškumo įėjimuose a ir b vieno bito skaitmeniniais signalais  $,a^{*}-\{0; \pm 1\}$  ir "b"-{0;  $\pm 1$ }; apkrovoje  $R_{a 1}$  – pusiau sumos išėjime c gali formuoti abiejų poliškumų ir bet kokios amplitudės išėjimo skaitmeninį signalą "c"-{0; ±1}; energiją naudojama tik esant loginiui "1" viename iš įėjimų a arba b. PT<sub>1</sub> įjungimo srovė  $I_{BB s 1} < I_{BB s 3, 4}$  – atitinkamos PT<sub>3,4</sub> įjungimo srovės, tekančios tarp bazės išvadų B<sub>1,2</sub> atitinkamuose  $PT_{1, 3, 4}$ .  $PT_5$  įjungimo srovė  $I_{BB s 5}$  tenkina sąlygą:  $I_{\rm o} < I_{\rm BB \ s \ 5} \le 2 \cdot I_{\rm o}$ , čia  $I_{\rm o}$  – srovės šaltinių  $I_{1, 2}$ generuojamos srovės. Esant šioms sąlygoms, kai "a" = =  $,b^{\prime\prime} = ,1^{\prime\prime}$ , pusiau sumos išėjime c turime  $,c^{\prime\prime} = ,0^{\prime\prime}$ , o keliamojo bito pernašos išėjime s - "s" = "1". Visais kitais atvejais  $,s^{\prime\prime} = ,0^{\prime\prime}$ .

2 pav. parodyta pilnojo – daugiaskilčio dvejetainio kodo skaičių "a" ir "b" sumatoriaus blokinė schema su PT [4], atliekančios N skilčių dviejų skaitmeninių signalų "a"-{N;…; 0} ir "b"-{N;…; 0} pilnosios sumos



2 pav. Pilnojo – daugiaskilčio (0–*N*) sudedamų skaičių "*a*"-{*N*;…; 0} ir "*b*"-{*N*;…; 0} sumatoriaus blokinė schema su PT

"s" = "a" + "b" operaciją, čia "s"-{(N + 1);…;0}. Šis sumatorius turi N PS, kuriuose, pradedant PS-2, padaryti du keliamųjų bitų išėjimai, sujungti atitinkamu algoritmu su galutinių PT<sub>s{0-(N+1)}</sub> bazių pirmaisiais išvadais B<sub>1</sub>, kurių antrieji išvadai B<sub>2</sub> sujungti su galvaniškai išrišta antrąja "žeme" ⊥ . PT<sub>s{0-(N+1)}</sub> atitinkamose apkrovose  $R_{a\{0-(N+1)\}}$  turime pilnosios sumos "s" atitinkamų skilčių išėjimus  $s_{\{0-(N+1)\}}$ .

Čia pateiktos sumatorių schemos su PT pasižymi paprastumu, bei mažesnių elementų skaičiumi, palyginus su tranzistorinėmis schemomis. Taip pat PT taikymas garantuoja sumatorių veikos didelę spartą – ventilio delsos laikas  $t_d \le 1$  ns.

Reikšminiai žodžiai: puslaidininkinis tetrodas, dvejetainio kodo skaičių sumatoriai, skaitmeninė impulsinė sparčioji elektronika

- [1] Павасарис Ч. И. Изв. вузов МВ и ССО СССР.
- Радиоэлектроника. Киев, т. 29, No 9, с. 33-38 (1986).
- [2] Pavasaris Č. 41-oji LNFK. Vilnius, p.p.204, 205 (2015).
- [3] А. С. 1676370 (СССР). Пол. реш. от 20.06.1990.
- [4] А. С. 1671038 (СССР). Пол. реш. от 30.07.1990.

#### Terahercų detekcijos AlGaN/GaN tranzistoriuose hidrodinaminis modeliavimas

# Hydrodynamic simulation of terahertz detection in AlGaN/GaN transistors

<u>Juozas Vyšniauskas</u>, Alvydas Lisauskas, Jonas Matukas Vilniaus universitetas, Radiofizikos katedra, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius juozas.vysniauskas@ff.vu.lt

Plazminių bangu rezonansų numatymas [1] submikroniniuose lauko tranzistorių kanaluose stimuliavo taikomuosius darbus terahercu (THz) diapazone gerokai virš standartinių ribinių dažnių. Yra nemažai eksperimentinių [2] ir teorinių darbų [3], įrodančių, kad plazmoninis lyginimas gali būti panaudotas efektyviai THz detekcijai. Nežiūrint to, yra daug neatsakytų klausimų, liečiančių prognozių patikimumą, naudojant egzistuojančius hidrodinaminius modelius realių detektorių tyrimuose.

Šiame darbe yra pateikti THz detekcijos didelio elektronų judrio tranzistoriuose (HEMT) skaitmeninio modeliavimo rezultatai. Buvo naudojamas dvimatis hidrodinaminis (HD) Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>N/GaN HEMT modelis, realizuotas Synopsys TCAD Sentaurus programų pakete. Palyginimui buvo naudotas supaprastintas dreifinis-difuzinis (DD) modelis, atmetant energijos balanso lygtį. AlGaN sluoksnio storis - 20 nm, ištako (S), sklendės (G) ir santako (D) ilgis - 300 nm, S-D atstumas -300 nm, G-D atstumas - 500 nm. AlGaN tarp elektrody padengtas 25 nm Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> pasyvaciniu sluoksniu. Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/AlGaN riboje įvestas  $5 \cdot 10^{13}$  cm<sup>-2</sup> paviršinio tankio donorinis lygmuo (0.4 eV nuo draustinės juostos centro), palaikantis didelį elektronų tankį kanale tarp elektrodų. AlGaN ir GaN sluoksniai nelegiruoti. S ir G sujungta per pastovios įtampos šaltinį U<sub>G</sub>, tarp D ir S įjungtas 50 mV amplitudės kintamos įtampos (0.1-1.0 THz) šaltinis. Detekcijos rezultatas gaunamas vidurkinant santako srovę, praleidus pereinamuosius procesus dviejų pirmųjų periodų metu. Tranzistoriaus jautris THz spinduliuotei buvo skaičiuojamas kaip detektuotos santako srovės santykis su kintamos įtampos šaltinio galia (A/W).

1 pav. pateikti pagrindiniai modeliavimo rezultatai.





Didinant dažnį jautris mažėja. Tai yra siejama su didėjančiais galios nuostoliais kanale tarp elektrodų. Taip pat didėja skirtumas tarp HD ir DD modelių rezultatų. Esant 100 GHz, abu modeliai duoda praktiškai vienodą maksimalų jautrį apie 3.1 A/W prie  $U_G = -2.6$  V. Svarbus rezultatas yra tai, kad HD modelis numato detektuotos srovės ženklo pokytį, viršijus tam tikrą  $U_G$  vertę. Šis efektas, kuris buvo stebėtas eksperimente [4] ir kurį negalima paaiškinti plazmoniniais modeliais, labiau pasireiškia, esant aukštesniems dažniams. 2 pav. parodyta vidutinės elektronų temperatūros priklausomybė kanale nuo  $U_G$ .



2 pav. Vidutinės elektronų temperatūros priklausomybė kanale nuo sklendės įtampos U<sub>G</sub>

Nežiūrint to, kad elektronų temperatūra keičiasi nedaug, jos pasiskirstymas išilgai kanalo duoda papildomą difuzinę srovę, kuri prie  $U_G = 0$  yra dominuojanti, lyginant su plazmoniniu detekcijos sandu.

#### Reikšminiai žodžiai: HEMT, THz, plazmonai, GaN.

- M. Dyakonov, and M. Shur, Detection, mixing, and frequency multiplication of terahertz radiation by two-dimensional electronic fluid, IEEE Trans. Electron. Dev., 43, 380 (1996).
- [2] M. Bauer, R. Venckevičius, I. Kašalynas, S. Boppel, M. Mundt, L. Minkevičius, A. Lisauskas, G. Valušis, V. Krozer, and H. G. Roskos, Antenna-coupled field-effect transistors for multi-spectral terahertz imaging up to 4.25 THz, Optics Express, 22, 19235 (2014).
- [3] S. Rudin, G. Rupper, A. Gutin, and M. Shur, Theory and measurement of plasmonic terahertz detector response to large signals, J. Appl. Phys., 115, 64503 (2014).
- [4] A. Lisauskas, M. Bauer, A. Ramer, K. Ikamas, J. Matukas, S. Chevtchenko, W. Heinrich, V. Krozer, and H. G. Roskos, Terahertz rectification by plasmons and hot carriers in gated 2D electron gases, International Conference on Noise and Fluctuations (ICNF), (Xian: IEEE), pp 1–5 (2015).

#### Silicio griūtinių diodų, naudojamų dalelių detektoriuose, kompiuterinis modeliavimas

# Computer simulation of silicon avalanche diodes for particle detectors

Lukas Dundulis<sup>1</sup>, Juozas Vyšniauskas<sup>1</sup>, Eugenijus Gaubas<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Radiofizikos katedra, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

juozas.vysniauskas@ff.vu.lt

Mažo stiprinimo silicio griūtiniai diodai (LGAD) susilaukia ypatingo dėmesio didelių energijų fizikos srityje dėl geresnių jonizuojančios spinduliuotės detektavimo savybių, nei dabar dalelių greitintuvuose naudojamų pin diodų. LGAD yra panašūs į griūtinius fotodiodus, tačiau dėl tinkamai parinkto  $n^{++}p^+p^-p^{++}$ legiravimo profilio, pasižymi vidutinėmis (2-20) stiprinimo vertėmis ir padidintu signalas/triukšmas santykiu [1]. Tačiau, kaip ir visi fotodetektoriai, veikiami didelės energijos hadronų srauto, laikui bėgant degraduoja. Degradacijos priežastys šiuose dioduose susijusios su didelės energijos dalelės generuojamais defektais, didinančiais tamsinę srovę, ir išmuštais p<sup>+</sup> sluoksnio priemaišiniais atomais, keičiančiais legiravimo profili ir diodo stiprinimo koeficienta [2]. Pagrindiniai šios problemos sprendimo būdai yra tokie: (1)  $p^+$  sluoksnį formuoti epitaksiniu būdu, taip tikintis sumažinti dauginimosi koeficiento kitima, (2) keisti legiravimą kitais III grupės elementais [3].

Literatūroje nėra pakankamos informacijos apie  $p^+$  sluoksnio formuoto epitaksiniu būdu įtaką LGAD veikai. Šiame darbe pateikti silicio LGAD modeliavimo rezultatai:  $n^{++}$  difuzijos nuotolio bei  $p^+$  epitaksinio sluoksnio storio įtaka voltamperinėms charakteristikoms, krūvininkų pasiskirstymo diode bei srovės, indukuojamos išorinėje grandinėje, dinamika, sužadinant diodą optiniu impulsu.

Diodų modeliavimui buvo pasirinktas Synopsys TCAD Sentaurus programų paketas, leidžiantis tirti 2D ir 3D puslaidininkinius darinius. Darbe buvo naudojamas dvimatis difuzinis-dreifinis LGAD modelis. Diodo ilgis  $-50 \mu m$  (pagal x-aši), plotis 5  $\mu m$  (pagal y-aši). Priemaišų tankis priklauso tik nuo x-koordinatės. Diodo legiravimo profilį sudaro p<sup>++</sup> padėklas (ilgis - 2 µm, priemaišų tankis  $-10^{19}$  cm<sup>-3</sup>), silpnai legiruota p<sup>-</sup> sritis (ilgis  $d_{p} = 43 - 45 \ \mu m$ , priemaišų tankis  $-10^{12} \ cm^{-3}$ ), epitaksinis p<sup>+</sup> sluoksnis (ilgis d<sub>p+</sub> = 3 - 5  $\mu$ m, priemaišų tankis – 10<sup>16</sup> cm<sup>-3</sup>), n<sup>++</sup> sritis, suformuota difuzijos būdu (difuzijos ilgis  $D_L = 0.3 - 0.4 \mu m$ , didžiausias priemaišų tankis prie paviršiaus  $-10^{19}$  cm<sup>-3</sup>). Detektuojamos dalelės poveikis modeliuojamas 2 ps trukmės, 870 nm bangos ilgio ir 10<sup>4</sup> W/cm<sup>2</sup> galios optiniu impulsu. Prigeneruotų krūvininkų tankis mažėja eksponentiškai x-ašies kryptimi ir užima 2 µm pagal y-ašį.

Diodo pramušimo įtampa  $U_{pr}$  stipriai priklauso nuo  $n^{++}$  difuzijos ilgio  $D_L$  ir epitaksinio sluoksnio ilgio  $d_{p+}$ . Keičiant šiuos parametrus aukščiau nurodytose ribose,  $U_{pr}$  kinta nuo 55 iki 380 V. Didelę pramušimo įtampą yra sunkiau stabilizuoti, palaikant reikiamą krūvininkų dauginimosi koeficientą. Atlikus tyrimus buvo

pasirinktas  $D_L = 0.3 \ \mu m$  ir  $d_{p_+} = 3.2 \ \mu m$ , užtikrinantis sąlyginai nedidelę  $U_{pr} = 105 \ V$ . Epitaksinio  $p^+$  sluoksnio ilgis buvo parenkamas, atsižvelgiant į tai, kad netoli pramušimo įtampos, kur yra diodo darbo taškas, būtų pilnai nuskurdinta p<sup>-</sup> sritis. Tik tuo atveju pavyksta realizuoti greitą krūvininkų išsiurbimą soties greičiu (apie  $10^7 \ cm/s$ ). Kitaip tiek skylės tiek elektronai juda lėtai ir didelė jų dalis surekombinuoja, nepasiekę elektrodų, o tai mažina krūvio surinkimo efektyvumą – labai svarbų dalelių detektorių parametrą.

Sužadinus diodą optiniu impulsu, atitinkamas srovės impulsas trunka apie 4 ns. Impulsas nemonotoniškas su keletu mažėjančių maksimumų. Didžiausia srovės vertė yra impulso pradžioje, kai vyksta intensyvus krūvininkų dauginimasis aktyvioje srityje. Vėliau didelė dalis elektronų išsiurbiama į n<sup>++</sup> sritį, o skylių - į p<sup>-</sup> sritį, krūvininkų dauginimosi procesas sulėtėja, stebimas srovės minimumas prie t = 0.4 ns. Vėliau įvyksta taip vadinamas antrinis krūvininkų dauginimasis ir srovė vėl išauga iki 0.7 nuo maksimalaus lygio. Tarp t = 1.5 - 2 ns srovė stabilizuojasi, po to eksponentiškai relaksuoja iki atgalinės srovė dydžio. Suintegravus srovės impulsa ir palyginus su atitinkamu srovės integralu be krūvininkų dauginimosi, buvo nustatytas diodo stiprinimo koeficientas lygus 12.

Buvo nagrinėta elektronų ir skylių pasiskirstymo dinamika pereinamųjų procesų metu. Pastebėtas krūvininkų kaupimasis ties epitaksinio sluoksnio kraštu, įtakojantis nemonotonišką srovės impulso formą. Minėtas kaupimasis priklauso nuo legiravimo profilio statumo ties  $p^+$  ir  $p^-$  sričių riba.

#### Padėka

Šis darbas buvo dalinai finansuojamas iš Lietuvos mokslo tarybos fondo projekto LAT 01/2016.

Reikšminiai žodžiai: Silicis, LGAD, Dalelių detektoriai, Krūvininkų griūtinis dauginimasis.

- [1] P. Fernandez-Martinez, D. Flores, V. Greco, S.Hidalgo, G. Pellegrini, D. Quirion, M. Fernandez-Garcia, I. Vila, and G. Kramberger, Low gain avalanche detectors for high energy physics, 2015 10th Spanish Conference on Electron Devices (CDE), pp 1–4 (2015).
- [2] G. Kramberger, M. Baselga, V. Cindro, P. Fernandez-Martinez, D. Flores, Z. Galloway, A. Gorišek, V. Greco, S. Hidalgo, and V. Fadeyev, Radiation effects in low gain avalanche detectors after hadron irradiations, J. Instr., 10, P07006 (2015).
- [3] M. Yamaguchi, A. Khan, T. K. Vu, Y. Ohshita, and T. Abe, Radiation-resistant properties of Ga-doped Si analyzed by DLTS, Physica B: Condensed Matter, 340, 596 (2003).

# Stendinė sesija S4

Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika Biofizika ir medicinos fizika Aplinkos fizika Energetikos fizika ir technologijos Fizikos istorija, terminija, edukologija ir mokslo politika

#### Gama spinduolių sudėties reaktoriaus grafite tyrimas

# Determination of gamma-ray emitters in nuclear reactor graphite

Vladimir Abdulajev, Arūnas Gudelis

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

vladimir.abdulajev@ftmc.lt\_

Branduolinių reaktorių grafito nuklidinės sudėties tyrimas yra ypač aktualus branduolinių jėgainių išmontavimo atžvilgiu. Jis tiesiogiai nustato radioaktyviųjų atliekų tvarkymo technologijų pasirinkimą [1]. Branduolinio reaktoriaus grafitas yra pavojingas radioaktyviųjų atliekų šaltinis, Ignalinos AE esantis apšvitinto grafito kiekis siekia 3400 t [2].

Mūsų tyrimo tikslas buvo nustatyti grafito mėginių nuklidinę sudėtį  $\gamma$ -spektrometriniu metodu ir ištirti jų vienalytiškumą.

Nuklidinę sudėtį įvertinti neardančiosios analizės metodu buvo naudojamas kalibruotas gama spektrometras su gryno germanio detektoriumi (HPGe) su šuliniu [3].

Neardančiosios analizės tyrimui buvo pasirinkti devyni grafito mėginiai, kiekvienas jų buvo padalintas į tris fragmentus.



1 pav. Grafito mėginio Nr. 3379 gama spektras.

Atlikus kokybinę spektro analizę (1 pav.) buvo aptikti šie radionuklidai (skliausteliuose nurodyta radionuklido pusėjimo trukmė; šuolio būdingoji spinduliuotės energija ir gama kvantų emisijos išeiga, tenkanti 100 skilimų): <sup>155</sup>Eu (4,753 m.; 86,548 keV, 30,7; 105,31 keV, 21,1), <sup>133</sup>Ba (10,539 m.; 356,01 keV, 62,05; 80,998 keV, 33,31), <sup>134</sup>Cs (2,0644 m.; 604,72 keV, 97,63; 795,86 keV, 85,47), <sup>137</sup>Cs (30,05 m.; 661,66 keV, 84,99), <sup>154</sup>Eu (8,601 m.; 123,07 keV, 40,4; 723,30 keV, 20,05; 1004,7 keV, 17,86; 1274,4 keV, 34,9) ir <sup>60</sup>Co (5,2711 m.; 1173,2 keV, 99,85; 1332,5 keV, 99,98).

Atliekant kiekybinę analizę operuota santykiniais vienetais, buvo tiriamas mėginių gama spektrų visiškos sugerties smailių intensyvumas, neatliekant korekcijos dėl sutapčių efekto. Mėginių #3379 ir #7795 kiekybinės analizės rezultatai yra pateikti 2 ir 3 pav.



2 pav. Grafito mėginio Nr. 3379 fragmentų gama spektrų visiškos sugerties smailių intensyvumas.

Pastebima, kad dominuojantis radionuklidas visuose devyniuose mėginiuose yra aktyvacijos produktas <sup>60</sup>Co. Taip pat pastebimas gama spinduolių pasiskirstymo nevienalytiškumas mėginiuose, rodantis, kad skirtinguose to paties mėginio fragmentuose radionuklidų aktyvumo santykis (pvz., <sup>154</sup>Eu/<sup>60</sup>Co, <sup>155</sup>Eu/<sup>60</sup>Co) nėra pastovus dydis.

Mėginyje #7795, kurio tirti fragmentai #77957, #77958 ir #77958, buvo aptiktas tik <sup>60</sup>Co (3 pav.).



3 pav. Grafito mėginio Nr. 7795 fragmentų gama spektrų visiškos sugerties smailių intensyvumas.

*Reikšminiai žodžiai: branduolinis reaktorius, apšvitintas grafitas, gama spinduoliai, <sup>60</sup>Co.* 

- D. Ancius, D. Ridikas, V. Remeikis, A. Plukis, R. Plukienė, and M. Cometto, Nukleonika 50, 113 (2005).
- [2] K. Almenas, A. Kaliatka, E. Ušpuras, *Ignalina RBMK-1500 A source book* (Kaunas, 1998).
- [3] A. Gudelis, V. Remeikis, A. Plukis, and D. Lukauskas, Environ. and Chem. Phys. **22**, 117 (2000).

# Bario titanato, legiruoto Ce<sup>3+</sup>, dielektrinės savybės

#### Dielectric Properties of Barium Titanate Doped with Ce<sup>3+</sup>

D. Adamchuk<sup>1</sup>, S. Svirskas<sup>1</sup>, J. Banys<sup>1</sup>, V. Buscaglia<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio al. 9/3b., LT-10222 Vilnius, Lithuania <sup>2</sup>Institute for Energetics and Interphases, CNR, Via de Marini No. 6, Genoa 1-16149, Italy <u>adamchuk dzmitry@yahoo.com</u>

Ferroelectricity in barium titanate (BT) has already been studied for more than 70 years. Still this material attracts a lot of attention because some of its properties are not quite well understood. It is also important from the application point of view. This material has become one of the most important electroceramic materials [1] due to its dielectric, ferroelectric and piezoelectric properties. Ferroelectric properties and a high dielectric constant make BT useful in an array of applications such as multilayer ceramic capacitors, gate dielectrics, waveguide modulators, IR detectors and holographic memory [2].

Most of the recent studies are concentrated on the doping of barium titanate with various ions. A lot of studies are concentrated on the rare-earth metal ion doping. Such kind of lattice substitution can affect the properties of BT quite drastically. The addition of different ions can lead to very complex behaviour. One of the best examples is the mixtures between barium titanate and barium zirconate. This system shows very complicated crossover in the phase diagram between ferroelectric, relaxor and incipient ferroelectric phases. Among BT-based ferroelectric relaxors, Ce-doped BaTiO<sub>3</sub> received much attention, both due to fundamental and application interests [3].

This study is devoted to the investigation of broadband dielectric spectroscopy of barium titanate doped with different concentration of cerium ions. Ceramic samples of BT doped with  $Ce^{3+}$  were prepared by solid-state reaction in order to promote the incorporation of Ce ions into B sites. The investigation was carried in a broad temperature (50 – 500 K) and frequency range (5 mHz – 1 GHz).

The study shows that the increase of Cerium dopants in the B-site of perovskite lattice diminishes ferroelectric order and the relaxor behaviour is enhanced. It resembles barium zirconate titanate (BZT) system but the random fields supposed to be much stronger in the case of BT doped with Ce<sup>3+</sup>. The evolution of temperature and frequency dependences of dielectric permittivity will be discussed in this contribution.

The temperature dependences of dielectric permittivity of BaCe<sub>0.3</sub>Ti<sub>0.7</sub>O<sub>3</sub> are depicted in Figure 1-2.



Fig 1. Temperature dependence of the real part of complex dielectric permittivity



Fig 2. Temperature dependence of the imaginary part of complex dielectric permittivity.

*Key words: dielectric spectroscopy, barium titanate, ferroelectric, relaxor.* 

#### Reference

- [1] B. Ertuğ, AJER. 2(8), 1-7 (2013).
- [2] M.B. Smith et al. J Am Chem Soc 130 (22), 6955-6963 (2008).
- [3] L.P. Curecheriu, C.E. Ciomaga, V. Musteata, G. Canu, V. Buscaglia, L. Mitoseriu, Ceramics International. 42, 11085–11092 (2016).

#### Heterosandūrinių mikrobangų diodų detekcinių savybių modifikavimas šviesa

# Modification of Detection Properties of Heterojunction Microwave Diodes by Light

Algirdas Sužiedėlis<sup>1,2</sup>, Steponas Ašmontas<sup>1</sup>, Jonas Gradauskas<sup>1,2</sup>, Aldis Šilėnas<sup>1</sup>, Andžej Lučun<sup>1</sup>, Aurimas Čerškus<sup>1,2</sup>,

Česlav Paškevič<sup>1</sup>, Maksimas Anbinderis<sup>1</sup>, Angelė Steikūnienė<sup>1</sup>, Gytis Steikūnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius

algirdas.suziedelis@ftmc.lt

Mikrobangų jutikliai padeda mums komunikuoti, orientuotis erdvėje, sekti savo kūno fizinę būseną ir atlikti dar daug mums būtinų veiksmų. Pats "jutiklio" terminas įpareigoja šį prietaisą būti jautriu mikrobangų spinduliuotei, pasižymėti dideliu voltvatiniu jautriu, t.y. rodyti dideles detektuojamos įtampos santykio su krintančios spinduliuotės galia vertes. Šalia šio reikalavimo mikrobangų jutiklis turi tenkinti ir kitus: jo detektuojama įtampa turi minimaliai priklausyti nuo temperatūros, slėgio, drėgmės, apšvietos ir kitų aplinkos faktorių.

Pranešime nagrinėsime apšvietos itaka detektuojamos itampos dydžiui, kai mikrobangu spinduliuotė veikia planarinius mikrobangų diodus  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  heterosandūros pagrindu. Buvo pagaminti tiriami diodai su ir skirtingomis heterosandūromis: Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>As/GaAs,

 $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs,\,GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As.$ 

Tokį Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As trinario junginio AlAs molinės dalies x pasirinkimą sąlygojo ta aplinkybė, jog būtent diodai su x = 0.3 verte junginyje parodė didžiausią heterosandūrinio diodo voltvatinio jautrio reikšmę [1]. Invertuota GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As heterosandūra eksperimentams buvo pasirinkta dėl efektyvesnio trinario junginio Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As apšvietimo, kadangi šviečiama buvo iš puslaidininkinio padėklo pusės.

Kaip ir visų mūsų gaminamų mikrobangų diodų, skirtų aukštų dažnių (K<sub>a</sub> dažnių ruožui ir aukštesniems) signalų detekcijai, konstrukcija yra planarinė: abu diodo kontaktai yra toje pačioje plokštumoje, o puslaidininkinis darinys su metaliniais kontaktais yra perneštas ant elastingos kelių mikrometrų storio dielektrinės poliimido plėvelės. Heterosandūriniai diodai buvo gaminami iš molekulinių pluoštelių epitaksijos būdu užaugintų darinių. Diodų aukštadažnių parametrų matavimai buvo atliekami panaudojant Cascade Microtech zondinj manipuliatorių K<sub>a</sub> dažnių juostoje. Ši matavimo metodika yra patogi ir papildomiems diodų apšvietos eksperimentams, kas yra sunku, kai diodas yra imontuotas i bangolaidine perdavimo linija, ypatingai aukštesnių dažnių atveju. Diodų apšvietimui buvo naudojama matomo spektro nemonochromatinė šviesa ir monochromatinė lazerių bei šviesos diodų spinduliuotė. Eksperimentai buvo atliekami kambario temperatūroje.

Apšvietus maksimalios apšvietos nemonochromatine šviesa, diodų su heterosandūromis Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>As/GaAs, Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As/GaAs ir GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As varža sumažėdavo atitinkamai 1.3, 20÷30 ir 150÷160 kartų. Heterosandūrinio diodo su x = 0.25 AlAs moline dalimi voltvatinis jautris *S* beveik nepriklausė nuo apšvietos, kai, tuo tarpu, diodams su x = 0.3 moline dalimi šviesa darė ženklią įtaką detekcinėms jų savybėms, (žr. 1 pav.). Jeigu diodo su Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As/GaAs heterosandūra jautris monotoniškai padidėjo daugiau nei tris kartus maksimaliai jį apšvietus, tai invertuoto diodo su GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As heterosandūra voltvatinis jautris mažinant apšvietimą iš pradžių didėjo, pasiekė maksimumą, po to pradėjo mažėti ir pakeitė ženklą.

Šviesos įtaką heterosandūrinių diodų elektrinei varžai ir voltvatiniam jautriui aiškiname krūvininkų tankio kitimu heterosandūriniuose dariniuose veikiant šviesai. Skirtingą šviesos poveikį diodams su x = 0.25 ir x = 0.3 AlAs molinėmis dalimis lemia DX centrų susidarymas trinariame Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As junginyje, kai x vertė viršija 0.25 [2]. Didesnė šviesos įtaka invertuoto heterosandūrinio diodo atveju aiškinama tuo, jog šiuo atveju didesnio intensyvumo šviesa krinta į Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As sluoksnį, lyginant su diodu su Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As/GaAs heterosandūra.



l pav. Heterosandūrinių mikrobangų diodų santykinio voltvatinio jautrio priklausomybė nuo apšvietos. Mikrobangų spinduliuotės dažnis 30 GHz. Diodai apšviečiami nemonochromatine balta šviesa.

Reikšminiai žodžiai: mikrobangų diodas, elektromagnetinės spinduliuotės detekcija, voltvatinis jautris, apšvieta.

- J. Gradauskas, A. Suziedelis, S. Asmontas, E. Sirmulis, V. Kazlauskaite, A. Lucun, and M. Vingelis, IEEE Sensors Journal, 10, 662 (2010).
- [2] T.F. Kuech, M.A. Tischler, M. Potemski, F. Cardone, and G. Scilla, J. Cryst. Growth, 98, 174 (1989).
## Hematoporfirino fotovirsmų spektroskopiniai tyrimai ir molekulinis modeliavimas

## Phototransformations of hematoporphyrin: spectroscopic study and molecular modelling

Saulius Bagdonas, Kęstutis Aidas, Arūnas Maršalka Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius saulius.bagdonas@ff.vu.lt

Hematoporfirinas (Hp) vienas pirmujų tetrapirolinių junginių panaudotų vėžinių ląstelių fotosensibilizacijai ir fotoaktyvacijai sukelti. Jo dariniai tapo 1-osios kartos fotosensibilizatoriais, išbandytais vėžio gydymui klinikinėje praktikoje. Nors kaip klinikinis preparatas jis turi nemažų trūkumų (sudėtinga protokolinio sintezės proceso kontrolė, ilga sisteminės fotosensibilizacijos trukmė), iki šių dienų išlieka pasaulyje labiausiai pripažintu fotosensibilizatoriumi įvairių vėžio lokalizacijų gydymui [1]. Klasikinis fotosensibilizatoriaus veikimo mechanizmas aiškinamas sužadinimo energijos pernaša aplinkos deguoniui, kuris virtes itin reaktyvia singuletine forma sukelia aplinkos molekulių oksidacines pažaidas. Šios reakcijos gali paveikti ir pati Hp, sukeldamos jo fotovirsmus.

Iš daugelio fotosensibilizatorių hematoporfirinas išsiskiria tuo, kad šviesa sužadintos reakcijos salygoja ne tik molekulės degradaciją, bet ir oksidacinius bei redukcinius procesus, kurių metu susidaro tetrapirolo žiedo struktūrą išlaikantys chlorino tipo fotoproduktai. Ši savybė įgalintų panaudoti hematoporfirino spektrinių savybių pokyčius kaip indikatorinį signalą, tiriant ivairiu terpės bei aplinkos veiksniu poveiki fotosensibilizatorių sukeltų fotocheminių procesų, vykstančių modelinėse ir biologinėse terpėse, pobūdžiui bei intensyvumui. Tačiau daugialypis vienalaikių fotovirsmų mechanizmas komplikuoja eksperimentinių interpretacija. spektroskopinių duomenų Tam pasitarnautų labiausiai tikėtinų fotoreakcijų krypčių bei jų metu susidarančių fotoproduktų spektrinių savybių nustatymas.

Šiame darbe hematoporfirino ir jo darinių bei galimų fotoproduktų vertikaliosios elektroninio sužadinimo energijos ir jas atitinkantys osciliatoriaus stipriai buvo apskaičiuoti pasitelkus tankio funkcionalo teorijos metodus bei nestacionariosios trikdžiu teorijos tiesinio atsako modelį. Visų molekulinių darinių geometrijos buvo pilnai optimizuotos taikant hibridinį B3LYP funkcionalą bei vienelektronę 6-31G\* bazę. Visos geometrijos optimizacijos buvo atliktos Gaussian09 Vertikaliosios elektroninio programa. sužadinimo energijos ir osciliatoriaus stipriai buvo apskaičiuoti taikant CAM-B3LYP tankio funkcionala bei vienelektrone 6-31+G\* baze. Šis artinys yra adekvatus modeliuojant porfirinų šeimos junginių sužadintas elektronines būsenas [2]. Sužadinimo energijų skaičiavimai buvo atlikti Dalton elektroninės struktūros programa [3].

Atlikti skaičiavimų rezultatai buvo palyginti su sugerties spektroskopijos matavimų duomenimis, gautais apšvietus hematoporfirino darinio (diacetato) bei chlorino e6 vandeninius tirpalus 1 cm storio kvarcinėse kiuvetėse 532 nm lazerio spinduliuote. Bandinių švitinimas buvo atliekamas, veikiant 1 cm<sup>2</sup> kiuvetės plotą keliais skirtingais intensyvumais, tirpalus pastoviai maišant magnetine maišykle. Sugerties spektrai buvo išmatuoti šviesolaidiniu spektrometru AvaSpec-2048 (Avantes). Dominuojančios fotoreakcijos tipas buvo keičiamas, keičiant tirpalų pH, bei pridedant į tirpalą baltymo (jaučio serumo albumino) ir askorbo rūgšties. Spektriniu sugerties juostų pokyčių, išmatuotų skirtingomis aplinkos sąlygomis, sąsaja su teoriniais duomenimis leido išskirti labiausiai tikėtinus hematoporfirino fotoproduktų ir juos formuojančių fotocheminių reakcijų tipus.



1 pav. Hematoporfirino struktūrinė formulė

**Padėka:** Autoriai dėkoja Vilniaus universiteto aukšto našumo skaičiavimo centrui "HPC Saulėtekis" už suteiktus skaičiavimo technikos resursus.

Reikšminiai žodžiai: hematoporfirinas, fotooksidacija, fotoproduktai, tankio funkcionalo teorija.

- [1] A.B. Ormond, H.S. Freeman, Materials, 6, 817 (2013).
- [2] P. Štěpanek, V. Andrushchenko, K. Ruud, and P. Bouř, J. Phys. Chem. A. 116, 778 (2012).
- [3] K. Aidas, C. Angeli, K.L. Bak, ir kt. WIREs Comput. Mol. Sci. 4, 269 (2014).

## Saulės elementų voltamperinių charakteristikų tyrimas

## Investigation of current-voltage dependences of solar cells

<u>Aiva Bagušinskaitė - Šležienė</u>, Tomas Aleinikovas, Artūras Jukna Fizikos katedra, Vilniaus Gedimino Technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius bagusinskaite@gmail.com

Saulės energijos potencialas – ypatingai didelis, o viena iš panaudos realizacijų – fotoelektra. Svarbiausias saulės elementų (SE) technologijos ir eksploatacijos rodiklis – šviesos energijos konversijos į elektros energiją efektyvumas, priklausantis nuo SE kristalinės struktūros tobulumo, gamybos, transportavimo, montavimo ir eksploatavimo metu atsiradusių defektų dydžio, skaičiaus ir tankio. Fotoelektrai vis labiau populiarėjant, SE ir fotoelektrinių modulių (FE) kokybės kontrolė tampa vis svarbesne technologijos, serijinės gamybos bei eksploatacijos dalimi [1].

Vienas iš daugelio ypač patikimų SE kokybės kontrolės metodų – SE elektroliuminescencijos tyrimų metodas – labai brangus (aukšta tyrimų įrangos kaina) ir nepatogus (reikalinga mobili tyrimų įranga). Tad kokybės tyrimams reikalingi paprastesni ir todėl pigesni būdai, vienas iš kurių – SE voltamperinės charakteristikos (VAch) tyrimas, tarpusavyje palyginant (išmatuotą) ir etaloninę VAch, suskaičiuojamas iš [2]:

$$I = I_{\rm ph} - I_{\rm D} \left( \exp\left[\frac{U + I \cdot R_2}{U_{\rm t}}\right] - 1 \right) - \frac{U + I \cdot R_2}{R_1} \qquad (1)$$

sąryšio. Čia  $I_{ph}$  – fotoelektrinės srovės amplitudė,  $I_D$  – *p-n* sandūra tekančios elektros srovės stipris, o  $R_1$  ir  $R_2$ parazitinė lygiagrečioji (t.y. elektrinio šunto) ir nuoseklioji FM elektrinės varžos,  $U_t$  – elektrinių nuostolių, sąlygotų SE šilimu, įtampos amplitudė. Defektų skaičiui ir tankiui didėjant, kinta pavienių SE ar sujungtų į FM  $R_1$  ir  $R_2$  varžos. Tuomet, elektrinės įtampos amplitudė SE išėjime sumažėja proporcingai  $\Delta U = R_2/R_a$ , čia  $R_a$  – SE/FM elektrinės pilnutinės elektrinės apkrovos varža, sudaryta iš FM esančių SE vidinių elektrinių varžų ir/ar fotoelektros prietaiso apkrovos varžos. VAch tyrimų metodikoje siekiama įvertinti trumpojo jungimo elektros srovės  $I_{tr}$ , atvirosios grandinės elektrinės įtampos  $U_o$  bei užpildos faktoriaus FF kitimo priežastis, jas susiejant su SE-uose esančių defektų charakteristikomis.

1 paveiksle pavaizduotos sunormuotos  $\Delta I = f(U)$ (*kairėje*) ir  $\Delta U = f(I)$  (*dešinėje*) priklausomybės, kuriose  $\Delta I = I_0 - I$  ir  $\Delta U = U_0 - U$ . Čia  $I_0$  ir  $U_0$  išreiškia sunormuotas elektrinės srovės ir įtampos vertes etaloninio SE (t.y. SE, turintis maksimalų VAch užpildos faktorių), o I ir U – tiriamojo SE, kuriame iš anksto suformuoti, žinomos rūšies, dydžio ir tankio defektai.  $\Delta I$ didėjimas, didėjant elektrinės įtampos amplitudei elemento išėjime, sietinas su elemento nuosekliosios elektrinės varžos  $R_2$  augimu, o  $\Delta U$  didėjimą, didėjant elektros srovei apkrovos varžoje, - su elemento lygiagrečiosios elektrinės varžos  $R_1$  didėjimu. VAch tvrimu rezultatai lyginami su tiriamo SE elektroliuminescencijos vaizdu (2 pav.), kuriam spalvine



1 pav. Elektros srovės stiprio  $\Delta I = f(U)$  priklausomybė nuo įtampos (*kairėje*) ir įtampos  $\Delta U = f(I)$ 

priklausomybė nuo srovės (*dešinėje*) SE išėjime, suskaičiuotų tiriamojo SE VAch atėmus iš etaloninio SE VAch

1 1011

gama pavaizduotas SE elektroliuminescencijos intensyvumas, srovei elementu tekant tiesiogine (kairėje), p-n sandūros atžvilgiu, ir užtvarine (dešinėje) kryptimis. Pirmuoju atveju švytėjimo intensyvumas (šviesios sritys) mažėja, didėjant SE mikroįtrūkių, įskilių skaičiui ir/ar blogos elektrodų adhezijos plotui, o antruoju, - švytėjimo intensyvumą (šviesios sritys) lemia srovės parazitiniai nuotėkiai *p*-*n* sandūra.  $\Delta I = f(U)$  ir  $\Delta U$ = f(I) kreivėmis (1 pav.) apribotas plotas, priklausantis nuo defektų SE dydžio, skaičiaus ir tankio proporcingas tamsesniu sričiu plotui elektroliuminescencijos vaizduose (2 pav.), gautuose matuojant tiesioginės ir šviesesnių sričių plotui - užtvarinės krypties elektros srovės atvejais.



2 pav. SE elektroliuminescencijos vaizdas, elementu tekant tiesioginės (*kairėje*) ir užtvarinės (*dešinėje*) krypties elektros srovei

Darbe gauti rezultatai leidžia daryti išvadą, jog SE VAch forma priklauso nuo SE esančių defektų rūšies, skaičiaus ir tankio, o VAch tyrimų rezultatai koreliuoja su SE/FM elektroliuminescencijos tyrimų rezultatais.

Reikšminiai žodžiai: saulės elementai, defektai, voltamperinė charakteristika, elektroliuminescencija.

#### Literatūra

[2] T.C. Banwell and A. Jayakumar. Electr. Lett. 36(4), 291 (2000).

J. Bishop, and H. Ossenbrink. IEEE 25<sup>th</sup> PVSC, May 13-17, 1191 (1996).

# Vandens įtakos L-treonino fragmentacijai tyrimas taikant ab initio metodus

# A study on the influence of water on the L-threonine fragmentation

Laura Baliulytė<sup>1</sup>, Jelena Tamulienė<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus Universitetas, Gyvybės mokslų centras Biomokslų institutas, Saulėtekio al. 7, 10223 Vilnius, Lietuva <sup>2</sup>Vilniaus Universitetas, Nacionalinis fizinių ir technologijos mokslų centras Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, 10222 Vilnius, Lietuva

baliulyte.laura@gmail.com

Visus organizmus nuolat veikia jonizuojančioji spinduliuotė, kurią skleidžia radionuklidai esantys dirvožemyje, ore, maiste ir vandenyje. Jonizuojančioji spinduliuotė taip pat naudojama ir medicininiais tikslais. Pavyzdžiui, rentgeno spinduliai naudojami įvertinti dantų būklę ir diagnozuoti kaulų lūžius, o gama spinduliai naudojami vėžio gydymui. Rentgeno ir gama spinduliams veikiant organizmus, susidaro lėtieji (antriniai) elektronai dėl biomolekulių pakitimų. Susidarę lėtieji elektronai sukelia amino rūgščių (pvz. L-treonino) fragmentaciją [1].

Yra žinoma, jog vanduo sudaro didžiausią dalį ląstelės svorio- ~ 70%. Be to, dauguma biocheminių reakcijų ir biofizikinių procesų vyksta vandenyje. Taip pat vanduo veikia amino rūgščių struktūrą [2]. Deja, yra labai mažai teorinių ir/ar eksperimentinių duomenų apie amino rūgščių fragmentaciją vykstančią vandenyje. Tad mūsų tyrimų tikslas– nustatyti vandens įtaką L-treonino fragmentacijai.

Stabiliausių L-treonino konformero struktūrų vakuume bei įskaitant vandens įtaką (1 pav.) nustatymui ir teigiamų fragmentų susidarymui reikalingų energijų apskaičiavimui buvo naudotas tankio funkcionalo teorijos (DFT) B3LYP kvantinės chemijos metodas su koreliacinių trivalenčių (cc-pVTZ) bazių artiniu. Vandens įtakai įvertinti naudotas poliarizuojamos aplinkos modelis (PCM). Tyrimai atlikti naudojant Gaussian 03 Rev D.01 programą instaliuotą VU MIF Skaitmeninių tyrimų ir skaičiavimų centre esančiame superkompiuteryje.

Nustatyta, jog vienodos molinės masės ir vienodos cheminės sudėties fragmentų atsiradimo energija nustatyta įskaitant vandens įtaką ir be jos skiriasi, t.y. fragmentų atsiradimo energija nustatyta neįskaičius vandens įtakos yra mažesnė. Pavyzdžiui, labiausiai tikėtino teigiamo fragmento  $C_2H_3NO^+$ (m=57 a.m.v.) susidarymui reikalinga energija pateikta žemiau (1 lentelė).

Remiantis gautais tyrimo rezultatais galime teigti, kad L-treonino fragmentacijos procesams dėl lėtų elektronų poveikio vykti vandenyje reikės daugiau energijos nei vakuume ar ore, t.y. vanduo L-treonino fragmentacijos procesus turėtų lėtinti.



1 pav. Vieno iš stabiliausių L-treonino konformero geometrinė struktūra nustatyta neįskaičius (kairėje) ir įskaičius vandens įtaką (dešinėje).

1 lentelė. Apskaičiuota energija, reikalinga tikėtiniausio fragmento susidarymui, tyrimus atlikus neįskaičius ir įskaičius vandens įtaką.

Fragmentas	Energija, reikalinga fragmento			
	susidaryillui, ev			
	L-treoninas	L-treoninas		
	neiskaičius	iskaičius		
	vandens įtakos	vandens įtaką		
$C_2H_3NO^+$				
(m=57 a.m.v.)	9.98	10.87		

*Reikšminiai žodžiai: L-treoninas, fragmentacija, vandens įtaka.* 

#### Padėka

Autorės dėkoja Informacinių technologijų atviros prieigos centrui už galimybę naudotis HPC ištekliais.

- E.J. Hall, A.J. Graccia, *Radiobiology for the radiologist*, edited by L. McAllister, 6th edn.(Lippincott Williams&Wilkins, USA, 2006).
- [2] B. Alberts, D. Bray, K. Hopkin, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, P. Walter, *Essential Cell Biology*, edited by M. Morales, 4th edn. (Garland Science, Taylor & Francis Group, USA, 2014).

## Inkstų vėžinių audinių kokybinė infraraudonosios sugerties spektrinė analizė

# Qualitative Analysis of Kidney Cancer Tissue by Means of FTIR Spectroscopy

Rimantė Bandzevičiūtė<sup>1</sup>, Vidita Urbonienė<sup>1</sup>, Feliksas Jankevičius<sup>2,3</sup>, Valdas Šablinskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Medicinos Fakultetas, Gastroenterologijos, nefrourologijos ir chirurgijos klinika, Santariškių g.

2, LT-08661 Vilnius,

<sup>3</sup>Nacionalinis vėžio institutas, Santariškių g. 1, LT-08660 Vilnius rimante.bandzeviciute@ff.stud.vu.lt

Vėžys yra viena vyraujančių mirties priežasčių pasaulyje [1]. Vienas svarbiausių veiksnių, lemiančių tolimesnę paciento ligos prognozę, recidyvo tikimybę bei sėkmingą ligos gydymą, - tikslios ribos tarp naviko ir normalaus audinio nustatymas chirurginės operacijos metu.

Pastaruoju metu atlikti tyrimai taikant infraraudonosios spektrometrijos metodus ivairių žmogaus organų vėžinių audinių tyrimui leido sėkmingai identifikuoti operacijos metu pašalintus audinius [2-4]. Infraraudonoji spektrometrija pasižymi selektyvumu, todėl remiantis pokyčiais infraraudonosios sugerties spektruose galima nustatyti vėžinio proceso nulemtus biologinio audinio komponentų biocheminius pakitimus molekuliniame lygmenyje. Šiame darbe pritaikytas pažeistojo visiškojo vidaus atspindžio IR spektrinėje srityje metodas (angl. Attenuated Total Reflection – ATR) inkstų normalaus ir navikinio audinių tarpląstelinės medžiagos tyrimui. Šio metodo taikymas audinių tarplastelinės medžiagos tyrimui ypatingas tuo, jog nėra reikalingas specialus bandinio paruošimas, o spektriniai tyrimai gali būti atliekami operacinėje iškart po chirurginės operacijos audiniui dar nepradėjus irti. Sukūrus programinę įrangą, automatiškai analizuojančią spektrus bei atpažįstančią audinius, ją būtų galima pritaikyti audinių in vivo diagnostikai betarpiškai chirurginės operacijos metu.

Tyrimo metu atlikta 115 pacientų normalaus ir navikinio audinių tarpląstelinės medžiagos ATR IR sugerties spektrų analizė. Bandiniai tyrimui paruošiami iš inkstų rezekcijos ar nefrektomijos metodu pašalinto audinio iškart po chirurginės operacijos.

Svarbiausi spektriniai skirtumai tarp normalaus ir navikinio audinio tarpląstelinės medžiagos ATR IR sugerties spektrų yra 1200 – 950 cm<sup>-1</sup> spektrinėje srityje, atitinkančioje glikogeno v (C-O), v (C-C) bei  $\delta$  (C-O-H) virpesius (1 pav.). Šioje srityje vėžinio audinio tarpląstelinės medžiagos spektre stebimos trys, o normalaus audinio trapląstelinės medžiagos spektre – dvi spektrinės juostos. Taip pat navikinio audinio tarpląstelinės medžiagos ATR IR sugerties spektre šioje srityje spektrinės juostos yra intensyvesnės.

Darbo metu yra sukurta programa, automatiškai atpažįstanti normalaus ir piktybinio audinio tarpląstelinės medžiagos *ATR IR* sugerties spektrus. Atpažinimui yra panaudoti normalaus ir piktybinio audinių tarpląstelinės medžiagos *ATR IR* sugerties spektrų skirtumai šioje spektrinėje srityje. Atpažįstant piktybinio auglio audinį pasiektas 84 %, o normalų – 98 % tikslumas. Sukūrus normalaus ir piktybinio audinių tarpląstelinės medžiagos *ATR IR* sugerties spektrų biblioteką bei atlikus tiriamojo spektro palyginimą su bibliotekoje esančiais spektrais, nustatyta, jog piktybinis audinys gali būti identifikuotas 92 % tikslumu, o normalus – 96 % tikslumu. Palyginus taikytus metodus, nustatyta, jog spektrų palyginimo metodas sukurtoje audinių tarpląstelinės medžiagos *ATR IR* sugerties spektrų bibliotekoje yra tinkamesnis (didesnio tikslumo) metodas vėžinių audinių identifikavimui. Taikoma metodika, ją ateityje patobulinus, gali būti sėkmingai pritaikoma klinikinėje vėžinių audinių diagnostikoje.



1 pav. Normalaus (mėlyna linija) ir navikinio (raudona linija) audinio tarpląstelinės medžiagos *ATR IR* sugerties spektrai

Reikšminiai žodžiai: ATR, tarpląstelinė medžiaga, inkstų vėžys, infraraudonoji spektrometrija, kokybinė spektrinė analizė.

- [1] L. A. Torre et al., CA Cancer J Clin 65, 87-108 (2015)
- [2] P. Tian et al., Int J Clin Exp Med 8, 972-981 (2015)
- [3] N. Wald et al., Biochimica et Biophysica Acta, **1862**, 202–212 (2016)
- [4] A. Benard et al., Analyst, 139, 1044–1056 (2014)

# Terahercinius impulsus spinduliuojančio dipolio orientacijos puslaidininkyje nustatymas laikinės terahercų spektroskopijos metodais

# Methods of determination of terahertz radiating dipole orientation in semiconductors using time-domain spectroscopy technique

Ieva Beleckaitė ir Ramūnas Adomavičius Fzinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva ieva.beleckaite@ftmc.lt

Terahercinių bangų (THz) spektroskopijos sistemos gali būti taikomos įvairiose mokslo bei pramonės šakose: medicinoje, saugumo sistemose, maisto bei plastiko pramonėje, meno dirbinių restauracijoje ir t.t. Tiriant puslaidininkius THz spektroskopijos metodikos leidžia nustatyti krūvininkų gyvavimo trukmę bei judrį puslaidininkyje, puslaidininkio draustinių juostų tarpą bei slėnių padėtis. Visiems minėtiems taikymams svarbu turėti kokybiškus THz spinduliuotės šaltinius, tad pastarųjų kūrimas bei charakterizavimas yra itin aktualus. THz emisijos intensyvumą lemia THz impulsus spinduliuojančio dipolio orientacija [1], tad tyrinėjant potencialius THz spinduliuotės šaltinius svarbu mokėti ta orientacija nustatyti.

Šiame darbe pristatomos dvi THz spektroskopijos metodikos skirtos THz impulsus spinduliuojančio elektrinio dipolio pasvirimo kampo puslaidininkio paviršiaus normalės atžvilgiu nustatymui. Pirmoji metodika leidžia išmatuoti THz impulsus spinduliuojančio elektrinio dipolio pasvirimo kampą ( $\theta$ ) atliekant THz emisijos intensyvumo priklausomybės nuo sužadinimo kampo matavimus pralaidumo geometrijoje. Antroji metodika remiasi THz impulso atspindžio geometrijoje matavimais ir gautų rezultatų analize. Bendru atveju, optiškai sužadinus puslaidininkio paviršių, sugeneruojami du skirtingomis kryptimis (atspindžio ir pralaidumo) sklindantys THz impulsai. Žinant šių impulsų energijos santykį bei remiantis teoriniais skaičiavimais galima rasti elektrinio dipolio pasvirimo puslaidininkio paviršiaus atžvilgiu kampą.

Bandinių optiniam sužadinimui naudotas Titato:safyro lazeris generuojantis 150 fs trukmės, 800 nm bangos ilgio impulsus, kurių pasikartojimo dažnis 76 MHz, o koherentiniam THz spinduliuotės detektavimui – žemoje temperatūroje auginto GaAs detektorius (UAB Teravil). Matavimo metodikos išbandytos su savojo laidumo (100) orientacijos GaAs padėklu magnetiniame lauke. Gauta tiesinė THz impulsus spinduliuojančio elektrinio dipolio pasvirimo kampo priklausomybė nuo magnetinio lauko indukcijos koreliuoja su ankstesniais kitų mokslininkų gautais rezultatais ir patvirtina mūsų metodų patikimumą (1 pav.).

Be to, atlikti novatoriški kampo  $\theta$  priklausomybės nuo sužadinimo intensyvumo matavimai, kurie rodo, kad (111) orientacijos GaAs padėkle  $\theta$  yra proporcingas kvadratinei šakniai iš optinės energijos srauto (2 pav.). Pastarieji rezultatai labai svarbūs tiriant THz impulsų generavimą puslaidininkiuose nulemiančius netiesinius-optinius bei anizotropinės fotosrovės mechanizmus.



1 pav. THz impulsus spinduliuojančio dipolio pasvirimo kampo priklausomybė nuo išorinio magnetinio lauko.



2 pav. THz impulsus spinduliuojančio dipolio pasvirimo kampo priklausomybe nuo optinės energijos srauto.

Reikšminiai žodžiai: THz emisija, laikinė THz spektroskopija, THz emituojančio elektrinio dipolio orientacija

## Literatūra

 R. Inoue, K. Takayama, and M. Tonouchi, "Angular dependence of terahertz emission from semiconductor surfaces photoexcited by femtosecond optical pulses," Journal of the Optical Society of America B, 26(9), A14 (2009)

## Energiją taupančių langų paketų ekranavimo efektyvumo valdymas WiFi dažnių ruože

# Control of shielding effectiveness of energy saving windows in WiFi frequency range

<u>Evaldas Bilotas</u>, Paulius Ragulis, Žilvinas Kancleris Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

evaldas.bilotas@ftmc.lt

Per pastarąjį dešimtmetį, buvo labai išplėtoti aukštos energetinės klasės pastatai, ypatingai, šiaurinėse šalyse, kuriose 40 % visų energijos sąnaudų atitenka pastatų šildymui. Pastatuose prasčiausiai šilumą sulaiko langai. Todėl langų paketuose pradėtos naudoti žemos emisijos dangos, kuriomis padengiami vienas arba du langų paketo stiklai. Tos dangos tai metalo ar metalo oksido ploni sluoksniai, kurie sulaiko tolimąją infraraudoną spinduliuotę namo viduje.

Įdiegus šią technologiją, buvo pastebėta, kad ta danga atspindi ir elektromagnetinę spinduliuotę mikrobangų dažnių ruože. Pasirodė, kad pramoniniu būdu gaminami energiją tausojantys langų paketai gali slopinti mikrobangų spinduliuotę iki 50 dB [1], todėl ryšys svarbiuose telekomunikacijoms GPS ir WiFi dažniu ruožuose gali būti sutrikdytas. Dėl šios priežasties, imta ieškoti būdų, kaip padidinti langų paketų pralaidą svarbiuose dažniu komunikacijoms ruožuose. Populiariausias metodas yra dažniui selektyvūs paviršiai, kurie sukuriami išėsdinat metalizuotoje dangoje tam tikrus periodinius darinius. Šie dariniai veikia kaip rezonansiniai filtrai, gerokai sumažindami slopinima parinktuose dažniu ruožuose [2].

Šiame darbe, mes siūlome pralaidos ar slopinimo reguliavimui panaudoti gerai žinomą Fabry-Perot (FP) rezonanso reiškinį. Keičiant optinį kelią, galima pasiekti tiek pralaidos maksimumą, tiek ir minimumą. Iš kitos pusės yra žinoma [1], kad pusiau skaidrus metalo sluoksnis gali taip pat įtakoti FP rezonanso padėtį. Mes tyrėme dviejų stiklų paketą, kurio vienas iš stiklų yra metalizuotas. Todėl keičiant tarpus tarp stiklų ar jų storį, galima FP rezonansą pastumti į norimą dažnių sritį ir tokiu būdu reguliuoti stiklo paketo pralaidumą mikrobangų dažniuose.

Tyrimo metu stiklo paketai buvo konstruojame iš Saint-Gobain [3] įmonės pagamintų 4 mm storio stiklų. Vieno stiklo paviršius buvo metalizuotas, o jo paviršinis laidumas 0,094 S. Eksperimentiniai tyrimai buvo atliekami FTMC, mikrobangų laboratorijos beaidėje kameroje. Matuojami bandiniai buvo dedami prie beaidės kameros sienoje esančios apertūros, o visi irenginiai ir siunčianti antena buvo statomi į pačią kamera. Taip matuojant, spinduliuotė neatsispindi nuo sienų dėl kameroje esančių absorbentų ir matavimų metu nesusidaro stovinti banga. Priimančioji antena pastatoma laboratorijoje, beaidės kameros išorėje. Tyrimų metu buvo naudojami ekranavimo efektyvumo (SE) vienetai, kurie nusako spinduliuotės slopinimą decibelais dB. Žinant, kad komerciniuose langų paketuose naudojamų stiklų storis yra 4 mm, o tarpas tarp jų - 16 mm, pradžioje sukonstravome ir išmatavome tokio paketo SE. Keičiant tarpą tarp stiklų, stebėjome SE dažninės charakteristikos kitimą, kuris 1 pav. parodytas taškais.

ekranavimo efektyvumui Paketu skaičiuoti naudojome derinimo ir pralaidos matricų metodą, kurioje metalizacijos paviršinis laidumas įskaitomas kaip sąlyga tangentinėms magnetinio kraštinė lauko dedamosioms [1]. Apskaičiuotos priklausomybės parodytos 1 pav. ištisinėmis linijomis. Kaip matyti iš paveikslo, keičiant tik atstumą tarp stiklų d galima ženkliai pakeisti SE 5 GHz dažnių ruože, kuris yra naudojamas WiFi ryšiui. Matyti, kad mažinant d nuo 16 iki 2,5 mm SE pavyksta sumažinti apie 12 dB.

Tyrimų metu suradome optimalius langų stiklų storius ir tarpo tarp jų dydžius leidžiančius pasiekti minimalų/maksimalų SE abiejuose WiFi dažnių ruožuose 2,4 ir 5 GHz.



1 pav. Eksperimentiniai ir teoriniai rezultatai langų paketų ekranavimo efektyvumo priklausomybės nuo dažnio, esant skirtingiems tarpams tarp stiklų

Reikšminiai žodžiai: mikrobangos, ekranavimo efektyvumas, Fabri-Pero rezonansas.

- [1] P. Ragulis, P. Ängskog, R. Simniškis, B. Vallhagen, M. Bäckström, and Ž. Kancleris, "Shielding Effectiveness of Modern Energy-Saving Glasses and Windows," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 2017. DOI: 10.1109/TAP.2017.2718223
- [2] H.-Y. Chen and T.-H. Lin, "Dual-band frequency selective surface for improving the transmission of Bluetooth and WLAN signals through an energy-saving glass," *Journal of the Chinese Institute of Engineers*, vol. 39, pp. 331-336, 2016.
- [3] Saint-Gobain home page: http://uk.saint-gobain-glass.com/.

# Žmogaus tarpslankstelinių diskų savitosios fluorescencijos spektrų analizė

The analysis of human intervertebral disc samples' autofluorescence spectra

Ignas Čiplys<sup>1</sup>, Vilmantas Gėgžna<sup>1,2</sup>, Darius Varanius<sup>1,2</sup>, Gunaras Terbetas<sup>3</sup>, Laura Neverauskienė<sup>3</sup>, Aurelija Vaitkuvienė<sup>1</sup>,

Juozas Vidmantis Vaitkus<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, , LT-10527, Vilnius

<sup>2</sup>Gyvybės mokslų centras, Saulėtekio al. 7, , LT-10223, Vilnius

<sup>3</sup>Vilniaus universiteto Medicinos fakultetas, M. K. Čiurlionio g. 21, LT-03101 Vilnius

Ignas.Ciplys@gmail.com

Žmogaus tarpslankstelinių diskų (TD) degeneracija susijusi su diskų senėjimu, tačiau tam įtakos taip pat turi lyties, genetikos, bei žalingų įpročių faktoriai. Degeneracijos lygio nustatymui naudojama kompiuterinė tomografija, branduolių magnetinio rezonanso vaizdavimas (BMR) [1-4]. Šios metodikos informatyvios, tačiau jos negali įvertinti disko būseną lemiančių biologinių medžiagų santykinių koncentracijų. Toks įvertinimas svarbus pasirenkant gydymo metodiką, todėl vykdomas tyrimas, kuriuo siekiama parodyti kaip spektroskopinių TD signalų analizė, pritaikant mašinini mokymasi, gali tapti automatizuotu diagnostiniu irankiu.

2013 – 2015 m. laikotarpiu Vilniaus universiteto Neurologijos ir neurochirurgijos klinikos pacientai, kuriems buvo suplanuota TD išvaržos šalinimo operacija, buvo pakviesti dalyvauti tyrime. Tik gavus raštišką pacientų sutikimą, jų išvaržų mėginiai buvo įtraukiami į mokslinį tyrimą. Eksperimento metu pacientų TD mėginiai buvo veikiami 355 nm lazerio spinduliuote, žadinant fluorescenciją. Spektrų registravimas buvo vykdomas naudojant šviesolaidinę sistemą.

Prieš vykdant analizę užregistruoti spektrai programiškai paruošiami išskiriant reikšmingą analizei sritį, pašalinant triukšmą, kalibruojant spektrus, bei normuojant visus spektrus ties 386 nm (kiekvienas spektras dalinamas iš jo 386 nm bangos ilgio intensyvumo). 1 pav. demonstruojami spektrai prieš ir po paruošimo.



1 pav. Žmogaus tarpslankstelinių diskų fluorescencijos spektrai prieš ir po kompiuterinio paruošimo.

Kiekvieno mėginio fluorescencijos spektrai buvo susieti su mėginio degeneracijos laipsniu, kuris buvo įvertintas specialistų, analizuojant BMR atvaizdus. Prieš vykdant spektrinę analizę, spektrai buvo išskaidyti į 8 komponentus naudojant 3 skirtingas metodikas: principinių komponentų analizę (PKA), neneigiamą matricos faktorizaciją (NMF), bei log-normalių komponentų aproksimacijas (LKA). Klasifikacinė analizė buvo vykdoma naudojant 4 skirtingus klasifikatorius: sprendimų medį, sprendimų miškus, K-artimiausių kaimynų metoda ir atraminių vektorių mašinas (angl. support vector machines, SVM). Siekiant išvengti persidengiančios informacijos klasifikacijoje buvo atrinktos tik reikšmingiausių komponentų amplitudės. Komponentų reikšmingumas įvertintas naudojant sprendimu mišku klasifikatoriu. Klasifikacijos tikslumas vertinamas subalansuoto tikslumo verte (angl. balanced accuracy, BA).

Gauti analizės rezultatai parodė, kad degeneracinės grupės tarpusavyje skiriasi tiek lyties, tiek amžiaus atžvilgiu. Geriausias klasifikacinis rezultatas pasiektas naudojant SVM metodiką, klasifikuojant degeneracinių (moterų 3 ir 4) grupių LKA ir PKA komponentų amplitudes (vidutinis BA = 0.81). Pastebėta, kad LKA komponentų aproksimacijos metodika tinkamesnė detaliai komponentų interpretacijai, o PKA komponentai – greitam ir automatizuotam komponentų išskyrimui. Taip pat pastebėta, jog tarpslankstelinių diskų degeneracijos diagnostiniam tikslumui svarbūs lyties bei amžiaus faktoriai.

Reikšminiai žodžiai: stuburas, analizė, fluorescencija, tarpslanksteliniai diskai, degeneracija.

#### Literatūra

[1] M. A. Adams, P. J. Roughley, What is intervertebral disc degeneration, and what causes it?, Spine 31(18), 2151–61 (2006).

[2] J. N. Katz, Lumbar Disc Disorders and Low-Back Pain: Socioeconomic Factors and Consequences, The Journal of Bone and Joint Surgery (American) (2006).

[3] B. R. Whatley, X. Wen, Intervertebral disc (ivd): structure, degeneration, repair and regeneration, Materials Science and Engineering: C 32(2), 61–77 (2012).

[4] Raj, P. P. Intervertebral disc: Anatomy, physiology, pathophysiology, treatment. Pain Practice (2008).

# Juodosios anglies koncentracijos ore kaita Preilos foninėje stotyje 2008-2015 m.

## Black carbon concentration variability at the Preila station in 2008-2015

Lina Davulienė, Jonas Šakalys, Vadimas Dudoitis

VMTI Fizinių ir technologijos mokslų centro Fizikos institutas, Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius

jonas.sakalys@ftmc.lt

Aerozolio dalelių cheminės sudeties, iu prigimties bei savybiu evoliucijos tyrimai svarbūs suvokiant klimato kaitos, aplinkos taršos ir aplinkos savivalos procesus. Atmosferos aerozoliai sugeria ir barsto saulės bei žemės skleidžiamą šiluminį spinduliavimą ir taip keičia planetos šiluminį balansą. Aerozolio dalelės sugeria dujas, kitus cheminius ir junginius, veikia elementus vandens garu kondensacijos procesus, stimuliuoja fotokatalitines reakcijas ir didele dalimi lemia debesų susidarymą ir kritulius. Trumpa aerozolio dalelių gyvavimo trukmė lemia jų didelę erdvinę dispersiją, todėl aerozoliai pasižymi ir regioniniu ir globaliniu poveikiu. Atmosferos aerozolio sudėtyje be anglies organinių junginių yra ir juodoji anglis. Laikoma, kad juodoji anglis po anglies dioksido yra antras pagal dydį faktorius, prisidedantis prie pasaulinio atšilimo [1]. Juodoji anglis daugiausia išmetama deginant iškastini kura ir biomase.

Ilgalaikiai matavimai yra vienintelis būdas nustatyti natūralių ar antropogeninių teršalų išmetimų pokyčius bei jų įtaką atmosferos procesams. Lietuvoje, Preilos foninėje stotyje, nuo 2008 m. yra atliekami nuolatiniai aerozolio dalelių sudėties bei masės koncentracijos matavimai, naudojant etalometrą AE31.

Šiame darbe pateikta ilgalaikių juodosios anglies masės koncentracijos ore matavimų Preilos fono stotyje 2008-2015 m. analizė.

Ryškiausias juodosios anglies koncentracijos ore kitimas pastebėtas skirtingais metų sezonais. Jis visa eile didesnis už paros ar savaitės kitimą (1 pav.). Vidutinė juodosios anglies masės koncentracija vasarą yra tris kartus mažesnė nei žiemą (400 ng/m<sup>3</sup> ir 1200 ng/m<sup>3</sup>, atitinkamai).



1 pav. Vidutinė metinė juodosios anglies koncentracijos ore eiga 2008 – 2015 m.



2 pav. Juodosios anglies koncentracijos pasikartojimo skaičius pagal koncentracijos dydį žiemos ir vasaros metu 2008 – 2015 m.

Iš 2 pav. matyti, kad žiemos metu didesnės juodosios anglies koncentracijos stebimos dažniau nei vasarą, tačiau tai galėtų lemti ne vien aktyvesnis organinio kuro naudojimas šaltuoju metų laikotarpiu, bet ir šiam laikotarpiui būdingas mažesnis atmosferos maišymosi aukštis.

Remiantis 2008-2015 m. juodosios anglies matavimų duomenimis, nustatytas vidutinis juodosios anglies masės koncentracijos augimas yra apie +4 % per metus.

Reikšminiai žodžiai: aerozolis, juodoji anglis, masės koncentracija.

### Literatūra

 T. C. Bond et all. Bounding the role of black carbon in the climate system: A scientific assessment. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, vol. 118, 5380-5552, doi: 10.1002/jgrd.50171, 2013.

# Iškaitinimų nulemtos radiacinių defektų transformacijos elektronais, protonais ir pionais apšvitintuose Si dariniuose

# Anneal induced transforms of radiation defects in electron, proton and pion irradiated Si structures

Laimonas Deveikis, Tomas Čeponis, Eugenijus Gaubas, Dovilė Meškauskaitė, Jevgenij Pavlov, Vytautas Rumbauskas Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius laimonas.deveikis@ff.stud.vu.lt

Silicio pagrindu pagaminti dalelių detektoriai, plačiai taikomi aukštųjų energijų bei branduolinės fizikos eksperimentuose. Tačiau aukštujų energijų įvairių tipų spinduliuotė, sąveikaudama su medžiaga sukuria defektus, kurie nulemia skirtingos aktyvacijos energijos lygmenis draustinių energijų tarpe, darančius įtaką pagamintų prietaisų funkcinėms charakteristikoms [1]. Seklūs lygmenys keičia efektinį legirantų tankį. Vidutinio gylio lygmenys veikia kaip pagavimo centrai, mažinantys krūvio surinkimo efektyvumą. Gilūs lygmenys nulemia nuotėkio srovės išaugimą, kuri yra ir triukšmų šaltinis. Todėl, siekiant pagaminti kokybiškus ir radiacijai atsparius prietaisus, prognozuoti detektorių charakteristiku kaita jiems veikiant radiacinės spinduliuotės aplinkoje, padidinti detektorių tarnavimo laiką bei atstatyti spinduliuotės paveiktų sensorių funkcines charakteristikas, labai svarbu charakterizuoti išeities bei apšvitintas medžiagas, identifikuojant defektus ir priemaišas bei įvertinant jų koncentracijas. Spinduliuočių sensorių funkcinių charakteristikų atstatymui gali būti pasitelktos terminio iškaitinimo procedūros [2], nulemiančios žalingų radiacinių defektų transformacijas. Tačiau, siekiant išvystyti iškaitinimo procedūru technologijas, būtina ištirti ir suprasti terminiu poveikiu nulemta radiaciniu defektu evoliucija.

Šiame darbe buvo ištirti įvairiais elektronų (6 MeV), protonų (24 GeV/c) bei pionų (300 MeV/c) įtėkiais apšvitinti ir iškaitinti (80-280°C temperatūrų intervale) Čiochralskio (CZ) ir zoninio lydymo (FZ) technologijos n- ir p-laidumo tipo Si dariniai. Tyrimams buvo pasitelkti giliųjų lygmenų nenuostoviosios spektroskopijos (Deep Level Transient Spectroscopy – DLTS) [3] bei prilipimo temperatūriniu kitimu trukmiu spektroskopijos (Temperature Dependent Trapping Lifetime - TDTL) [4] metodai. DLTS eksperimentams buvo suformuoti Schottky diodai ant chemiškai paėsdinto Si paviršiaus užgarinant 30 nm storio Au sluoksnius. 100 nm storio Ni sluoksnis buvo užgarinamas ant priešingo Si plokštelės paviršiaus ominio kontakto sudarymui. TDTL metodas buvo pasitelktas siekiant išvengti kontaktų netobulumo efektų. TDTL metodas ypač efektyvus didelių apšvitų itėkių atvejų, kai radiacinių defektų tankis yra artimas arba viršija legirantu tanki.

Pasitelkiant išmatuotų DLTS (1 pav.) ir TDTL spektrų analizę buvo identifikuoti dominuojantys radiaciniai defektai įvairiais elektronų ir hadronų įtėkiais apšvitintuose, skirtingos technologijos Si dariniuose. Buvo ištirtos iškaitinimų nulemtos radiacinių defektų transformacijos bei įvertinti defektų koncentracijų kitimai. Būdingas DLTS spektrų kitimas, varijuojant iškaitinimo temperatūrą bei elektronų apšvitos įtėkį  $10^{16}$ -  $5 \times 10^{16}$  e/cm<sup>2</sup> intervale, yra iliustruojamas 1 pav. Nesunku pastebėti, kad radiacinių defektų tankis auga didinant apšvitos įtėkį, o iškaitinimas lemia giliųjų centrų transformavimąsi į seklesnes gaudykles.



1 pav. DLTS spektrai, išmatuoti apšvitintuose 6.6 MeV energijos elektronų  $\Phi_e=10^{16}$  ir  $\Phi_e=5\times10^{16}$  e/cm<sup>2</sup> įtėkiais n-tipo CZ Si bandiniuose, nekaitintuose ir iškaitintuose 280°C temperatūroje.

Pranešime bus apibendrinti radiacinių defektų identifikavimo ypatumai, defektų evoliucija po apšvitos ir iškaitinimų, bei gaudyklių tankio kitimai nuo apšvitos įtėkio ir iškaitinimo temperatūros. Bus aptarta šių defektų įtaka detektorių funkcinių charakteristikų degradacijai ir nuotėkių srovių formavimuisi.

Reikšminiai žodžiai: Si, radiaciniai defektai, dalelių detektoriai, defektų spektroskopija.

- [1] H. Spieler, *Semiconductor Detector Systems*, (Oxford University Press, New York, 2005).
- [2] C. Claeys, E. Simoen, Basic Radiation Damage Mechanisms in Semiconductor Materials and Devices, (Springer, Berlin, 2002).
- [3] P. Blood, J.W. Orton, The Electrical Characterization of Semiconductors: Majority Carriers and Electron States, (Academic Press Inc., San Diego 1992).
- [4] E. Gaubas, E. Simoen, and J. Vanhellemont, ECS J. Solid State Sci. Technol. 5, 3108 (2016).

## Nepolinio ir pusiau-polinio GaN auginimas ant Si su Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub> tarpsluoksniu

## Non-polar and semipolar GaN growth on Si with Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub> interlayer

Mantas Dmukauskas<sup>1</sup>, Arūnas Kadys<sup>1</sup>, Tadas Malinauskas<sup>1</sup>, Tomas Grinys<sup>1</sup>, Kazimieras Badokas<sup>1</sup>, Sandra Stanionytė<sup>2</sup>,

Martin Frentrup<sup>3</sup>, Rytis Dargis<sup>4</sup>, Andrew Clark<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Taikomųjų mokslų institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius

<sup>3</sup>The Cambridge Centre for Gallium Nitride, University of Cambridge, 27 Charles Babbage r., Cambridge, UK

<sup>4</sup>Translucent Inc., 952 Commercial St., Palo Alto, California 94303, USA

mantasdmuk@gmail.com

Conventional polar group-III nitrides MOW structures suffer from internal electric fields, which lead to band bending and a decreased efficiency and spectral instability of optoelectronic devices [1]. The internal electric fields can be reduced or totally avoided with semi-polar or non-polar GaN growth [2]. However, growth of such orientations is still costly. Integration of GaN to Si technology is a direct way for reducing the price of a new generation of devices applied in optoelectronics, photovoltaics and high power electronics. A large difference in thermal expansion, a mismatch in lattice and chemical reactivity must be solved in order to grow crack free, high quality epitaxial GaN films on Si. One possibility to integrate GaN on Si is the heteroepitaxial growth using rare earth oxides as a buffer [3]. This study is aimed to develop growth technology of non-polar and semipolar GaN on Si substrates using  $Er_2O_3$  as the buffer layer.

Thick Si (100) substrates were overgrown with a 300 nm-thick  $Er_2O_3$  (110) buffer layer by MBE (Fig. 1). Afterwards, a close-coupled showerhead metalorganic chemical vapor deposition reactor (MOCVD) was used to grow GaN on top of these templates in several growth campaigns. Growth conditions such as temperature, V/III-ratio, carrier gases and others were varied. The structural and optical properties of the grown epitaxial structures were investigated by X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM) and photoluminescence (PL) techniques.



Fig. 1  $Er_2O_3$  surface morphology prior GaN growth (SEM) and corresponding oxide domains scheme.

The XRD investigation showed the polycrystalline nature of GaN layers with dominant non-polar (11-20) and semipolar (10-13) orientations (Fig. 2). More detailed texture analyses revealed that both dominant GaN orientations are formed by growth of {0001} GaN planes parallel to the {111} facets of Si, thus causing the twinning of GaN layers. The c-axis in semipolar GaN is inclined by 33.17° from the substrate surface, and is tilted towards opposite in-plane directions for different twins. By analyzing SEM images taken under different sample tilt angles the facets of grown truncated pyramid GaN were identified, and 3D pyramids were reconstructed. The data was used to obtain kinetic Wulff diagrams, which were used to explain the preferential growth of (10-13) GaN. The PL spectra of semi-polar and nonpolar GaN showed a near band edge emission including luminescence from the stacking faults. A red shift was observed in spectra due to the expected thermal induced tensile strain in GaN.



Fig. 2 GaN growth on cubic Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub> lattice scheme.

Reikšminiai žodžiai: GaN, nonpolar, semipolar, MOCVD, Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

- [1] S. Nakamura, MRS Bull. 34 (2009) 101.
- [2] M. C. Schmidt et al., Jpn. J. Appl. Phys. 46 (2007) L126.
- [3] T. Schroeder, et al., Phys. Status Solidi C 6, (2009) 653.

## Inovacijos fizikos mokytojų rengime Vilniaus universitete

# Innovations in Physics Teachers Training at Vilnius University

Valdemaras Aleksa, Kazimieras Glemža Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

valdemaras.aleksa@ff.vu.lt

Pedagogų rengime VU vyksta ženklūs pokyčiai isteigtas Ugdymo mokslų institutas, kurio vienas vra kelti mokytoju rengimo kokybe, uždaviniu apjungiant VU Filosofijos fakulteto Pedagogikos ir Švietimo politikos centrų bei Edukologijos katedros vykdomas veiklas, o fizikos mokytojų rengime ypač svarbu tai, kad atsiranda nauju galimybiu aktyvinti ir didaktikos krypties mokslinius tyrimus. Fizikos mokytojų dalykinės ir pedagoginės kvalifikacijos kėlimas, žinoma, yra permanentinis uždavinys, tačiau svarbus naujas akcentas yra tai, jog šiuolaikinis mokytojas, kaip fizikos srities specialistas ir dar įgijęs specialiujų kompetencijų pagal Dalyko arba Mokyklos pedagogikos programą, turėtų palaikyti nuolatinį tamprų ryši su akademine bendruomene. Tai realizuojama moderniame Jungtiniame gyvybės mokslų centre, Nacionaliniame fizinių ir technologijos mokslų centre ar kt. Štai birželio mėnesį VU Teorinės fizikos ir astronomijos institutas ir Fizikos fakultetas atvėrė duris fizikos, chemijos ir biologijos mokytojams. Čia surengti vasaros kursai "Gamtamokslis ugdymas netradicinėse aplinkose", kurie, tikimasi, bus naudingi ugdant jaunaja karta.

Moksleivių, kaip būsimųjų mokytojų, pritraukimas studijuoti fiziką ir mokytojų kvalifikacijos kėlimas yra numatytas įkuriant edukacinį centrą - STEAM (angl. Science, Technology, Engineering, Arts, Mathematics) laboratorijų korpusą VU planetariumo patalpose, kuriame veiktų 8 laboratorijos: fizikos ir astrofizikos, šviesos technologijų, gyvybės mokslų, chemijos, mobiliuju technologijų ir robotikos, inžinerijos (išmaniųjų konstrukcijų ir medžiagų), vizualaus programavimo ir skaitmeninės gamybos. Moksleiviai čia mokytusi įvairių tyrimo metodų, su jais dirbtų jaunieji VU mokslininkai ir kartu tobulintu savo pedagoginius įgūdžius, mokytojai keltų kvalifikacija [1].

Fizikos fakultete jau nuo 1970 m. su pertrūkiais pagal penkerių metų studijų programą, kuri, priklausomai nuo aukštesniųjų instancijų, buvo įvairiai pertvarkoma, iki šiol rengiami fizikos mokytojai. Nuo 1988 m. fizikos mokytojų rengimo programas sėkmingai baigė virš 185 absolventų, o VU, 2012 m. atnaujinus mokytojų rengimo programos vykdymą [2], mokytojo kvalifikacija pagal programą *Dalyko pedagogika* arba laipsnio neteikiančią *Mokyklos pedagogikos* programą (po 60 kreditų) buvo suteikta 32 fizikams (1 pav.).



1 pav. Siekiančiųjų mokytojo kvalifikacijos skirstinys

Pranešime aptariamos VU parengto fizikos mokytojo profesijos realijos Lietuvoje, Fizikos fakultete vykdomų pedagoginių studijų kreditų kaupimo būdu naujovės pastaraisiais metais.

Reikšminiai žodžiai: Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Ugdymo mokslų institutas, STEAM.

- Vilniaus universitetas pasiruošęs perkrauti pedagogų rengimą (Universitas Vilnensis, 2017, birželis, 3).
- [2] Pedagogų rengimo reglamentas (Žin., 2012, Nr. 149-7654).

# GaSb pagrindu pagamintų lazerinių diodų triukšmų ir elektrinių charakteristikų tyrimas atliekant sendinimo eksperimentą

# GaSb-based laser diodes noise and electrical characteristics investigation during aging experiment

<u>Justinas Glemža</u>, Jonas Matukas, Sandra Pralgauskaitė, Vilius Palenskis Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius justinas.glemza@ff.vu.lt

GaSb pagrindu gaminami lazeriniai diodai (LD) su keteriniu bangolaidžiu, spinduliuojantys nuo 1,9 μm iki 3 μm bangos ilgio srityje, plačiai naudojami spektroskopijoje, medicinoje, karinėje pramonėje ir t. t. Deja, jų gamyba yra daug sudėtingesnė nei, pavyzdžiui, GaAs LD dėl reikalingų daugianarių lydinių. Tokiuose lazeriniuose dioduose yra žymi Ožė rekombinacija ir laisvųjų krūvininkų sugertis [1]. Todėl būtina išsiaiškinti fizikinius procesus, vykstančius bandinyje įprastomis jo veikos sąlygomis.

Viena populiariausių puslaidininkinių darinių tyrimo metodikų yra voltamperinės charakteristikos ir jos išvestinės *IdU/dI*, vadinamos elektrine išvestine (angl. *electrical derivative*), analizė. Atsižvelgiant į elektrinių fliuktuacijų jautrumą įvairiems įtaiso defektams ir netobulumams, egzistuoja sąryšis tarp *IdU/dI* ir triukšmų charakteristikų. Tinkamas lazerinio diodo veidrodžių pasyvavimas mažina paviršinių būsenų tankį, o tai lemia mažesnį triukšmo lygį, taigi, žemadažnio triukšmo tyrimas leidžia įvertinti LD veidrodžių padengimo proceso kokybe [2].

Šio darbo tikslas yra įvertinti sendinimo eksperimento metu vykstančius procesus GaSb pagrindu pagamintuose lazeriniuose dioduose tiriant triukšmų ir elektrinės išvestinės charakteristikas.

Sendinimo eksperimentui parinkti du 2,45 µm bangos ilgio LD, besiskiriantys veidrodžių paviršiais: vieno jų padengti pasyvacinėmis dangomis, kito – nedengti (tik nuskelti).

Yra žinoma, kad elektrinė išvestinė padeda lengvai identifikuoti lazerinės generacijos slenkstį [3]. Atlikti matavimai parodė, kad bandinių, kurių IdU/dI charakteristikose priešslenkstinėje srovės srityje stebimi maksimumų, elektrinio keletas aiškių triukšmo spektrinio tankio priklausomybėse nuo srovės stiprio taip pat matomi maksimumai (1 pav.). Bandinių, kurių elektrinis triukšmas mažėja srovei didėjant ( $S_U \sim 1/I$ ), tirtajame srovių diapazone IdU/dI maksimumai Maksimumai elektrinės nestebimi. išvestinės charakteristikose yra nulemti lygiagrečios pn sandūrai šuntuojančios varžos ir nuotėkio srovių kanalų egzistavimo.

Sendinimo metu elektrinės išvestinės bei triukšmų charakteristikų pokyčiai yra nedideli ir panašūs abiejų (su dangomis ir be) LD. Didžiausi pokyčiai stebimi abipusės koreliacijos koeficiento tarp elektrinių ir optinių fliuktuacijų priklausomybėje nuo tekančios srovės. Jau po 690 val., koreliacijos koeficientas iš teigiamo tapo neigiamu ir tokia priklausomybė išliko ir po 3380 val. Norint tai paaiškinti yra patogu elektrinį triukšmą išskirti į fliuktuacijas, kylančias iš (I) aktyviosios srities, (II) sąlyčio su kvantinių duobių struktūra ir (III) pasyviosios ar kontaktų srities. Pirmieji du triukšmų šaltiniai prisideda prie optinės spinduliuotės galios fliuktuaciju, o paskutinysis (III) - ne ir abipusės koreliacijos koeficientui įtakos nedaro. Taigi, neigiamas koreliacijos koeficientas vra susijes su tekančios srovės persiskirstymu tarp aktyviosios srities ir apvalkaliniu sluoksnių, nulemtu defektų, esančių sąlytyje su kvantiniu duobiu struktūra. Defektai, esantys aktyviojoje LD dalyje, yra atsakingi už teigiamą abipusės koreliacijos koeficientą.



1 pav. Lazerinio diodo su GaInAsSb kvantinėmis duobėmis: a) elektrinė išvestinė, b) elektrinio triukšmo spektrinio tankio priklausomybė nuo srovės stiprio

Atlikti tyrimai rodo, kad lazeriniuose dioduose su GaInAsSb kvantinėmis duobėmis elektrinės išvestinės bei elektrinio triukšmo priklausomybėse nuo srovės stebimi maksimumai. Tai susiję su sudėtingesne ilgesnio bangos ilgio lazerinių diodų gamyba. Sendinimo eksperimento metu didžiausi pokyčiai įvyko abipusės koreliacijos koeficiento priklausomybėje nuo srovės stiprio.

*Reikšminiai žodžiai: elektrinė išvestinė, elektrinis triukšmas, optinis triukšmas, koreliacijos koeficientas.* 

- [1] T. Hosoda, J. Chen, G. Tsvid, et al., Int. J. Hi. Spe. Ele. Syst. 20, 43–49 (2011).
- [2] R. Hakimi, M. C. Amann, Semicond. Sci. Technol. 12, 778–780 (1997).
- [3] D. Guo, L. Cheng, X. Chen, et al., J. Appl. Phys. 109, 043105 (2011.)

## Radionuklidų sklaidos iš paviršinio atliekyno tyrimas

## Radionuclide dispersion from a near-surface repository

Inga Gorina, Lina Gaigalaitė, Rasa Gvozdaitė, <u>Arūnas Gudelis</u> Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius arunas.gudelis@ftmc.lt

Paviršinis radioaktyviųjų medžiagų atliekynas įrengtas Bartkuškio miške, Širvintų rajone. Jis yra "Radon" tipo standartinis objektas. Radioaktyviosios atliekos čia talpintos nuo 1963 m. iki 1989 m. Tričio nuotėkis už atliekyno teritorijos ribų – matuota dirvožemio drėgmėje ir atvirame vandens telkinyje – užfiksuotas praėjus keleriems metams po atliekyno uždarymo. Vėliau pradėti nuolatiniai stebėjimai, kreipiant ypatingą dėmesį į tričio tūrinio aktyvumo variacijas gruntiniame vandenyje. Tuo tikslu įrengti specialūs gręžiniai įvairiomis kryptimis ir atstumais nuo atliekyno centrinės dalies – kaupo (1 pav.).

2005 m. įrengti du papildomi gręžiniai (Nr. 41 ir Nr. 42) kiek įmanoma mažesniu atstumu nuo kaupo – palei kaupo sieną. 2006 m. atlikta fizinių barjerų rekonstrukcija. Naujieji barjerai efektyviai sustabdė kritulių infiltraciją ir radionuklidų išplovimą iš kaupo į gruntinį vandenį. Nuo to laiko stebimi likutinių radionuklidų, t.y. anksčiau, prieš rekonstrukciją, patekusių į aplinkinį gruntą, sklaidos efektai. Dominuojantys radionuklidai yra <sup>3</sup>H, <sup>14</sup>C ir <sup>210</sup>Pb.



1 pav. Gręžinių išdėstymo kaupo atžvilgiu schema. 1-8, 41, 42 – gręžiniai. Juoda rodyklė rodo pagrindinę gruntinio vandens judėjimo kryptį, mėlyni skaičiai – vandens lygį.

2006 m. tričio tūrinio aktyvumo vidutinė metinė vertė gruntiniame vandenyje iš gręžinio Nr. 4, įrengto kelių metrų atstumu nuo kaupo pagrindine gruntinio vandens judėjimo kryptimi (1 pav.), buvo 21800 Bq l<sup>-1</sup>, 2007 m. – 7883 Bq l<sup>-1</sup>, o 2008 m. – 5531 Bq l<sup>-1</sup>. Radioanglies tūrinis aktyvumas šiame gręžinyje 2006 m. siekė 3 Bq l<sup>-1</sup> [1]. Laikui bėgant tričio tūrinis aktyvumas reikšmingai sumažėjo (2 pav.), tai rodo naujųjų fizinių barjerų efektyvumą.

Gręžiniuose Nr. 41 ir Nr. 42 užregistruotos neįprastos <sup>210</sup>Pb tūrinio aktyvumo vertės. Maksimali vertė siekė 452 mBq 1<sup>-1</sup> 2016 m. lapkritį. Europos Komisija yra nustačiusi ribinę šio radionuklido vertę geriamajame vandenyje, ji lygi 200 mBq l<sup>-1</sup>. Literatūros duomenimis, daugelyje šalių <sup>210</sup>Pb tūrinis aktyvumas vandenyje yra daug mažesnis už šią vertę.



2 pav. Tričio tūrino aktyvumo kaita gręžinyje Nr. 4 kiekvieną mėnesį. Periodais, kai rezultatas nepateiktas, gręžinyje nerasta vandens.

Greičiausiai, <sup>210</sup>Pb vandenyje netoli kaupo randasi kaip dukterinis <sup>222</sup>Rn produktas, tuo tarpu pastarasis dujinės formos nuklidas palyginti nesunkiai difunduoja iš kaupo po motininio <sup>226</sup>Ra radioaktyviojo skilimo [2].

Iš gręžinių Nr. 41 ir Nr. 42 imami gruntinio vandens ėminiai tiek iš viršutinės, tiek iš apatinės grunto vandeningojo sluoksnio dalies. Tyrimai leidžia stebėti radionuklidų sklaidą vertikaliąja kryptimi. Mėginiuose dažnai pasitaiko <sup>3</sup>H ir <sup>14</sup>C beta spektrų interferencija. Analičių aktyvumas nustatomas pritaikius dvigubos žymės metodą, prieš tai sukalibravus itin žemo fono scintiliaciniu tirpalu skaitikli Ouantulus-1220. Kalibravimui naudojamos pamatinės medžiagos, standartizuotos FTMC pirminiu TDCR metodu. Dvigubos žymės metodas reikšmingai sutrumpina analizės laiką, kurio pareikalauja radiocheminės procedūros.

Nustatyta, kad tam tikra dalis tričio ir radioanglies pašalinama iš atliekyno kaupo per pažemio atmosferą. Šis mobilumu pasižyminčių radionuklidų sklaidos kelias suponuoja jų kaupimąsi biotoje.

*Reikšminiai žodžiai: paviršinis atliekynas, gruntinis vanduo,*<sup>210</sup>*Pb, radioanglis, tritis.* 

- A. Gudelis, R. Gvozdaitė, V. Kubarevičienė, R. Druteikienė, Š. Lukoševičius, and A. Šutas, J. Env. Radioact. 101, 443 (2010).
- [2] A. Gudelis and I. Gorina, Nukleonika 60, 551 (2015).

## Pažemio atmosferos užterštumo radionuklidais Lietuvoje tyrimas

## Radionuclides in the near-ground level atmosphere in Lithuania

<u>Arūnas Gudelis</u>, Inga Gorina, Gintautas Kandrotas Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius arunas.gudelis@ftmc.lt

Paskutinis reikšmingas radiologinis įvykis, pasižymėjęs globaliosiomis pasekmėmis, buvo Fukušimos AE avarija 2011 m. kovą. Nepaisant tolimo atstumo jis buvo aiškiai juntamas įvairiuose žemynuose, ypač šiauriniame Žemės pusrutulyje, neišskiriant Europos ir Lietuvos [1-3].

Tolimosios radionuklidų pernašos atmosferoje tyrimai Lietuvoje buvo atliekami imant aerozolinės komponentės ėminius Vilniuje ir Vosyliškių stotyje, įrengtoje 3,5 km atstumu nuo Ignalinos AE.

Ėminių paėmimo tikslu 2016 m. buvo atliekamas nepertraukiamas pažemio atmosferos oro rinkimas, filtruojant orą per aerozolinius FPP-15 (Petrianovo) tipo filtrus. Šių filtrų efektyvumas sulaikant ore esančias dulkeles ir smulkias skendos daleles, prie kurių prikimba ir yra pernešami radionuklidai, yra labai aukštas – siekia 99 %. Vosyliškių stotyje eksponuoti 24 filtrai, apimantys laikotarpį nuo 2015 m. gruodžio 30 d. iki 2017 m. sausio 11 d. Vilniuje oro filtrai eksponuoti taip pat nepertraukiamu režimu, tik naudota kur kas mažesnio našumo orapūtė. Filtruose sukauptų radionuklidų aktyvumas matuotas gama spektrometrais su kalibruotais puslaidininkiniais gryno germanio detektoriais (HPGe).

Tyrimų metu pažemio atmosferos ore Vosyliškėse stebėti gamtiniai radionuklidai <sup>7</sup>Be ir <sup>210</sup>Pb (1-2 pav.) bei penkis epizodus – technogeninės kilmės <sup>137</sup>Cs, kurio aktyvumo koncentracija atitiko globalųjį pasiskirstymą. Kitų technogeninių radionuklidų nenustatyta.



1 pav. <sup>7</sup>Be tūrinis aktyvumas pažemio atmosferos ore Vosyliškėse.

1-2 pav. pateikti duomenys rodo, kad stebėtų gamtinių radionuklidų (<sup>7</sup>Be ir <sup>210</sup>Pb) aktyvumo koncentracijos atitinka jų globalųjį pasiskirstymą. Lygindami 2016 m. išmatuotas radionuklidų tūrinio aktyvumo vidutines vertes su anksčiau nustatytomis (2012-2015 m. laikotarpiu) gausime tokius rezultatus: vidutinis metinis <sup>7</sup>Be tūrinis aktyvumas 2016 m. buvo

2780  $\mu$ Bq m<sup>-3</sup> (standartinis nuokrypis 1683  $\mu$ Bq m<sup>-3</sup>), o vidutinis metinis <sup>210</sup>Pb tūrinis aktyvumas buvo 363  $\mu$ Bq m<sup>-3</sup> (standartinis nuokrypis 228  $\mu$ Bq m<sup>-3</sup>), tuo tarpu 2012, 2013, 2014 ir 2015 metais <sup>7</sup>Be vidutinės tūrinio aktyvumo vertės buvo, atitinkamai, 2617  $\mu$ Bq m<sup>-3</sup>, 2508  $\mu$ Bq m<sup>-3</sup>, 2730  $\mu$ Bq m<sup>-3</sup> ir 2026  $\mu$ Bq m<sup>-3</sup>, o <sup>210</sup>Pb atveju – atitinkamai, 507  $\mu$ Bq m<sup>-3</sup>, 438  $\mu$ Bq m<sup>-3</sup>, 495  $\mu$ Bq m<sup>-3</sup> ir 361  $\mu$ Bq m<sup>-3</sup>.



2 pav. <sup>210</sup>Pb tūrinis aktyvumas pažemio atmosferos ore Vosyliškėse.

Poveikis gyventojams dėl radionuklidų, įkvepiamų į plaučius, buvo vertinamas pagal efektinės dozės koeficientų vertes. Esant vienodam aktyvumui, didesnę dozę sukuria <sup>210</sup>Pb spinduliuotė. Pastarąją aplinkybę galima paaiškinti papildomu dukterinių švino-210 skilimo produktų (<sup>210</sup>Bi ir <sup>210</sup>Po) poveikiu.

Atlikus dozės skaičiavimus nustatyta, kad vidutinis gyventojas Ignalinos AE regione 2016 m. patyrė tokias metines vidinės apšvitos dozes dėl įkvėptų radionuklidų: 0,0013 μSv dėl <sup>7</sup>Be, 0,00088 μSv dėl <sup>137</sup>Cs ir 17,9 μSv dėl <sup>210</sup>Pb. Dozės, kurios yra nulemtos <sup>7</sup>Be ir <sup>137</sup>Cs jonizuojančiosios spinduliuotės, išlieka daug mažesnės už apšvitą, sukeliamą švino izotopo <sup>210</sup>Pb spinduliuotės – vertinimai rodo, kad šio radionuklido indėlis gali sudaryti apie 2 % gyventojams leistinos metinės efektinės dozės, kuri yra lygi 1 mSv.

Reikšminiai žodžiai: efektinė dozė, <sup>7</sup>Be, <sup>137</sup>Cs, <sup>210</sup>Pb.

- A. Gudelis, R. Druteikienė, G. Lujanienė, E. Maceika, A. Plukis, and V. Remeikis, J. Env. Radioact. 109, 13 (2012).
- [2] G. Lujanienė, S. Byčenkienė, P.P. Povinec, and M. Gera, J. Env. Radioact. 114, 71 (2012).
- [3] A. Gudelis, I. Gorina, T. Nedveckaitė, P. Kovař, P. Dryak, and J. Šuran, Appl. Radiat. Isot. 81, 362 (2013).

# Pavienių molekulių fluorescencijos mikroskopija DNR sąveikos su BfiI restriktazėmis tyrimuose

# Studies of DNA interaction with BfiI restriction enzymes using single - molecule fluorescent microscopy

Marijonas Tutkus<sup>1</sup>, Giedrė Karzaitė<sup>1</sup>, <u>Šarūnė Ivanovaitė</u><sup>1</sup>, Tomas Marčiulionis<sup>1</sup>, Danielis Rutkauskas<sup>1</sup>, Mindaugas Zaremba<sup>2</sup>

> <sup>1</sup> Vilniaus universitetas, Biotechnologijos institutas, Saulėtekio al. 7, 10257 Vilnius <sup>2</sup> Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius danielis@ar.fi.lt, marijonas@ar.fi.lt

Restrikcijos endonukleazės (REazės) – tai fermentai, kurių funkcija yra atpažinti specifinę DNR taikinio seką ir ją perkirpti. Jos yra bene vienas svarbiausių įrankių molekulinėje biologijoje, genetikoje ir biotechnologijoje, kurios palengvina laboratorijoje atliekamas analizes.

Šiame darbe tiriamos REazės: WT BfiI, BfiI S-S, BfiI K107A. BfiI baltymai, išskiriami iš Bacillus firmus S8120 štamo, yra priskiriami IIS tipo restrikcijos fermentams. BfiI restriktazė skiriasi nuo kitų IIS tipo restriktazių tuo, kad skirtingai nuo daugelio restrikcijos fermentų DNR karpoma nesant Mg<sup>2+</sup>, bet šis kofaktorius pagreitina karpymą dėl konformacinių pokyčių. Bfil pasiekia maksimalų aktyvumą tik tuomet, kai saveikauja su dviem restrikcijos atpažinimo sekomis. BfiI REazė atpažįsta nepalindromines asimetrines heksanukleotidines ACTGGG sekas. Šis fermentas karpo dvigrandę DNR vienu po kito einančiais etapais, panaudojant vieną aktyvų centrą, pirmiausia karpoma DNR apatinė grandinė, o po to viršutinė [1, 2].

Šiame indukuojančio darbe baltymo, DNR kilpojimąsi, analizei, dinamikai ir konformaciniams pokyčiams nustatyti, mes taikome smFRET metodą. Ši technologija yra vienas iš pagrindinių biofizikinių metodų, labiausiai pritaikomų vienos molekulės mikroskopijos ar spektroskopijos tyrimams, nes atstumų tarp dažiklių ruožas, kuriame yra jautrus FRET, gerai sutampa su biomolekulių dydžiais. Pavienių molekulių mikroskopija yra galingas metodas, padedantis analizuoti konformacine dinamika ir laikinas nehomogeniškas sąveikas [3].

Analizuojant pavienes molekules TIRF mikroskopu biotinilintos ir FRET pora (cy3B, Atto647N arba cy3, Atto647N) žymėtos DNR molekulės buvo imobilizuotos ant silanizuoto ir PEGilizuoto stiklo paviršiaus per neutravidiną. Ypatingai stipri ir ilgai trunkanti biotinoneutravidino sąveika užtikrina, kad imobilizuotos molekulės neatsiskirs nuo paviršiaus, ir todėl jos gali būti analizuojamos net iki kelių valandų. BfiI dimeras, prisijungęs du DNR taikinius, indukuoja DNR kilpojimąsi. Tokiu būdu, dažikliai, esantys prie REazės taikinių, suartėja, ir donoro fluorescencijos energija rezonansiniu būdu yra pernešama į akceptorių. Pernašos sparta priklauso nuo atstumo tarp dažiklių (*žr. 1 paveikslėlį*).



1 pav. Eksperimento schema

Mūsų atlikti BfiI tyrimai parodė, kad vienas dimeras prisijungia du taikinius, esančius ant vienos DNR molekulės, ir taip suformuoja vieno tipo DNR kilpą. BfiI aktyvaus centro mutantas K107A parodė skirtingą dinaminę sąveiką su DNR negu S-S skersiniais ryšiais sujungtas BfiI S-S baltymas.

*Reikšminiai žodžiai: pavienės molekulės, FRET, restrikcijos endonukleazės, TIRF, DNR baltymo sąveika.* 

### Literatūra

[1] D. Golovenko, E. Manakova, L. Zakrys, M. Zaremba. Nucleic Acids Res. (2014).

[2] S. Grazulis, E. Manakova, M. Roessle, M. Bochtler. Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. (2005).

[3] H. P. Lu. Methods in Molecular Biology (2005).

### Elektromagnetinės spinduliuotės valdymas pasyviuoju rezonatoriumi-keitikliu

## A control of electromagnetic radiation flux by means of the passive resonator-converter

Dainius Jasaitis<sup>1</sup>, Einius Šatrauskas<sup>1</sup>, Gennadij N. Lukyanov<sup>2</sup>, Igor N. Serov<sup>3</sup>, Artūras Jukna<sup>1</sup>,

<sup>1</sup>Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Fizikos katedra, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius

<sup>2</sup>State University of Informations Technologies, Mechanics&Optics Sablinskaya St. 14, 197101, St. Petersburg, Russia,

<sup>3</sup>AIRES Foundation, 411 office, Vyborgskaya emb., 61,197342, St. Petersburg, Russia

dainius.jasaitis@vgtu.lt

Elektromagnetinių bangų (EMB) reikšmė kasdieniame gyvenime niekam nebekelia abejonių, o patys įvairiausi jų pritaikymai apima gyvybiškai svarbias informacijos perdavimo ir komunikavimo sritis. Tačiau modernūs elektroniniai prietaisai taip pat sukuria EM smogą, neigiamai viekiantį gyvuosius organizmus [1].

Šiame darbe ištirtas EMB smogo valdymas pasyviuoju rezonatoriumi-keitikliu (RK), sudarytu iš monokristalinio Si plokštelės, kurios paviršių dengia dviejų dalių žiedinė EMB difrakcijos gardelė – antenų, sudarančių sąlygas atspindėtų EMB interferencijai (1 pav.).



1 pav. Elektromagnetinės spinduliuotės rezonatoriaus keitiklio ekvivalentinė schema

Darbe siekta ištirti EM lauko stiprį, EMB srauto tankį tolimojoje (atstumu  $L > 10 \lambda$ , čia  $\lambda$  – plačios dažnių juostos signalo centrinis bangos ilgis) ir artimojoje (atstumu < 10  $\lambda$ ) zonose bei RK efektyvumą  $\geq$  8 GHz dažnių ruože, naudojant  $\geq$  8 GHz dažnių juostos jutiklį ir tyrimų schemą, pavaizduotą 2 pav.





Nustatyta, kad RK EMB atspindžio atveju, dalis kritusios bangos energijos atsispindi. Teorinių tyrimų rezultatai [2] leidžia daryti išvadą, jog kritusi bei atspindėta nuo RK paviršiaus bangos interferuoja, sukurdamos EMB, kurios amplitudė, dažnis ir fazė skiriasi nuo kritusios/atspindėtos bangų analogiškų charakteristikų. EMB atspindys nuo RK paviršiaus priklauso nuo RK atstumo iki spinduliuotės šaltinio *L*, nuo į jį kritusios EMB galios *P*, ir jos dažnio v (t.y. *hv* energijos). Nustatyta, jog  $P_{\min0(0,9 \text{ GHz})} \ge 2$  W, esant centriniam smogo dažnių juostos dažniui ~0,9 GHz. Išmatavus spinduliuotės galios pokytį, RK lokalizuojant  $L = 2 \div 10\lambda$  atstumu nuo jutiklio, nustatyta, jog optinio pralaidumo režime RK sąveikos su EMB rezultatas

panašus į elgesį metalinės plokštelės, ekranuojančios EMB elektrinę dedamąją. Tačiau optinio atspindžio režime atsispindėjusi EMB interferuoja su kritusia, o rezultate kritusios bangos amplitudė  $0.9 \div 2.5$  GHz dažnių ruože, sumažėja ~20 %, jei RK lokalizuotume nedidesniu nei  $3\lambda$  (~ 0.5 m) atstumu nuo jutiklio.

Gauti tyrimų rezultatai leidžia taip pat daryti prielaidą, jog RK, jam esant artimoje elektrinio lauko zonoje, kritusi EMB, kurios  $P \ge P_{\min}$ , gali susikurti elektrinio pramušimo antenose sąlygą. Elektrinio išlydžio metu RK spinduliuoja plačios dažnių juostos signalus, kurių dažnis priklauso tiek nuo į jį kritusios EMB charakteristikų, aplinkos, kurioje vyksta elektrinis išlydis, dujų cheminės sudėties ir vidinės, smulkiosios antenų fraktalų sandaros.

RK optinio atspindžio savybę galima sustiprinti iš atskiru RK sudarant grupes. Tiek pavieniu RK, tiek ir ju grupių charakteringasis slopinimas (t.y. atstumas, kuriuo nutolus nuo šaltinio, kritusios EMB amplitudė/galia susilpnėja e = 2.7182... kartų) skirtingas, RK veikiant optinio pralaidumo ir atspindžio sąlygomis. Jei RK charakteringasis slopinimas grupės atveju pralaidumo/atspindžio režime beveik nesiskiria, tai pavienio RK saveikos su elektromagnetine banga charakteringasis slopinimas rezultate, optinio pralaidumo salvgomis eksperimentiškai stebimas esant didesniems L, kai RK lokalizuotas tarp šaltinio ir jutiklio.

Įvertinus RK antenos plotą, žinant šaltinio spinduliuotės galią bei RK atstumą *L* iki šaltinio, suskaičiuotas minimalus, į RK kritusios EMB, kurios centrinis dažnis 0,9 GHz, galios tankis  $\rho_{\min(0.9 \text{ GHz})} \ge$ 490 mW/S<sub>RK</sub>, reikalingas RK sužadinimui. Tad skirtingų rūšių/dydžių RK įtaka eksperimentų rezultatams gali skirtis. Kritusios EMB galios tankiui didėjant, sužadintas RK spinduliuoja ypatingai plačios dažnių juostos EMB, kurių centrinis dažnis priklauso nuo kritusios EMB charakteristikų, RK vidinės fraktalų struktūros ir antenos geometrijos.

Reikšminiai žodžiai: elektromagnetinės bangos, spinduliuotės galia, rezonatorius-keitiklis, charakteringasis bangos slopinimas.

- G. Redlarski, B. Lewczuk, A. Zak, A. Koncicki, M. Krawczuk, J. Piechocki, K. Jakubiuk, P. Tojza, J. Jaworski, A. Skarbek, and D. Gradolewski, BioMed Res. Intern. 2015, 1 (2015).
- [2] А.В. Копыльцов, К.А. Коршунов, Г.Н. Лукьянов, И.Н. Серов, Региональная информатика и информационная безопасность. Сборник трудов. 2/СПОИСУ, 383 (2016).

## HOPE projekto rezultatai: fizikos studijų tobulinimas Europoje

## Hope Project Outcomes: Development of Physics Studies in Europe

<u>Violeta Karenauskaitė</u><sup>1</sup>, Gintaras Dikčius<sup>1</sup>, Romualda Lazauskaitė<sup>2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Lietuvos edukologijos universitetas, Studentų g. 39, LT-10222 Vilnius <u>violeta.karenauskaite@ff.vu.lt</u>

Europos sajungos universitetų fizikų bendruomenė jau prieš porą dešimtmečių ėmėsi iniciatyvų, stengiantis stiprinti fizikos studijų patrauklumą, pirmiausia, apžvelgiant ir analizuojant universitetų gerąją patirtį, stimuliuojant studentų, dėstytojų mainus, organizuojant dalykines konferencijas į kurias kviečiami studentai bei vidurinių mokyklų mokytojai. Šiuo tikslu nuo 1995 metų buvo gyvinami studentų mainai Europos fizikų draugijos grantais (ESMS), Europiniais TEMPUS, vėliau ERASMUS mobilumo programomis. Europos Komisija pagal Mokymosi visą gyvenimą (LLP) programą finansavo keletą trijų metų projektų - EUPEN, STEPS, fizikos studijų STEPS2 skirtu analizei bei rekomendacijoms.

2013 – 2016 metais buvo vykdomas *Europos fizikos švietimo tinklo* (EUPEN) projektas HOPE (*Horizons of Physics Education*). Jame dalyvavo ir bendradarbiavo 71 projekto partneris iš 31 šalies, jų tarpe ne tik universitetai, bet ir Europos šalių mokytojų bei studentų asociacijos, CERN, Europos fizikų draugija, verslo kompanijos ir kiti. Vilniaus universitetas ir Lietuvos edukologijos universitetas buvo Lietuvos atstovai šiame projekte [1].

Pagrindinis projekto tikslas – atkreipti fizikų bendruomenės ir visuomenės dėmesį į fizikos mokslo svarbą Europos socio-ekonominėje erdvėje, pateikti rekomendacijas ir gerosios praktikos pavyzdžius akademinėms bendruomenėms, studijuojantiems ir dirbantiems įvairiose ūkio šakose fizikams atliepiant visuomenės ir jų pačių poreikius. Šiam tikslui pasiekti būtina efektyvinti fizikų dialogą su visuomene, ieškoti kelių ir būdų kaip parengti daugiau ir aukštesnės kompetencijos fizikos specialistų darbo rinkai ir ypač nuolatos besimokančių mokytojų.

HOPE gvildentos keturios pagrindinės temos, svarbios fizikų rengimui nuo mokyklos iki universiteto baigimo:

- Jaunų žmonių skatinimas pasirinkti fizikos studijas;
- Fizikos absolventų kompetencijos, ypač novacijoms ir verslumui;
- Europos fizikos studijų pasaulinis konkurencingumas;
- Fizikos mokytojų rengimo tobulinimo strategija.

Šios temos buvo nagrinėjamos keturių darbo grupių pasitarimuose, kurie vyko įvairiuose partnerių universitetuose. Tai leido susipažinti su fizikos mokymo gerąja patirtimi ir iškylančiomis problemomis. Visų darbo grupių rezultatai buvo pristatyti ir aptarti trijuose metiniuose forumuose Helsinkio, Koimbros ir Konstancos universitetuose. Pagrindiniai projekto rezultatai ir rekomendacijos fizikų ir su fizika susijusių programų studijoms pristatomi projekto ataskaitoje [2]. Išsamesnės rekomendacijos fizikos studijų patrauklumo ir kokybės gerinimui yra rengiamos projekto knygoje, kurią planuojama išleisti 2017 metų rudenį.

Projekte didelis dėmesys buvo skirtas išsiaiškinti kodėl jauni žmonės renkasi fizikos studijas, kokie ir kaip ekonominiai, socialiniai bei emociniai veiksniai įtakoja fizikos studijų (ne)pasirinkimą. Projekte buvo apklausti 2485 studentai iš 34 universitetų (101 Vilniaus universiteto studentas) ir 1500 gabių vaikų iš 13 šalių (29 Lietuvos moksleiviai iš Lietuvos) [3]. Pranešime bus palyginti Lietuvos ir kitų šalių apklausų rezultatai.

HOPE projekte taip pat išsamiau apžvelgiamos fizikos mokytojų skaičiaus mažėjimo daugelyje Europos šalių tendencijos, šio reiškinio priežastys ir grėsmės. Problemų analizė ir gerosios patirties pavyzdžiai yra svarbūs suvokiant mokytojo svarbą fiziko karjeros pasirinkime, ieškant būdų tobulinti fizikos mokytojų rengimą, keliant jau dirbančių mokytojų kvalifikaciją bei motyvuojant moksleivius rinktis fizikos mokytojo profesiją Lietuvoje [4].

Reikšminiai žodžiai: projektas HOPE, fizikos studijos, fizikos mokytojų rengimas.

#### Literatūra

- [1] *HOPE projekto puslapis* [žiūrėta 2017 m. liepos 5 d.]. Prieiga per internetą: http://hopenetwork.eu/
- [2] HOPE projekto ataskaita [žiūrėta 2017 m. liepos 5 d.]. Prieiga per internetą: http://hopenetwork.eu/content/hope-final-report/
- [3] Jones G., Michelini M. Questionnaires for university and schools students. (2014). [žiūrėta 2017 m. liepos 5 d.]. Prieiga per internetą: http://www.hope-network-annual-forum2014.eu/wp-content/

uploads/2014/04/Helsinki-talk [4] Aleksa V., Dikčius G., Karenauskaitė V. The structure of physics

(F) Hersi V., Dictas C., Ratenaustate V. The structure of physics teacher education at Vilnius University, HOPE Forum, September, 07/10/2016, Constanca, Romania, [žiūrėta 2017 m. liepos 5 d.]. Prieiga per internetą: http://hopenetwork.eu/sites/default/files/event/Booklet\_HOPE\_ forum2016.pdf

## Ląstelės bioinžinerija - inžinerinės biofizikos pradžia

# Bioengineering of the cell as the first step to the biophysengineering

Dobilas Kirvelis

Lietuvos Mokslininkų Sąjunga, klb. LAISVIEJI, J. Basanavičiaus 6, LT-01118, Vilnius

dobilas@kirvelis.lt

Prasideda nauja Sintetinės Biologijos, t. y. Gyvybės Bioinžinerinės kūrybos – Inžinerinės Biofizikos epocha. Tradicinis GYVOJO PASAULIO - Biologijos ir Gyvuju Sistemų Biofizikos mokslinio pažinimo metodas TYRINĖTI. keičiamas metodu ANALIZE per SINTEZE. Pirmasis sėkmingas eksperimentinis žingsnis šia kryptimi ląstelės lygyje – J. Craig Venter'io grupė privertusi mieles gaminti ne tik etanolį, bet tokias medžiagas, kokių Craig Venter'iui reikia - pagal tikslingai susintetintą biotechnologinę DNR programą [1]. Žmogus-bioinžinierius pradėjo kurti ketvirtąją (prie 3 natūraliųjų: ARCHAEA, BACTERIA, ir EUCARYA) Žemės Gyvybės karalija – SYNTHETIKA. Kad gyvoji ląstelė veikia kaip "technologinis kombinatas", dar 1956 m. teoriškai išsamprotavo G. Gamov'as ir M. Yčas [2]. Bet JAV Nacionalinė Tyrimų Taryba (NRC) tokiu požiūriu tyrimus palaimino tik 1999 m. kaip Nanotechnology, pratesė kaip Nano-Bio-Info-Cogno (NBIC) technologiju konvergencija 2003 m., ir dar 2013 m. kaip Convergence platforms: NBIC, Human-Scale, Earth-Scale, Sociatal-Scale iki 2030 m. [3]. Bandymas j šiuos tyrimus įtraukt ES nepavyko, HORIZON 2020 programa tai ignoravo, nežiūrint to, kad 5 ES mokslo institutai, Olandijos inovacijų Rathenau I-to iniciatyva, bandė įtraukt Bioengineering 21th century programą pateikus pilotinio tyrimo rezultatus [4]. Lietuvoje buvo bandyta vystyti Nano-Bio-Info-Cogno-Eco, bet dėl neigiamos HORIZON'to nuostatos, ši bioinžinerinės kūrybos orientacija liko be tolimesnio vystymo [5]. Harvardo ir Baltimorės biosintezės laboratorijos, kuriančios ląstelės biocheminį modelį 2012 metais pademonstravo, kad kompiuteriu užrašytas tekstas specialių mikročipų pagalba gali būti užrašytas į susintetinta DNR atminties struktūra, ir taip pat buvo dekoduotas - atkurtas kompiuteriniu tekstu [6]. Taip eksperimentiškai pademonstruota bio-lastelės skaitmeninės sintezės galimybė. Tampa akivaizdu, kad tokią DNR konverguojant su kamieninėmis ląstelėmis reali trimačio bio-printerio galimybė - naujų bio-rūšių daugialąsčių bio-organizmų - biochimerų sintetinė Pateikiamas šios bio-inžinerinės kūrybos gamyba. teorinės biofizikos pagrindas - kaip Uždarojo ciklinio kodavimo-dekodavimo (Closed-Loop Coding-Decoding, bioinformacinė koncepcija CL-CD) igyvendinant Nano-Bio-Info-Cogno-Eco koncepcija [7]. Visa tai rodo, kad XXI-ojo amžiaus bio-inžinerinė kūryba veda link naujos bio-technologinės visuomenės reformacijos -TRANSHUMANIZM'o. O Biofizika, kaip XXI-jo a. Bioinžinerija, tampa pamatine šios, naujai iškylančios mokslo-technologinės kūrybos epochine ideologija neišvengiamai ateinanti ir į Lietuvą.



## l pav. Inžinerinės biofizikos kaip Nano-Bio-Info-Cogno-Eco-Eco technologijų konvergencijos mokslų schema

Reikšminiai žodžiai: biofizika, bioinžinerija, konverguojančios technologijos, bio-sintezė

### Literatūra

[1] Daniel G. Gibson, at all(24), J. Craig Venter. Creation of a Bacterial Cell Controlled by a Chemically Synthesized Genome. *Science* 02 Jul 2010: Vol. 329, Issue 5987, pp. 52-56;

[2] Gamow, G., Yčas, M.: The cryptographic approach to the problem of protein synthesis. In: Yockey, H.P. (ed.) Symposium on Information Theory in Biology. Gatlinburg, Tennessee. Pergamon Press, New York (1956), pp 63-69;

[3] Convergence of Knowledge, Technology, and Society: Beyond Convergence of Nano-Bio-Info-Cognityve of Technologies (2013); http://www.wtec.org/NBIC2/Docs/FinalReport/Pdf-secured/NBIC2-Fi nalReport-WEB.pdf

[4] Making Perfec Life European Governance Challenges in 21st Century Bio-engineering;

http://www.europarl.europa.eu/RegData/etudes/etudes/join/2012/4715 74/IPOL-JOIN\_ET(2012)471574(ANN01)\_EN.pdf

[5] D. Kirvelis, O. Rukšėnas. Konverguojančios technologijos ir ateities Nano-Bio-Info-Cogno-Eco verslai. Tarptautinis verslas: inovacijos, psichologija, ekonomika. Vilnius: VU, 2011, t. 2, Nr. 3. p. 28-38;

[6] G. M. Church, Yuan Gao, Sriram Kosuri. Next-Generation Digital Information Storage in DNA. Sciencewww.sciencemag.org. Published Online, August 16 2012. <Science Express;

http://arep.med.harvard.edu/pdf/Church\_Science\_12.pdf

[7] D. Kirvelis. The Closed-Loop Coding-Decoding and Analysis by Synthesis as Basics Anticipatory Principle Functional Organization in the Living Systems. *In* Cognitive Systems Monographs, Springer, pp 137-162, 2016;

https://www.researchgate.net/publication/283105091\_The\_Closed-Lo op\_Coding- Decoding\_and\_Analysis\_by\_Synthesis\_

<u>as Basics Anticipatory Principle Functional Organization in the</u> <u>Living\_Systems</u>

## Fononais paskatinto krūvininkų tuneliavimo tyrimas ZnS plėvelėse

# Investigation of phonon-assisted carrier tunneling in ZnS films

Antanas Kiveris, Vytautas Lapeika

Lietuvos edukologijos universitetas, Gamtos, matematikos ir technologijų fakultetas, Studentų g. 39, LT-08106 Vilnius antanas.kiveris@leu.lt

Prasidėjus sparčiam nanotechnologijų vystymuisi pradėtos intensyviai gaminti ir tirti plonos, keliolikos ar keliasdešimt nanometrų storio puslaidininkių plėvelės. Eksperimente tirtos ZnS plėvelės buvo pagamintos vakuuminio garinimo būdu (įrenginyje VBH-1, su šaldymo gaudykle, pasiekiant  $2x10^{-5}$  Pa), išgarinant ZnS milteliais užpildytą garintuvą. Plonos (iki 10 µm) ant kvarcinio stiklo, padengto laidžiu sluoksniu ZnS plėvelės vaizdas pateiktas 1 paveiksle.



1 pav. Trimatis ZnS plėvelės vaizdas, gautas "Vecco" skenuojančio zondo mikroskopu (SZM). (Už nuoširdžią pagalbą tiriant ZnS plėveles SZM metodu esame dėkingi dr. Virginijui Bukauskui ir magistrantui Mantui Lapeikai).

ZnS plėvelių voltamperinės charakteristikos (VACH) buvo išmatuotos SZM metodu, esant skirtingoms plėvelių temperatūroms.

elektronai Padarius prielaidą, kad tiriamos medžiagos ir elektrodų sandūroje tuneliuoja per barjerą, pereidami lauko poveikyje iš lokalizuotų energetinių būsenų į laisvas būsenas dalyvaujant fononams, galima teigti, kad elektros srovės stipris tiriamoje plėvelėje, yra proporcingas tuneliavimo spartai W. Krūvininkų tuneliavimo elektriniame lauke dalyvaujant fononams teorija leidžia paskaičiuoti tuneliavimo tikimybių W(T,E) priklausomybes nuo temperatūros T ir elektrinio lauko stiprio E, kurios paprastai nera tiesines. W(T,E)analitinė išraiška, kurią dar 1976 m. pateikė Š. Kudžmauskas [1], kaip matysime toliau, pakankamai gerai paaiškina eksperimento duomenis:

$$W(T, E) = \frac{eE}{(8m^* \varepsilon_{\rm T})^{1/2}} [(1 + \gamma^2)^{1/2} - \gamma]^{1/2} [1 + \gamma^2]^{-1/4}$$
  
  $\times \exp\{-\frac{4}{3} \frac{(2m^*)^{1/2}}{eE\hbar}$   
  $\times \varepsilon_{\rm t}^{3/2} [(1 + \gamma^2)^{1/2} - \gamma]^2 [(1 + \gamma^2)^{1/2} + \frac{1}{2}\gamma]\}, \qquad (1)$ 

čia 
$$\gamma = (2m^*)^{1/2} \Gamma^2 / 8e\hbar E \varepsilon_T^{1/2}$$
,  $\Gamma^2 = 8a(\hbar\omega)^2 (2n+1)$ 

- centro absorbcijos juostos plotis,  $\hbar\omega$  - fonono energija,  $\varepsilon_T$  - priemaišinio centro energinis gylis, *a* electrono-fonono sąveikos stiprį nusakanti konstanta ir  $n = [\exp(\hbar\omega/k_T T)) - 1]^{-1}$  - Planko pasiskirstymas, suteikiantis tunelinei spartai priklausomybę nuo *T* ir  $\hbar\omega$ .

2 paveiksle pateiktos W(T,E) priklausomybės 291 -325 K temperatūrų intervale (skaičiavimui naudoti parametrai įrašyti paveiksle) ir eksperimente SZM metodu išmatuotų elektros srovių kitimo sulyginimo kreivės logaritminiame mastelyje.



2 pav. ZnS plėvelių eksperimentinių VACH eigų (simboliai) sulyginimas su Kudžmausko teorinėmis tuneliavimo spartos eigomis (linijos).

Iš šio sulyginimo aiškėja, kad Š. Kudžmausko pasiūlyta tuneliavimo elektriniame lauke dalyvaujant fononams teorija, sėkmingai aprašo eksperimentinius ZnS plonų plėvelių elektrinio laidumo kitimus ir galima teigti, kad ši teorija, besiremianti bangine mechanika yra bendresnė ir sėkmingesnė už paplitusias pusiau empirines, plėvelių laidumui aprašyti naudojamas klasikinės mechanikos teorijas.

Reikšminiai žodžiai: fononais paskatintas tuneliavimas, elektron-fononinė sąveika.

#### Literatūra

[1] A. Kiveris, Š. Kudžmauskas, and P. Pipinys, Phys. Status Solidi A **37**, 321 (1976).

# Fizikinių <sup>137</sup>Cs migracijos parametrų kaitos dirvožemyje tyrimai

# Study of variation of physical <sup>137</sup>Cs migration parameters in soil

Marina Konstantinova, Benedikta Lukšienė, Nikolaj Tarasiuk, Evaldas Maceika Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius marina.konstantinova@ftmc.lt

Paskutinių dešimtmečių avarijos branduoliniuose įrenginiuose (Černobylio atominė elektrinė (ČAE), Fukušimos atominė elektrinė (FAE)), sukėlė didelį radioekologinių tyrimų atgimimą, įvertinant oro, vandens telkinių bei dirvožemio užterštumą radionuklidais, modeliuojant galimas poavarines situacijas bei įvertinant galimas pasekmes žmogui [1].

Radionuklidų pasiskirstymo dirvoje tyrimai yra labai vertingi analizuojant radionuklidų migracijos mechanizmus bei prognozuojant apšvitą įvairiomis situacijomis; taip pat nustatant radionuklidų migracijos parametrus, kurie yra svarbūs įvertinant radionuklidų migracijos gylį, jų patekimą į gruntinius vandenis bei augalus ir dirvožemio natūralaus apsivalymo spartą.

Praėjus daug metų po ČAE avarijos, pagrindinį indėlį į žmogaus apšvitą sudaro <sup>137</sup>Cs jonizuojančioji spinduliuotė. Istoriškai išskiriami du svarbiausi užtaršos <sup>137</sup>Cs periodai: branduolinio ginklo bandymų metu (1945-1980 m.) ir 1986 m., po ČAE katastrofos. Pastarosios indėlis Lietuvos teritorijoje dirvos viršutiniame sluoksnyje (iki 5 cm) sudarė vidutiniškai ~20% [2]. 1999-2000 m. <sup>137</sup>Cs užterštumo tankio dirvožemyje vertės skirtinguose regionuose kito nuo 710 Bq·m<sup>-2</sup> ( $\sigma$ =110 Bq·m<sup>-2</sup>) iki 2130 Bq·m<sup>-2</sup> ( $\sigma$ =240 Bq·m<sup>-2</sup>), o vertikalusis profilis pasižymėjo dviem maksimumais: 0-4 cm bei 10-14 cm dirvožemio gylyje [3].

<sup>137</sup>Cs migracijos įvertinimui ir rezultatų palyginimui 2012 m. vėl buvo surinkti dirvožemio bandiniai. Bandiniai rinkti naudojant 12,5 cm skersmens, 30 cm ilgio kolonėlę (skerspjūvis ~0,01227 m<sup>2</sup>). Surinktos dirvožemio mėginių kolonėlės buvo suskirstytos 1-cm storio sluoksniais. Nedestrukcinės analizės metodu paruošti bandiniai ir įvertintas <sup>137</sup>Cs savitasis aktyvumas. <sup>137</sup>Cs aktyvumo matavimai atlikti CANBERRA gama spektrometru (modelis GC2520, santykinis efektyvumas 26,2%, <sup>60</sup>Co linijos energija 1332 keV).

<sup>137</sup>Cs migracijos greitis buvo įvertintas naudojant kvazidifuzijos modelį:

$$C(\mathbf{x},t) = C_0 \cdot \left\{ \frac{1}{\sqrt{\pi \cdot \mathbf{D} \cdot t}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{V} \cdot t)^2}{4D \cdot t}\right) - \frac{\mathbf{V} \cdot \mathbf{x}}{2D} \exp\left(-\frac{\mathbf{V} \cdot \mathbf{x}}{\mathbf{D}}\right) \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\mathbf{x} + \mathbf{V} \cdot t}{2\sqrt{\mathbf{D} \cdot t}}\right)\right]\right\}$$

čia C(x,t) – nuklido tūrinis aktyvumas  $[Bq \cdot m^{-3}]$ , x – dirvožemio gylis, [cm], D – dispersijos koeficientas [cm<sup>2</sup>·m.<sup>-1</sup>], t – laikas [m.], V – vertikalios migracijos greitis [cm·m.<sup>-1</sup>], C<sub>0</sub> – pradinis iškritusio nuklido tankis [Bq·m<sup>-2</sup>].

1999-2000 ir 2012 metų rezultatų palyginimas parodė, kad po ~12 metų pirmas aktyvumo pasiskirstymo maksimumas stebimas gilesniame dirvožemio sluoksnyje, 4-8 cm gylyje.

Palyginus minėtų metų <sup>137</sup>Cs pasiskirstymo dirvožemyje parametrus, nustatyta, kad vidutinis migracijos greitis sumažėjo iki ~0,21±0,08 cm·m.<sup>-1</sup>, o vidutinis difuzijos koeficientas tapo 0,25±0,05 cm<sup>2</sup>·m.<sup>-1</sup> (1999-2000 metų vidutinės vertės: 0,23±0,10 cm·m.<sup>-1</sup> ir 0,34±0,12 cm<sup>2</sup>·m.<sup>-1</sup>).

Rezultatų analizė taip pat parodė, kad kai kurie <sup>137</sup>Cs aktyvumo profiliai pasižymi dviem maksimumais (1 pav.), o antro maksimumo atsiradimo priežastis gali būti didelis organinių medžiagų kiekis dirvožemyje, kurių buvimas pagreitina radionuklidų migraciją [4].



1 pav. Eksperimentinis ir sumodeliuotas (kvazidifuzijos modelis)<sup>137</sup>Cs tūrinio aktyvumo pasiskirstymas pagal gylį dirvožemio bandinyje, paimtame netoli Ignalinos AE.

Reikšminiai žodžiai: ČAE avarija, <sup>137</sup>Cs, kvazidifuzinis modelis, vertikalios migracijos greitis, difuzijos koeficientas.

- M. Konstantinova, B.Lukšienė, N.Tarasiuk, E.Maceika, J.Geochem.Explor. 174, 159-163 (2017)
- [2] D. Butkus, M. Lebedyte, G. Lubyte, K. Matusevičius, J. Mažeika, Geochemistry International 39, 7, 719-724 (2001).
- [3] D. Butkus, M. Konstantinova. Environ. Chem. Phys. 25, 2, 75-80 (2003)
- [4] J. Mihalík, J.A. Corisco, M.J. Madruga. Book of abstracts ENVIRA2017 p.115 (2017)

# Biogeninės kilmės antrinio aerozolio susidarymo tyrimas masių ir aerodinaminės spektrometrijos metodais

# Analysis of secondary biogenic aerosol formation using aerosol mass spectrometry and aerodynamic particle size spectrometry methods

Laurynas Krikščikas, Vadimas Dudoitis, Genrik Mordas, Steigvilė Byčenkienė, Vidmantas Ulevičius Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius laurynas.krikscikas@ftmc.lt

Atmosferinio aerozolio dalelės daro įtaką klimato kaitos procesams bei neigiamai veikia žmonių sveikatą [1,2]. Nors didelis dėmesys tyrimuose skiriamas antropogeninės kilmės aerozoliams, žinoma, jog biogeninės kilmės aerozoliai gali sudaryti didelę dalį bendros atmosferinio aerozolio masės [3], todėl aktualūs tyrimai, liečiantys biogeninės atmosferos aerozolio frakcijos susidarymą bei jos evoliuciją veikiant fotocheminiams procesams.

Šio darbo tikslas – nustatyti rytų Lietuvos miško vietovei būdingo antrinio aerozolio formavimosi procesų sąsajas su dalelių dydžių pasiskirstymo bei meteorologiniais parametrais ir nustatyti santykinę biogeninės kilmės aerozolio masės dalį submikroninėje frakcijoje.

Eksperimento matavimai atlikti Rūgšteliškio integruotos stebėsenos stotyje, Rūgšteliškio kaime, Utenos apskrityje (55,46 °N 26,00 °E). Vietovė charakterizuojama kaip kaimo aplinka, apsupta mišrių medžių miško (apie 80% medžių – spygliuočiai). Atstumas iki artimiausių miestų – apie 26 km iki Utenos ir apie 17 km iki Ignalinos. Eksperimentinių matavimų laikas – 2016 m birželio 1 – 22 d.

Garaus atmosferos aerozolio cheminė sudėtis išmatuota aerozolio cheminės sudėties stebėsenos masių spektrometru (angl., Aerosol Chemical Speciation Monitor – ACSM). Aerozolio dalelių aerodinaminio diametro verčių pasiskirstymas išmatuotas aerodinaminiu aerozolio spektrometru APS 3321 (angl., Aerodynamic Particle Sizer – APS, model 3321).

Aerozolio masių spektrometrijos duomenų analizė atlikta naudojant teigiamo matricos faktorizavimo metodą (PMF) (programomis Igor Pro 6.37 ir SoFi 6.0). Šio metodo esmė yra masių spektro laikinės eigos matricos išskaidymas į du komponentus: aerozolio šaltinių cheminės sudėties (spektrų) matricą ir aerozolio koncentracijos laikinės sekos matricą. Šiuo matematiniu metodu įmanoma gauti informaciją (neturint *a priori* žinių) apie realių atmosferos aerozolio šaltinių cheminę sudėtį.

Taikant teigiamo matricos faktorizavimo metodą identifikuoti du aerozolio šaltiniai (1 pav.): pusiau lakaus oksiduoto organinio aerozolio dalelės (SV-OOA) ir mažo lakumo oksiduoto organinio aerozolio dalelės (LV-OOA). Šios dvi antrinio aerozolio frakcijos skiriasi chemine sudėtimi, oksidacijos laipsniu bei elgsena kintant temperatūrai [4]. Šiame darbe tiriamos šių antrinio aerozolio frakcijų koncentracijų ir aerozolio dalelių dydžių pasiskirstymo kaitų sąsajos bei pastarųjų parametrų priklausomybė nuo meteorologinių veiksnių.

Šio tyrimo rezultatai, siejantys aerozolio cheminės sudėties kaitą su dalelių dydžių dinamika, atskleis tyrimo vietovei būdingus biogeninės kilmės aerozolio susidarymo procesų ir aplinkos sąlygų sąryšius bei leis kiekybiškai įvertinti biogeninės kilmės aerozolio dalį sumbikroninėje atmosferos aerozolio frakcijoje.



1 pav. PMF metodu gautų antrinio aerozolio faktorių (šaltinių) masės spektrai. Greta atidėti panašūs, laboratorinėmis sąlygomis gautų, antrinio aerozolio junginių masės spektrai (standartai).

Reikšminiai žodžiai: antrinis aerozolis, antriniai aerozoliai, PMF, masių spektrometrija, biogeninės kilmės, biogeninis, APS, aerodinaminis spektrometras

Vykdomi moksliniai tyrimai finansuojami pagal Lietuvos Respublikos nacionalinės mokslo programos "Agro-, miško ir vandens ekosistemų tvarumas" projekto FOREstRESS "Kompleksiškas klimato ir kitų aplinkos streso veiksnių poveikis miškų gebai adaptuotis ir švelninti globalios kaitos grėsmes" sutartį No. SIT-3/2015.

- [1] J. Guo, Y. Yin, J. Wu, and D. Zhao, *Atmos. Environ.*, vol. 106, pp. 110–119, 2015
- [2] D. K. Singh and T. Gupta, J. Hazard. Mater., vol. 306, pp. 257–268, 2016
- [3] J. G. Slowik et al., Atmos. Chem. Phys., vol. 10, no. 6, pp. 2825– 2845, 2010.
- [4] F. Canonaco, J. G. Slowik, U. Baltensperger, and a. S. H. Prévôt, Atmos. Chem. Phys., vol. 15, no. 12, pp. 6993–7002, 2015.

### **RBMK** reaktoriaus grafito priemaišų nehomogeniškumo tyrimas ICP-MS metodu

# Research of nonhomogeneous distribution of impurity in RBMK reactor graphite by using ICP-MS method

<u>Elena Lagzdina</u>, Danielius Lingis, Andrius Puzas, Rita Plukienė, Rasa Gvozdaitė, Artūras Plukis Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius <u>elena.lagzdina@ftmc.lt</u>

Pagrindinis radioaktyvumo šaltinis branduolinio reaktoriaus konstrukcijose - neutronų aktyvacijos metu susidarantys radionuklidai. Šių radionuklidų kiekis priklauso nuo konstrukcinių medžiagų cheminės sudėties. RBMK tipo reaktoriuje grafitas naudojamas kaip neutronų lėtiklis ir reflektorius. Pagrindiniai grafito konstrukciniai elementai naudojami reaktoriaus aktyviojoje zonoje - kolonos, įvorės ir žiedai. Dėl grafite esančių priemaišų kaip pvz., Fe, Co, Ba, Eu, U, Th ir ilgalaikės eksploatacijos intensyviame neutronų sraute, grafitinėse reaktorius konstrukcijose susidaro įvairūs trumpaamžiai bei ilgaamžiai radionuklidai [1]. Atliekant branduolinės jėgainės išardymo darbus, svarbu klasifikuoti radioaktyvias atliekas. Tam, kad būtu charakterizuotas radioaktyvus inventorus. būtina nustatyti jo radionuklidine sudėti. Ivertinus eksploatuojamų konstrukcinių elementu pirmine cheminę sudėtį, pasitelkus kompiuterinio modeliavimo metodus, galima numatyti aktyvacijos metu susidarančius radionuklidus, jų koncentracijas bei pasiskirstymo homogeniškumą grafito radioaktyviose atliekose [2]. Ankstesnių darbų metu įvairių priemaišinių cheminių elementų koncentracijos buvo išmatuotos grafito žiede [3]. Šio darbo tikslas – įvertinti priemaišų koncentracijas ir jų pasiskirstymą visuose aktyviojoje reaktoriaus zonoje naudojamuose grafito konstrukciniuose elementuose - žieduose, kolonose bei įvorėse.

Aukštos skyros indukcinės plazmos masių spektrometrija (ICP-MS) yra jautrus ir stabilus metodas aptinkant mažas (<10<sup>-9</sup> g/g) cheminių elementų koncentracijas. Dėl to šis metodas patikimai pasitarnauja medžiagų mikropriemaišų sudėties tyrimuose. Šio metodo tikslumui didele itaka daro bandiniu paruošimui ir matavimams naudojamų medžiagų švarumas. Siekiant paruošti grafito bandinį ICP-MS matavimams, atliekama cheminė bandinio destrukcija. Apytiksliai 1 g grafito bandinys pasveriamas ir įdedamas į švarų mėgintuvėlį. H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>:HNO<sub>3</sub>:HClO<sub>4</sub>=15:4:1 rūgščių mišinys naudojamas bandiniui tirpinti. Cheminė bandinio destrukcija vyksta kaitinant mėgintuvėlį, procedūra kartojama tol, kol gaunamas skaidrus tirpalas (maždaug 7 kartus). Gautas tirpalas išgarinamas, gaunamos sausos nuosėdos. Ištirpintos nuosėdos matuojamos ICP-MS spektrometru.

ICP-MS spektrometru išmatuotų ilgalaikį grafito atliekų aktyvumą nulemiančių cheminių elementų koncentracijos (Li, B, Mn, Fe, Co, Ba, Sr, Pb, Th, U) pavaizduotos 1 pav. Šių mikropriemaišų grafite aptikta  $10^{-4} - 100$  ppm. Pastebėta, kad Sr, Co bei Ba įvorėse ir kolonose yra apytiksliai viena eile mažiau nei grafito žiede, tuo tarpu Th – beveik dviem eilėm. Lyginant su ankstesniais matavimais [3], gerokai mažesnės koncentracijos gautos Ge, Ta, didesnės – Li, Mo ir Pb, kitiems elementams gautos panašios eilės priemaišų koncentracijos žieduose. Analizuojant priemaišų koncentracijas skirtingose grafito konstrukcijose – stebimas nehomogeniškas pasiskirstymas U, Th, Eu, Ba, Sr, Ge, Co, Cu, Li priemaišoms – priklausomai nuo bandinio, jų koncentracijos skiriasi per vieną ar kelias eiles.



1 pav. Įvairių elementų koncentracijos grafito konstrukcijose – įvorėje, kolonoje bei žiede.

Reikšminiai žodžiai: RBMK reaktoriaus grafitas, ICP-MS, priemaišos.

- W. Müller, International Workshop on "Determination and declaration of Nuclide Specific Activity Inventories in Radioactive Wastes", Cologne, Germany (2001).
- [2] R. Plukiene, A. Plukis, A. Puzas, V. Remeikis, G. Duškesas, D. Germanas, Progr. Nucl. Sc. Techn. 2, 421 (2011).
- [3] A. Puzas, V. Remeikis, Ž. Ežerinskis, P. Serapinas, A. Plukis and G. Duškesas, Lithuanian Journal of Physics, 50, 445 (2010).

# Lietuvos astronomijos olimpiada – talentų beieškant

## Lithuanian Astronomy Olympiad – Identifying Talents

Romualda Lazauskaitė<sup>1</sup>, Audrius Bridžius<sup>2,3</sup>, Jokūbas Sūdžius<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Lietuvos edukologijos universitetas, Gamtos, matematikos ir technologijų fakultetas, Studentų g. 39, LT-08106 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Astronomijos observatorija, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>3</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fundamentinių tyrimų skyrius, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

romualda.lazauskaite@leu.lt

Astronomijos olimpiados yra viena iš potencialių galimybių skatinti mokinių domėjimąsi fiziniais mokslais, ugdyti jų mokslinį ir kritinį mąstymą bei papildyti formalaus mokymosi programų turinį žiniomis apie visatos objektus, jų sandarą ir evoliuciją. Šiame pranešime bus apžvelgiama Lietuvos mokinių astronomijos olimpiadų 15 metų patirtis ir problemos tarptautinių ir kitų šalių astronomijos ir astrofizikos olimpiadų kontekste.

Siekiant sudominti astronomija kuo jaunesnio amžiaus mokinius olimpiada, skirtingo lygio užduotys rengiamos trims amžiaus grupėms: 5-8 klasių, 9-10 klasių ir 11-12 klasių mokiniams. Pirmojo arba atrankinio etapo uždaviniai skelbiami internete Lietuvos mokinių neformaliojo švietimo centro (LMNŠC) svetainėje [1]. Pasiryžęs dalyvauti olimpiadoje mokinys savarankiškai turi spręsti savo amžiaus grupės pasirinktus uždavinius ir rezultatus atsiųsti į LMNŠC. Pagal praėjusių olimpiadų duomenis pirmojo etapo dalyvių skaičius svyruoja nuo 50 iki 70. Joje dalyvauja tiek didžiųjų Lietuvos miestų, tiek mažų miestelių mokyklų mokiniai [2].

Olimpiados užduočių vertinimo komisija, patikrinusi iš mokinių gautus darbus, kiekvienoje amžiaus grupėje atrenka geriausiai užduotis atlikusius mokinius ir juos kviečia į antrąjį olimpiados etapą, kuris paprastai rengiamas Vilniuje ir Molėtų observatorijoje. Vertinimo komisijai patikrinus visus antrojo etapo mokinių darbus išrenkami olimpiados nugalėtojai ir prizininkai, kurie tampa ir kandidatais dalyvauti tarptautinėse astronomijos ir astrofizikos olimpiadose.

Atsižvelgiant į nusistovėjusią praktiką tarptautinėse astronomijos ir astrofizikos olimpiadose šio etapo užduotys sudaromos iš keturių dalių: teorinių uždavinių, astronominių stebėjimų duomenų analizės užduočių, auditorinių užduočių su žvaigždėlapiais ir realių astronominių stebėjimų su teleskopais arba plika akimi esant giedram dangui. Sudarant užduotis vyriausiųjų mokinių grupei siekiama, kad užduočių tematika ir lygis maždaug atitiktų tarptautinės astronomijos ir astrofizikos olimpiados programą [3]. Jaunesniųjų mokinių grupėms parengiamos paprastesnės užduotys atsižvelgiant į jų žemesnį fizikos ir matematikos žinių lygį. Pažymėtina, kad ir jauniausiųjų mokinių grupei pavyksta sukurti pakankamai įdomių uždavinių, kuriuos jie pajėgūs išspręsti.

Spręsdami teorinės dalies uždavinius mokiniai turi atskleisti savo gebėjimus pritaikyti matematikos ir fizikos žinias astronominių objektų fizinių charakteristikų įvertinimui.

Lyginant su kitomis tiksliųjų mokslų olimpiadomis unikali yra astronominių stebėjimų duomenų analizės dalis, kurios užduotys parengiamos panaudojant realiai atliktų stebėjimų duomenis. Atliekant šią užduotį reikalingi stebėjimo duomenų statistinės analizės pagrindų ir duomenų grafinio atvaizdavimo bei analizės įgūdžiai.

Vien tik astronomams būdingos užduotys su žvaigždėlapių analize ir realūs astronominių objektų stebėjimai, kurių metu mokiniai turi parodyti savo gebėjimus orientuotis žvaigždėtame danguje ir mokėti savarankiškai vykdyti astronominius stebėjimus.

Nuo 2003 m. Lietuvos mokiniai dalyvauja Tarptautinėje astronomijos olimpiadoje, o nuo 2007 m. – Tarptautinėje astronomijos ir astrofizikos olimpiadoje. Šiose olimpiadose mokiniai yra laimėję 3 aukso, 6 sidabro ir 11 bronzos medalių. 2012 m. vykusioje Tarptautinėje astronomijos ir astrofizikos olimpiadoje Vilniaus licėjaus mokinys Motiejus Valiūnas tapo absoliučiu olimpiados nugalėtoju.

Šie laimėjimai liudija, kad mūsų mokiniai pirmiausia savarankišku darbu yra pasiekę pakankamai aukštą astronomijos, fizikos ir matematikos žinių lygį, kad galėtų varžytis su bendraamžiais tarptautinėse olimpiadose.

Reikšminiai žodžiai: astronomija, edukologija.

- Lietuvos mokinių astronomijos olimpiada [žiūrėta 2017 m. liepos 5 d.]. Prieiga per internetą: <u>http://www.lmnsc.lt/lt/astronomijos</u>
- [2] Lietuvos mokinių astronomijos olimpiados dalyvių pasiskirstymo žemėlapis [žiūrėta 2017 m. liepos 5 d.]. Prieiga per internetą: http://arcg.is/2gz22VP
- [3] A. Sule (Ed.), A Problem Book in Astronomy and Astrophysics (Suceava (Romania): Cygnus Publ. House, 2014)

# Plutonio-berilio neutronų šaltinio apšvitos parametrų vertinimas neutronų aktyvacinės analizės ir skaitinio modeliavimo MCNP kodu metodais

# Evaluation of plutonium-berilium neutron source parameters by using neutron activation analysis and MCNP modeling methods

Danielius Lingis, Elena Lagzdina, Mindaugas Gaspariūnas, Rita Plukienė, Tomas Mirinavičius, Artūras Plukis Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius danielius.lingis@ftmc.lt

Branduoliniai reaktoriai, neutronų generatoriai, spontaninio dalijimosi šaltiniai ir kiti neutronų šaltiniai taikomi moksliniams tyrimams daugelyje mokslo sričių. FTMC esantis Pu-Be izotopinis neutronų šaltinis naudojamas biologinių objektų apšvitai, detektorių testavimo ir medžiagotyros eksperimentuose. Šaltini sudaro 4 atskiri neutronų šaltiniai: du <sup>238</sup>Pu-Be (2,1·10<sup>7</sup> ir  $1,9 \cdot 10^7$  n/s intesyvumo) ir du <sup>239</sup>Pu-Be ( $1,7 \cdot 10^7$  ir  $1,0 \cdot 10^5$ n/s) šaltiniai. Bendras neutronų srautas siekia  $4,5 \cdot 10^7$  n/s. Neutronų šaltiniai patalpinti konteineryje centrinio eksperimentinio kanalo apačioje, o du šoniniai eksperimentiniai kanalai yra 12 cm ir 16 cm atstumu nuo šaltinio – eksperimentų metu gaunami skirtingu charakteristiku neutronu srautai. Virš neutronu saugyklos sumontuotas stumdomas švino dangtis - tai papildoma apsauga nuo jonizuojančiosios spinduliuotės ir papildoma fizinė apsauga. Šaltinių saugojimo įrenginys yra užpildytas parafino lėtikliu, kurio tankis 0,8 g/cm<sup>3</sup>, parafino lėtiklis taip pat naudojamas centriniame kanale virš šaltinių.

Tiriant neutronų srauto parametrus eksperimentiniais ir modeliniais metodais pastebėti neatitikimai neutronų apšvitos kanaluose. PIXE (angl. particle-induced X-ray emission) ir RBS (angl. Rutherford backscattering spectrometry) metodais ištyrus centrinio eksperimentinio kanalo medžiagos cheminę sudėtį aptikta chloro priemaišų, kurios nulemia neutronų srauto mažėjima bei gali sąlygoti radioaktyvių atliekų susidarymą dėl  $\overline{}^{35}$ Cl(n, $\gamma$ ) $^{36}$ Cl aktyvacijos. Atliktas saugyklos optimizavimas: centrinio eksperimentinio kanalo vamzdis pakeistas bepriemaišiniu polietileno vamzdžiu pakeistas neutronu šaltinių bei konteineris. Suprojektuotas naujas organinio stiklo konteineris leidžia reguliuoti neutronų srautą keičiant neutronų šaltinių skaičių ir atstumą tarp bandinio ir šaltinių: trys didžiausio intensyvumo šaltiniai fiksuojami apatinėje pozicijoje, o mažesnio intensyvumo neutronų šaltinis gali būti lengvai išimamas ir naudojamas kaip mobilus neutronų šaltinis.

Siekiant įvertinti, kaip pakito neutronų srautas, atliktas teorinis vertinimas MCNP6 Monte Karlo dalelių pernašos kodu bei neutronų aktyvacinės analizės (angl. neutron activation analysis. NAA) eksperimentai. neutronu Modeliuojant vertintas energinis pasiskirstymas, lygiavertės dozės galia bei tam tikrų reakcijų spartos. Neutronų srautu paveiktų bandinių aktyvumas įvertinamas pagal skylančių branduolių išspinduliuotų gama kvantų kiekį juos detektuojant Canberra GC2520 gama spektrometru su ypač švaraus germanio jutikliu. Atsižvelgus į bandinių aktyvumą bei apšvitos parametrus, apskaičiuojamos reakcijų spartos [1]:

$$R = \frac{A_t}{\Phi \cdot \sigma \cdot (1 - e^{\lambda \cdot t}a)},\tag{1}$$

čia A<sub>t</sub>- bandinio aktyvumas aktyvacijos pabaigoje, Bq,  $\Phi$  – neutronų srautas, n/cm<sup>2</sup>s,  $\sigma$  – mikroskopinis reakcijos skerspjūvis, barnai, t<sub>a</sub> - aktyvacijos trukmė, s,  $\lambda$  – skilimo konstanta, s<sup>-1</sup>. Pagal reakcijų spartų santykius vertinamas teorinio modelio ir eksperimentu rezultatų atitikimas.

MCNP įvertintas kodu neutronu energinis pasiskirstymas virš neutronų šaltinio 2 atvejais (žr. 1 pav.): 1) pirminė konfigūracija su nepakeistais vamzdžiu ir saugykla; 2) naujoji konfigūracija su PE vamzdžiu ir organinio stiklo konteineriu. Optimizavus neutronų šaltinio aplinką gauta, kad neutronų energiniame pasiskirstyme dominuoja mažos energijos (<1 eV) neutronai. Terminiai neutronai dėl didesnių sąveikos skerspjūvių naudingesni atliekant apšvitos eksperimentus. Didžiausias gaunamas neutronų srautas su 4 uždarais šaltiniais pagal modeliavimo rezultatus siekia  $1,0 \times 10^5$  n/cm<sup>2</sup>s.



1 pav. Neutronų srauto energinis pasiskirstymas virš neutronu šaltininių esant skirtingoms šaltinio konfigūracijoms

Reikšminiai žodžiai: neutronų šaltinis, MCNP modeliavimas, neutronų aktyvacinė analizė

#### Literatūra

[1] L. Hamidatou, H. Slamene, T.Akhal, B. Zouranen, Concepts, Instrumentation and Techniques of Neutron Activation Analysis, Faycal Kharfi, ISBN 978-953-51-1033-0, (2013).

# Pusiaupolinio (10-13) GaN užauginto on Si padėklų su Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub> tarpsluoksniu azimutinės orientacijos tyrimas

## In-plane orientation of semipolar (10-13) GaN grown on Si substrate with Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub> interlayer

<u>Tadas Malinauskas</u><sup>1</sup>, Tomas Grinys<sup>1</sup>, Kazimieras Badokas<sup>1</sup>, Rytis Dargis<sup>2</sup>, Andrew Clark<sup>2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva <sup>2</sup>QE Inc., 494 Gallimore Dairy Rd, Greensboro, NC 27409, USA tadas.malinauskas@ff.vu.lt

Stiprūs poliarizaciniai laukai atsirandantys auginant c kryptimi mažina III-grupės nitridinių šviestukų efektyvumą. Šių laukų galima išvengti auginant nitridus nepolinėmis ar pusiau polinėmis kryptimis. Tokios krypties GaN galima auginti ant tūrinių GaN padėklų, bet jie iki šiol yra labai brangūs, todėl ieškoma kitų galimų padėklų. Mes tyrėme galimybę auginti nepolinį ir pusiau polinį GaN ant Si(110) padėklų naudojant Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub> tarpsluoksnius. Šie tarpsluoksniai padeda išspręsti problemas atsirandančias dėl Si ir GaN gardelių konstantų ir temperatūrinio plėtimosi koeficiento skirtumų. Taip pat stabdo nepageidaujamas chemines reakcijas tarp Si ir GaN.

Šiame tyrime metalo-organinio cheminio garų nusodinimo metodu (MOCVD) auginome GaN ant Si(110) padėklų naudojant  $Er_2O_3$  tarpsluoksnius. Padėklus ir užaugintus sluoksnius tyrėme skenuojančiu elektronų mikroskopu ir Rentgeno difrakcijos metodais (XRD).

Išmatavus  $Er_2O_3$  XRD polines figūras nustatyta, kad (110)  $Er_2O_3$  gali augti ant (100) Si dvejomis azimutinėmis orientacijomis: A ir B (1 pav). Vienos orientacijos  $Er_2O_3$  auga pailgų domenų struktūros (2 pav). Esant kitai orientacijai atsiranda statmenos krypties domenų.

Ant Si padėklų Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub> tarpsluoksniu MOCVD metodu buvo užauginti GaN sluoksniai. Nustatyta, kad auga polikristalinio tipo dangos pasižyminčios įvairia orientacija, nes stebima Rentgeno difrakcija nuo įvairios orientacijos kristalitų. Rastos sąlygos kai MOCVD būdu auga dominuojanti pusiau polinė (10-13) GaN orientacija (padėklo nitridizaciją ir mažas V/III dujų santykis). Atlikus išsamius XRD polinių figūrų matavimus nustatyta, kad GaN linkes augti taip kad GaN [0001] kryptis yra lygiagreti Er2O3 [111] krypčiai. Todėl galimos dvi (10-13)GaN augimo azimutinės orientacijos, kurios ir stebimos XRD polinių figūrų matavimuose (3 pav.). Taip pat toks GaN augimas ant Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub> lemia, kad galimos keturios nepolinio GaN orientacijos, kurios stebimos bandiniuose su nepolinės orientacijos GaN. Toks kristalinių dvynių formavimasis lemia didelį užaugintų sluoksnių paviršiaus šiurkštumą.

Išmatavus polines figūras pusiau polinio GaN užauginto  $Er_2O_3$  su skirtingomis dominuojančiomis azimutinėmis orientacijos nustatyta, kad (10-13) GaN auga tik ant A orientacijos  $Er_2O_3$ . Jeigu auginama ant  $Er_2O_3$  sluoksnio su A ir B orientacija, pusiau polinis GaN auga tik ant A orientacijos. Naudojant B orientacijos  $Er_2O_3$  padėklus galima užauginti GaN su dominuojančia nepoline (11-20) orientacija, nes pusiau polinė orientacija tokiu atveju neauga.



1 pav. A ir B azimutinės orientacijos (110) Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub> užauginto (100) Si padėklo su nuopjova schematinė iliustracija.



2 pav. A ir B azimutinės orientacijos (110) Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub> užauginto (100) Si padėklo su nuopjova schematinė iliustracija.





Reikšminiai žodžiai: GaN, MOCVD, Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, XRD,

## Mielių pulcherimino Mesbauerio tyrimai

## Yeast pulcherrimin Mössbauer study

<u>Kęstutis Mažeika</u><sup>1</sup>, Vytautas Melvydas<sup>2</sup>, R. Garjonytė<sup>1</sup> <sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius <sup>2</sup>Gamtos tyrimų centras, Botanikos Institutas, Akademijos 2, LT-08412 Vilnius <u>kestutis.mazeika@ftmc.lt</u>

Šiuo metu plačiai tiriamos įvairių bakterijų ir mielių kamienų biocidinės savybės. Geležis, kurios biologinis svarbus kvėpavimo prieinamumas ir kitiems gyvybiniams procesams, dažniausiai natūraliai gamtoje netirpioje egzistuoja oksidu/hidroksidu formoje. mikroorganizmai Geležies įsisavinimui išskiria specialias medžiagas (siderophores) formuojančius trivalentės geležies chelatus. Bakterijos ir mielės tokios, kaip Metschnikowia pulcherrima sintetina pulcherimino rūgšti (pulcherriminic acid), kuri su laisva geležimi sudaro netirpų raudoną pigmentą pulcheriminą (pulcherrimin) [1]. Esant didesniam geležies kiekiui pulcherimino rūgštį sintetinančios mielės formuoja ivairaus atspalvio rudas dangas. Tam tikromis salygomis aplink jas galima stebėti savaime susidarančius žiedus [2]. Stebima, kad įvairių mielių kamienų pigmentinės dangos skiriasi atspalviu, blizgesiu, morfologija, tad dangų susidarymo keliai gali skirtis. Mesbauerio spektroskopijos pagalba buvo siekiama nustatyti pulcherimino - pigmento, kurio cheminė formulė  $C_{12}H_{20}N_2O_4Fe_{2/3}$ , savybes ir jas palyginti skirtingų mielių kamienų (Metschnikowia pulcherrima ir pasirinkto vietinių laukinių mielių kamieno) atveju.

Mielės augintos esant 50-150 mg/L geležies kietoje agarizuotoje terpėje skirtingoje temperatūroje iki pilno maistinių medžiagų įsisavinimo. Mesbauerio spektroskopijos metodu matuotos džiovintos atskirtos nuo substrato mielės arba cheminiu būdu išskirtas pulcherimino pigmentas. Pulcherimino Mesbauerio spektrai (1 pav.) pasižymi  $Fe^{3+}$  gana dideliu kvadrupoliniu suskilimu  $\Delta$  (1 lentelė) bei stipria ploto priklausomybe nuo temperatūros.

1 lentelė. Debajaus temperatūra  $\Theta$  ir kvadrupolinis suskilimas  $\Delta$  pulcherimino ir mieliu pavyzdžiams.

1		<u> </u>	
Pavyzdys,	$\Theta_{\langle u^2 \rangle}$	$\Delta$ , mm/s	$\Delta$ , mm/s
auginnito temp.		(≈12K)	(296K)
Pulcheriminas	144+2	$0,89{\pm}0.02$	$0,85\pm0.04$
agare	17742		
M. pulcher. 6°C	158±3	$0,84{\pm}0.01$	$0,84{\pm}0.01$
M. pulcher. 25°C	159±5	$0,83\pm0.01$	$0,79{\pm}0.01$
Lauk. mielės 6°C	157±3	$0,84{\pm}0.01$	$0,80{\pm}0.01$
Lauk. mielės 25°C	163±6	0,83±0.01	$0,78{\pm}0.01$

Dauguma skirtingų mielių pavyzdžių Mesbauerio spektrų parametrų, tiek auginant žemoje 6°C, tiek aukštesnėje 25°C temperatūrose (1 lentelė), yra identiški ir atitinka gautus pulcheriminui. Galima įžvelgti skirtumus tik kvadrupolinio suskilimo priklausomybėje nuo matavimo temperatūros. Kvadrupolinis suskilimas Fe<sup>3+</sup> atveju priklauso nuo junginio simetrijos. Kvadrupolinis suskilimas bus įtakojamas, jei dalis pulcherimino anijonų bus pakeisti kitais esančiais terpėje. Stebimus skirtumus taip pat gali paaiškinti nedidelė, iki 5 proc. priemaiša kitų geležies turinčių junginių, susidarančių agarizuotoje ar skystoje maitinamojoje terpėje. Galima teigti, kad visais atvejais pagrindinis susidarantis junginys yra pulcheriminas.



1 pav. Pucherimino Mesbauerio spektrai a) kambario, b) 12 K temperatūroje

Reikšminiai žodžiai: mielės, Mesbauerio spektroskopija, kvadrupolinis suskilimas.

- [1] A. J. Kluyver, J.P. Van der Walt, and A.J. Van Trietv, Botany 39 583 (1953).
- [2] V. Melvydas, R. Staneviciene, A. Balynaite, J. Vaiciuniene, R. Garjonyte, Microbiological Research 193 87 (2016)..

## pH daroma įtaka gliukozės oksidazės spektroskopinėms savybėms

# pH influence on spectroscopic properties of glucose oxidase

Raminta Mazėtytė<sup>1,2</sup>, Urtė Bubnienė<sup>3</sup>, Arūnas Ramanavičius<sup>2,3</sup>, Renata Karpič<sup>2</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius <sup>3</sup> Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius <u>raminta.mazetyte@gmail.com</u>

Biologinių jutiklių naudojimas leidžia greitai ir tiksliai nustatyti įvairių biologiškai aktyvių medžiagų koncentracijas [1]. Šiomis dienomis žinomiausi ir dažniausiai naudojami amperometriniai gliukozės biologiniai jutikliai, kurie skirti laisvos gliukozės kiekiui kraujyje nustatyti [2]. Veiklioji biojutiklio dalis yra elektrodo paviršiuje imobilizuotas gliukozės oksidazės (GOx) fermentas. Siekiant kurti biojutiklį iš pradžių reikia atlikti įvairius fermento savybių tyrimus. Nepaisant didėjančio GOx tyrimų skaičiaus, yra pakankamai mažai informacijos apie šio fermento kitimus skirtingo rūgštingumo terpėse (pH) [3].

Šio darbo metu buvo tiriami GOx ir flavinadenindinukleotido (FAD) spektroskopinių savybių kitimai skirtingo rūgštingumo terpėse 22-ų dienu laikotarpyje. Tyrimo metu sugerties ir fluorescencijos spektrų registravimas bei relaksacijos trukmių matavimai buvo atliekami naudojant acetatinius-fosfatinius buferinius tirpalus, kurių pH vertės kito nuo 2 iki 9.

Darbo metu nustatėme, kad 1 - 4 dienų laikotarpyje rūgštiniuose (pH 2 - 3) FAD tirpaluose pradeda formuotis katijoninė FAD struktūra. Jos susidarymas lemia sugerties bei fluorescencijos spektrų kitimus: antrosios sugerties juostos ties 450 nm intensyvumas sumažėja, o pirmosios juostos maksimumo padėtis pasislenka į ilgesnių bangų pusę. Stebint fluorescencijos spektrus, matomas juostos ties 530 nm intensyvumo mažėjimas tolimesnių matavimų metu, kuris taip pat siejamas su katijonine FAD struktūra.

Esant pH 2 – 3 tirpalo rūgštingumui stebima intensyviausia FAD ir GOx fluorescencija. Lyginant integralinius fluorescencijos intensyvumo kitimus 1–ąją matavimo dieną, nustatėme, kad pH 2 tirpaluose FAD bei GOx integraliniai fluorescencijos intensyvumai beveik sutampa. Tai leidžia patvirtinti prielaidą, kad esant šiam rūgštingumui FAD disocijuoja iš GOx fermento.

Esant optimaliam pH 6 rūgštingumui, GOx fluorescencijos intensyvumas ties 530 nm yra pats mažiausias. Tai siejama su didžiausiu fermento aktyvumu bei FAD kvantinio našumo savybėmis.

Nuo 8–osios matavimo dienos FAD ir GOx fluorescencijos spektruose atsiranda fluorescencijos juosta ties 450 nm, kuri siejama su redukuotos FADH<sub>2</sub> struktūros susiformavimu. Šios struktūros atsiradimą patvirtina ir pakitę sugerties spektrai. Laikui bėgant, stebimas fluorescencijos juostos ties 450 nm intensyvumo didėjimas bei juostos tie 530 nm intensyvumo slopimas.



2 pav. FAD sugerties ir fluorescencijos spektrai užregistruoti 1 ir 22 dienomis.

Reikšminiai žodžiai: gliukozės oksidazė, flavinadedindinukleotidas, pH.

- [1] Eun-Hyung Yoo et al, Glucose Biosensors: An Overview of Use in Clinical Practice, Sensors (2010), 10, 4558-4576.
- [2] S. Ferri et al., Review of Glucose Oxidases and Glucose Dehydrogenases: A Bird's Eye View of Glucose Sensing Enzymes, Journal of Diabetes Science and Technology Volume 5, Issue 5, September (2011).
- [3] L. Dumitrascu et al, pH and heat-dependent behaviour of glucose oxidase down to singlemolecule level by combined fluorescence spectroscopy and molecular modelling, J Sci Food Agric 2016; 96: 1906–1914.

## Radiacinių defektų įtakos GaN spinduliuočių jutiklių charakteristikų kaitai tyrimai

# Research of impact of radiation defects on changes of GaN radiation sensor characteristics

Dovilė Meškauskaitė, Eugenijus Gaubas, Tomas Čeponis, Jevgenij Pavlov, Vytautas Rumbauskas Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius dovile.meskauskaite@tmi.vu.lt

Galio nitridas (GaN) pasižymi didele pramušimo itampa, didele veikimo sparta, todėl yra vis plačiau naudojamas didelės galios ir/arba aukštadažnių prietaisų gamybai. Lyginant su puslaidininkinių dalelių detektorių pramonėje plačiai naudojamu siliciu arba galio arsenidu, GaN pasižymi didesniu atsparumu radiacijai ir yra viena perspektyviausių medžiagų radiacijai atspariems detektoriams, aukštųjų energijų spinduliuočių dozimetrams [1] bei įvairaus tipo jutikliams [2] formuoti. Tačiau GaN tyrimai, skirti charakteristikų kaitai po apšvitos dideliais įtėkiais, yra fragmentiniai. Todėl, siekiant įvertinti GaN perspektyvumą taikymams naujos kartos didelio skaisčio didžiojo hadronų priešpriešinių srautų greitintuvo (High luminosity-large hadron collider - HL-LHC) ir kitų greitintuvų aplinkose, yra aktualūs parametrų evoliucijos tyrimai apšvitinant medžiagą dideliais įvairių tipų dalelių įtėkiais.

Šiame darbe buvo tiriami 1 µm storio metalas-InGaN/GaN heterosandūra-metalas detektoriai. pagaminti konvertuojant komercinius šviestukus į spinduliuočių jutiklius. GaN heterosandūra 0.25 µm storio ir 10<sup>-2</sup> cm<sup>2</sup> ploto, kurioje suformuotas InGaN/GaN kvantinių duobių aktyvios spindulinės rekombinacijos sluoksnis, buvo užauginta MOCVD (Metalorganic vapour phase epitaxy) metodu. Protonais indukuotos liuminescencijos spektroskopijos (PLS), barjerinės talpos kinetikų veikiant tiesiškai kintančios įtampos impulsams (BELIV - Barrier evaluation by linearily increasing voltage) bei trumpojo jungimo srovių nesąlytiniai ir kontaktiniai metodai buvo pasitelkti vykdant in situ elektrinių ir optinių charakteristikų evoliucijos tyrimus. Šie dariniai buvo apšvitinami 1.6 MeV energijos protonų pluošteliu, suformuotu Tandetron 4110A daleliu greitintuve, galiausiai pasiekiant  $\Phi=6\times10^{15} \text{ p/cm}^2$  įtėkius. Protonų pluošteliu sužadintos liuminescencijos spinduliuotė buvo surenkama daugiaskaiduliniu šviesolaidžiu, o signalas buvo analizuojamas spektrofotometru Avantes AvaSpec-2048TEC. Tuo pačiu metu buvo registruojamos BELIV kinetikos. Prieš atliekant apšvita, Monte Carlo metodu naudojant TRIM programinę platformą buvo įvertinta, kad 1.6 MeV stabdymo efektyvusis ilgis GaN medžiagoje yra gerokai didesnis už bandinio storį [3]. Todėl 1.6 MeV energijos protonai yra skvarbūs 1 µm storio sluoksniams, ir apšvita kuriami defektai yra homogeniškai pasiskirstę bandinio tūryje. Apšvitos poveikis detektorių funkciniams parametrams buvo įvertintas ir kontaktiniais metodais, atlikus voltamperinių (I-V) ir voltfaradinių (C-V) charakteristikų matavimus nešvitintuose bandiniuose ir bandiniuose apšvitintuose didžiausių itėkių ( $\Phi$ =6×10<sup>15</sup> p/cm<sup>2</sup>). Radiaciniai defektai

bandiniuose apšvitintuose didžiausiu įtėkiu buvo identifikuoti talpinės giliųjų lygmenų spektroskopijos (Capacitance-deep level transient spectroscopy – C-DLTS) metodu, pasitelkiant HERA-DLTS System 1030 spektrometrą. C-DLTS metodas pasižymi dideliu jautriu įvertinant defektų koncentracijas, jų terminės aktyvacijos energijas ir kitas giliųjų lygmenų charakteristikas [4].

Protonų pluošteliu sužadintos liuminescencijos spektro struktūra ir įvairių liuminescencijos juostų intensyvumas kito apšvitos metu dėl radiacinių ir technologinių defektų sąveikų. Šiuo spektroskopijos būdu buvo identifikuoti vyraujantys spindulinės rekombinacijos centrai ir įvertinta jų kūrimosi sparta apšvitinant 1.6 MeV energijos protonų pluošteliu. Nespindulinės krūvininkų rekombinacijos centru pasireiškimas apšvitos metu buvo įvertintas iš BELIV kinetikų kaitos. BELIV kinetikų analizė taip pat leido įvertinti barjerinės talpos kitimus ir terminės krūvininkų generacijos srovių sandus [5]. Barjerinės talpos ir generacinės srovės kitimai, ivertinti in situ eksperimentuose, gerai dera su C-V ir I-V parametru matavimo rezultatais. C-DLTS metodu identifikuoti vyraujantys defektai, jų koncentracijos ir pasiskirstymo homogeniškumas detektoriaus bazės plotyje.

Liuminescencijos spektrų ir BELIV kinetikų evoliucija, įvertinta apšvitos 1.6 MeV energijos protonais metu, atskliedė, kad GaN detektoriai yra tinkamai sinchroniškai registruoti optinius ir elektrinius signalus plačiame įtėkių diapazone. Todėl GaN yra perspektyvi medžiaga dalelių detektorių ir dozimetrų gamybai bei taikymams greitintuvų aplinkoje.

Reikšminiai žodžiai: GaN, apšvita protonais, dalelių detektoriai, radiaciniai defektai, liuminescencija, BELIV, DLTS.

- P.J. Sellin and J. Vaitkus, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. A-Accel. Spectrom. Dect. Assoc. Equip. 557 (2), 479 (2006).
- [2] S. J. Pearton et al., J. Phys. Condens. Matter 16 (29), R961 (2004).
- [3] J. F. Ziegler, M. D. Ziegler, and J. P. Biersack, Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms 268 (11–12), 1818 (2010).
- [4] D. V. Lang, J. Appl. Phys. 45 (7), 3023 (1974).
- [5] E. Gaubas, T. Ceponis, and J. V. Vaitkus, *Pulsed capacitance technique for evaluation of barrier structures*. (Saarbrucken-Berlin: LAMBERT Academic Publishing, 2013.)

# Impulsiniu MOCVD būdu užaugintų InGaN darinių tyrimas laikinės spektroskopijos metodais

## Time-resolved spectroscopy of InGaN structures grown by pulsed MOCVD

<u>Kazimieras Nomeika</u><sup>1</sup>, Milda Budreckaitė<sup>2</sup>, Saulius Nargelas<sup>1</sup>, Arūnas Kadys<sup>1</sup>, Ramūnas Aleksiejūnas<sup>1</sup>
<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius, Lietuva
<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius, Lietuva
kazimieras.nomeika@tmi.vu.lt

Impulsinis metaloorganinio cheminio nusodinimo iš garų fazės (angl. *pulsed MOCVD*) metodas yra vienas iš efektyvių būdų kvantinio našumo padidinimui InGaN šviestukų (angl. *LED*) dariniuose [1]. Metaloorganinių prekursorių (TMIn ir TMGa) tiekimo į auginimo kamerą pertrūkiai leidžia nusodintiems atomams migruoti bandinio paviršiumi ir įsitvirtinti į energiškai patogesnes vietas, dėl ko pagerėja jų pasiskirstymas ir sumažinama struktūrinių defektų formavimosi tikimybė.

Šiame darbe mes tiriame, kaip pertrūkio tarp metaloorganikos tiekimo trukmė keičia LED darinių, užaugintų VU Taikomųjų mokslų instituto MOCVD reaktoriuje, optines savybes. Tam mes panaudojome fotoliuminescencijos (FL) ir skirtuminio pralaidumo (SP) spektroskopijos metodikas. Žadinimui panaudoti 250 fs trukmės lazerio impulsai, kurių bangos ilgis - 392 nm – parinktas taip, kad rezonansiškai būtų žadinamos tik InGaN kvantinės duobės. Pastarosios augintos naudojant 4 ciklus, sudarytus iš 20 s metaloorganikos tiekimo, bei nuo 0 s iki 15 s pertrūkio trukmių. Dariniai užauginti ant *c* plokštumos safyro.



l pav. Nepusiausvirųjų krūvininkų gyvavimo trukmės ir darinių maksimalaus kvantinio našumo priklausomybės nuo metaloorganikos tiekimo į reaktorių pertrūkio trukmės.

Tyrimų rezultatai rodo ilgiausias nepusiausvirųjų krūvininkų gyvavimo trukmes bandiniuose, kuriuose pertrūkiai tarp metaloorganinių prekursorių tiekimo buvo didžiausi. Šiuose bandiniuose taip pat stebimi ir didžiausi maksimalūs šviestukų aktyviosios srities kvantiniai našumai (1 pav.). Tai aiškinama homogeniškesniu indžio atomų pasiskirstymu auginimo plokštumoje, dėl ko

gaunamos geresnės kokybės, turinčios mažiau defektų kvantinės duobės. Kita vertus, ilgėjant metaloorganikos pertrūkio trukmėms, FL spektrų smailės slenkasi į trumpesnių bangų pusę, greičiausiai dėl dalinio indžio atomų nugaravimo ir dėl to mažesnės In koncentracijos liekančiame junginyje (2 pav.). Nemonotoniškos gyvavimo trukmės ir kvantinio našumo priklausomybės nuo pertrūkio trukmės greičiausiai yra sąlygotos vienu laiku vykstančių ir konkuruojančių paviršinių atomų migracijos ir jų nugaravimo procesų.



2 pav. FL spektrų smailių padėčių priklausomybės nuo pertrūkio trukmės, esant dviems skirtingiems sužadinimo energijos tankiams.

Reikšminiai žodžiai: InGaN, kvantinės duobės, LED, impulsinis auginimas.

#### Literatūra

 K. Nomeika, M. Dmukauskas, R. Aleksiejūnas, P. Ščajev, S. Miasojedovas, A. Kadys, S. Nargelas, and K. Jarašiūnas, Lith. J. Phys. 55, 255 (2015).

## Radioanglies sklaidos biosferoje tyrimas branduolinės elektrinės aplinkoje

# The variation of the concentration of radiocarbon in the biosphere of the nuclear power plant surroundings

Algirdas Pabedinskas, Žilvinas Ežerinskis, Justina Šapolaitė, Laurynas Butkus, Vida Juzikienė, Rūta Druteikienė,

Vidmantas Remeikis

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

algirdas.pabedinskas@ftmc.lt

Radioanglis yra ilgaamžis radionuklidas (pusėjimo trukmė 5730  $\pm$  30 metų), kurio daugiausia susidaro dėl kosminių spindulių Žemės atmosferoje. Susidariusi radioanglis yra oksiduojama į <sup>14</sup>CO<sub>2</sub> ir būdama dujinės formos dalyvauja sudėtingame globaliame anglies cikle [1]. Yra žinoma, kad radioanglies yra visur: vandenyje, augaluose, gyvūnuose, taip pat ir žmonių organizmuose. Platus anglies pasklidimas aplinkoje ir jos apykaita gyvuosiuose organizmuose sukūrė palankias sąlygas šiam anglies izotopui tapti itin svarbiam ir vertingam.

Radioanglis atmosferoje susidaro ne tik natūraliai dėl kosminės spinduliuotės, bet ir dėl įvairios antropogeninės žmoniu veiklos. Pagrindiniai antropogeninės radioanglies šaltiniai yra branduolinės energetikos objektai. Radioanglis dėl savo ilgo skilimo pusperiodžio ir didelio mobilumo biosferoje yra svarbus elementas branduolinės energetikos industrijoje. <sup>14</sup>C yra aptinkama visuose branduolinio reaktoriaus pagrindiniuose komponentuose, valymo sistemose ar  $^{14}C$ konstrukcijų komponentuose. radionuklidas branduoliniame objekte susidaro dėl neutroninės spinduliuotės sąveikos su deguonimi (<sup>17</sup>O), azotu (<sup>14</sup>N) ir anglimi (<sup>13</sup>C). Iš branduolinio objekto <sup>14</sup>C i aplinką patenka dujų ir skysčių pavidalu, taip pat kartu su kietomis branduolinėmis atliekomis. Todėl labai svarbu supančioje aplinkoje atskirti natūralius ir mus antropogeninius radioanglies šaltinius, nes tai suteikia svarbios informacijos pritaikant radioanglį aplinkos ir klimato kaitos moksliniuose tyrimuose, bei ivertinant apšvita dėl <sup>14</sup>C emisijos.

Kadangi vykstant fotosintezei augalai iš atmosferos įsisavina radioanglį, medžių rievių analizė yra veiksminga branduolinių objektų veikimo sąlygų stebėjimo priemonė. Todėl šiame darbe buvo siekiama nustatyti Ignalinos atominės elektrinės kuriamos <sup>14</sup>C koncentracijos padidėjimą ir palyginti ją su fonine <sup>14</sup>C koncentracija.

To siekiant buvo surinkti 45 medžių ėminiai iš antropogeniškai neužterštos vietovės (Vaikšteniai) ir tiriamosios vietovės šalia Ignalinos branduolinės elektrinės. 8 geriausi ėminiai buvo fiziškai ir chemiškai apdoroti laboratorijoje, iš jų buvo paruošti 285 rievių bandiniai. Kiekvienas bandinys buvo chemiškai apdorotas taikant BABAB celiuliozės išskyrimo metodą [2]. Galutiniam bandinių paruošimui buvo naudojama naujausia automatizuota grafitizavimo sistema AGE-3 (IonPlus AG), kuri sujungta su elementiniu analizatoriumi (Vario Isotope Select, Elementar, GmbH). <sup>14</sup>C koncentracijos matavimai atlikti naudojant vienos pakopos greitintuvo masių spektrometrą (SSAMS, NEC, USA).

Atlikti <sup>14</sup>C koncentracijos matavimai, suteikė svarbios informacijos apie Ignalinos atominės elektrinės taršą radioanglimi ir leido įvertinti lokalų <sup>14</sup>C koncentracijos pokytį.



## 1 pav. Oksfordo universiteto naudojamos <sup>14</sup>C koncentracijos atmosferoje kalibracinė kreivė [3] ir Ignalinos AE bei foninės vietovės Vaikšteniuose matavimo rezultatai.

Gautieji rezultatai atskleidžia, kad viso Ignalinos AE darbo periodo metu, branduolinis objektas į aplinką išmetė <sup>14</sup>C anglį, kuri lokalią <sup>14</sup>C koncentraciją padidino 5 proc. <sup>14</sup>C koncentracijos padidėjimas 5 proc., gyventojui sukuria papildomą ~0,7 µSv metinės efektinės dozės padidėjimą per maisto grandinę.

*Reikšminiai žodžiai: radioanglis,* <sup>14</sup>C, celiuliozė, Ignalinos atominė elektrinė.

- B. Bolin, E. T. Degens, S. Kempe, ir P. Ketner, (eds.) Global carbon cycle: SCOPE 13, John Wiley and Sons, New York, NY, 1979.
- [2] M. Nemec, L. Wacker, I. Hajdas, ir H. Gäggeler, Alternative Methods for Cellulose Preparation for Ams Measurement, *Radiocarbon*, 52(2) 1358–1370, 2010.
- [3] C. Bronk Ramsey, Bayesian Analysis of Radiocarbon Dates, *Radiocarbon*, 51(1) 337–360, 2009.

# Aerozolio masių spektro atsako į medžių abiotinį stresą Lietuvoje tyrimas

# Investigation of Aerosol Mass Spectra of Forests Emissions in Response to Abiotic Stress in Lithuania

<u>Julija Pauraitė</u>, Genrik Mordas, Vidmantas Ulevičius Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius julija.pauraite@ftmc.lt

Atmosferoje esančios aerozolio dalelės daro didelę įtaką klimato kaitai ir žmogaus sveikatai. Didelę dalį aerozolio dalelių sudaro biogeninės kilmės antrinės organinės aerozolio dalelės (BSAO). BSAO gali susiformuoti atmosferoje vykstant biogeninės kilmės lakiųjų organinių junginių (BVOC) oksidacijos procesams. Miškai yra vienas pagrindinių BVOC emisijų šaltinių, o šių emisijų koncentracija prilygsta antropogeninių lakiųjų organinių junginių (VOC) koncentracijoms [1].

Šio tyrimo tikslas buvo išmatuoti ir ištirti aerozolio masių spektro pokyčius esant abiotinio streso sąlygoms. Siekiant ištirti BSOA emisijų pokytį dėl kaitros buvo atlikta aerozolio cheminės sudėties analizė. Aerozolio cheminės sudėties matavimams buvo naudojamas Aerozolio cheminės sudėties monitorius ACSM. Matavimai buvo atliekami Aukštaitijos integruotoje monitoringo stotyje (ISM LT01) 2013 – 2016 m. laikotarpiu, 30 min intervalu. Trijų dienų atgalinės oro masių trajektorijos buvo apskaičiuotos naudojantis Hibridinio Vienos Dalelės Lagranžo Integruoto Trajektorijų modelio 4 Versija (HY-SPLIT) [2].

Dienos, kurių metu vyravo švarios oro masės, buvo suskirstytos į šaltas ir šiltas dienas (vidutinė paros temperatūra atitinkamai 6.9 ir 17.4 °C), o išmatuoti aerozolio masių spektrai atitinkamai suvidurkinti. Nustatyta, kad aerozolio masių spektras kinta priklausomai nuo temperatūros: 45 ir 43 m/z signalų intensyvumai šiltų dienų metu padidėjo 2,5 karto, o 26, 27, 37, 42, 53, 59, 65, 71, 73, 79, 82 m/z signalų intensyvumai padidėjo 1,5 karto, lyginant su šaltomis dienomis (1 pav.).



1 pav. normalizuotas aerozolio masių spektrų skirtumas tarp šiltų ir šaltų dienų spektrų.



2 pav. SFOM koncentracijos priklausomybė nuo temperatūros šiltomis ir šaltomis dienomis.

Tiriant submikroninės miškų organinio aerozolio masės (SFOM) pokyčius atrinktomis dienomis, nustatyta, kad SFOM koncentracija šiltomis dienomis buvo 4 kartus didesnė nei šaltomis (atitinkamai 4,7 ir 1,2 μg/m<sup>3</sup>). Suvidurkinta SFOM koncentracijos parinė eiga įgijo didžiasią vertę nakties metu (nuo 20 iki 8 h). Taip pat buvo ištirta, kad SFOM koncentracija eksponentiškai didėja kylant temperatūrai (2 pav.). Taigi, didėjant temperatūrai išauga kai kurių m/z signalų intensyvumai bei padidėja SFOM koncentracija.

Reikšminiai žodžiai: aerozolio dalelės, lakieji organiniai junginiai.

#### Literatūra

[1] Misztal et al. Scientific reports 5, 1-10 (2015).

[2] NOAA, http://www.arl.noaa.gov/ready.htm.

#### Padėka

Moksliniai tyrimai buvo finansuojami Nacionalinės mokslo programos "Agro-, miško ir vandens ekosistemų tvarumas" projekto FOREstRESS "Kompleksiškas klimato ir kitų aplinkos streso veiksnių poveikis miškų gebai adaptuotis ir švelninti globalios kaitos grėsmes" Nr. SIT-3/2015 lėšomis.

## MOCVD GaN struktūrų BELIV charakteristikos

## **BELIV characteristics of MOCVD GaN structures**

<u>Jevenij Pavlov<sup>1</sup></u>, Tomas Čeponis<sup>1</sup>, Eugenijus Gaubas<sup>1</sup>, Domas Paipulas<sup>2</sup>, Ignas Reklaitis<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius <sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius jevgenij.pavlov@tmi.vu.lt

Galio nitridas (GaN) yra perspektyvi medžiaga formuojant spinduliuočių jutiklius aukštųjų energijų fizikos eksperimentuose, apšvitų dozimetrijoje ir kituose taikymuose [1]. GaN pagrindu pagaminti prietaisai pasižymi maža nuotėkio srove, dideliu liuminescencijos efektyvumu ir didele tolerancija jonizuojančioms spinduliuotėms. Vis dėlto MOCVD (metalo-organinio cheminio nusodinimo iš garų fazės) GaN auginimo ant safyro padėklų technologija nėra ištobulinta, ir medžiagoje yra didelis dislokacijų (≥10<sup>9</sup> cm<sup>-2</sup>) ir kitų technologinių defektų tankis. Iš kitos pusės, formuojant GaN planarinius prietaisus, dažnai tenka atskirti ("atkelti") išaugintą GaN daugiasluoksnį darinį nuo padėklo. Šiai epitaksinių sluoksnių atkyrimo (lift-off) procedūrai naudojamos lazerinės technologijos [2]. Tačiau toks sluoksnių atskyrimas pažeidžia sluoksnį,sukuria įtempimus, sukelia sluoksnio trapumą ir susidaro naujų defektų. Galio nitride dėl kristalinės struktūros vpatumų pasireiškia vidinė poliarizacija kristalo augimo ašies kryptimi. Poliarizacijos reiškinys, sietinas su kristaline poliarizacija ir defektais nulemtomis erdvinio krūvio sankaupomis, GaN elektriniuose prietaisuose gali išorinio elektrinio lauko nulemti ekranavimą, trumpinančių didelio laidumo paviršinių sluoksnių susidarymą. Šiems efektams valdyti, tenka ieškoti specialių prietaiso architektūrų, elektrodų konfigūracijų ir funkcionavimo režimų [3].

Šiame darbe buvo tiriami metalas-izoliatoriusmetalas (MiM), stipriai legiruoto n-GaN (NiN) ir Šotki diodų (naudojant Au/Ni) dariniai. Buvo suformuoti planarinių spinduliuočių sensorių, atkeltuose epi-GaN sluoksniuose, ir meza-juostelinių sensorių (1 pav.), suformuotu ėsdinimo (abliacijos) technologijomis, Ominiai dariniai. kontaktai buvo formuojami, pasitelkiant In metalizaciją. Kontaktų omiškumui ir darinio barjerams įvertinti buvo analizuojamos talpos kitimų kinetikos pridėjus tiesiškai augančios įtampos (LIV) impulsus, realizuojant BELIV (Barrier Evaluation by Linearly Increasing Voltage) metoda [4,5].

2-ame paveiksle yra iliustruojamos būdingos BELIV kinetikos, užregistruotos Šotki GaN dariniuose, keičiant LIV impulso amplitudę bei LIV augimo spartą. Pradinis šuoliukas kinetikoje sietinas su stacionaraus barjero įelektrinimo srove, ir ši srovė tobulame diode mažėja plečiantis nuskurdinimo sričiai dėl LIV didėjimo. Diode, kurio bazės srityje yra daug krūvininkų gaudyklių, dėl krūvininkų terminės generacijos iš jų, barjero įelektrinimo srovę ima viršyti generacinė srovė, kuri auga proporcingai nuskurdinimo srities pločiui. Taigi, šiuose dariniuose ryškiai matosi generacinės sroves išaugimas, sietinas didele defektų koncentracija medžiagoje. Dėl kontakto neomiškumo, didelių LIV įtampų srityje generacinės srovės augimas tampa eksponentiniu. NiN dariniuose, kai kontaktai ominiai, gautos kinetikos kartoja LIV impulso formą, tačiau didelių įtampų srityje visgi (>2V) pasireiškia injekcija iš kontaktų. Blokuojančių kontaktų (MiM) atveju, gaunamas kondesatorinis darinys, ir BELIV kinetikos įgyja stačiakampio impulso formą.



1 pav. MOCVD GaN meza struktūros SEM vaizdas.



2 pav. BELIV kinetikos užregistruotos Šotki struktūroje.

Pranešime bus plačiau pateikti MiM, NiN ir Šotki juostelinių sensorių tyrimų rezultatai.

#### Reikšminiai žodžiai: GaN, BELIV, kontaktai

- [1] S.J. Pearton, *GaN and related materials II* (Gordon and Breach Science Publishers, Amsterdam, 2000).
- [2] T. Ueda, M. Ishida, M. Yur, Jpn. J. Appl. Phys. 50 041001 (2011).
- [3] J. Pavlov, T. Čeponis, E. Gaubas, et al., JINST 10 C12015 (2015).
- [4] E. Gaubas et al., Appl. Phys. Lett. 101 232104 (2012).
- [5] E. Gaubas, T. Čeponis and J.V. Vaitkus, *Pulsed capacitance technique for evaluation of barrier structures* (Lambert Academic Publishing, Saarbrucken-Berlin Germany, 2013).

## Modelinis branduolinio kuro ciklo regioninių scenarijų vertinimas (BRILLIANT projektas)

# Numerical Assessment of Regional Nuclear Fuel Cycle Scenarios (BRILLIANT Project)

<u>Rita Plukienė</u>, Laurynas Juodis, Artūras Plukis, Ovidijus Šalkauskas Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius rita.plukiene@ftmc.lt

EURATOM projektas BRILLIANT skirtas identifikuoti kliūtis trukdančias plėstis branduolinei energetikai Baltijos regione (Estija, Latvija, Lietuva, Lenkija ir Švedija) bei įvertinti galimus branduolinio kuro ciklo scenarijus. Vertinant branduolinio kuro ciklą, daugiausiai sunkumų kyla dėl naudoto branduolinio kuro ilgalaikiškumo/toksiškumo ir su tuo susijusio geologinio laidojimo nepatikimumo bei naštos ateities kartoms [1]. Naudotas energetinių reaktorių kuras, dėl jame esančių ilgaamžių plutonio ir kitų aktinoidų bei dalijimosi produktų išliks radiotoksiški 100 tūkst. metų.

Šiame darbe standartinių reaktorių eksploatavimo metu susidarantiems naudoto branduolinio kuro (NBK) ir didelio aktyvumo atliekų srautams vertinti naudojamos TATENA NFCSS [2] bei SCALE6 paketo ORIGEN-ARP programos [3]. Detalūs skaičiavimai padeda įvertinti branduolinio kuro ciklui reikalingų medžiagų kiekius bei tolesnes atliekų tvarkymo strategijas – geologinio laidojimo [4], dalinio perdirbimo ir antrinio panaudojimo ar transmutavimo (IV kartos reaktoriuose ar iki-kritinėse transmutavimo sistemose) [2].

Darbe buvo vertinami Baltijos regione realiai egzistuojančiuose branduoliniuose reaktoriuose (Švedijoje - 12 ir Lietuvoje - 2) bei hipotetiniuose/planuojamuose (pažangiajame verdančio vandens (ABWR) ir Europos sulėgto vandens (EPR) tipo reaktoriuose [5]) susidarantys medžiagų srautai atviro, dalinai uždaro kuro ciklo atvejais.

NFCSS programa apskaičiuoti NBK atliekų srautai 4% (Švedijoje) ir 15% (Lietuvoje) tikslumu atitinka literatūroje pateikiamus duomenis, o lyginant su ORIGEN-ARP apskaičiuotais nuklidų susidarymo RBMK ir PWR reaktoriuose rezultatais - jie 10% ribose sutampa U ir Pu izotopams, tačiau aukštesniesiems aktinoidams gauti iki 2 kartu skirtumai. Naudojantis **ORIGEN-ARP** bei prieinamais literatūriniais duomenimis sudaryta regione egzistuojančių ir planuojamų reaktorių NBK atliekų nuklidinės sudėties duomenų bazė.

Lyginant ABWR bei EPR reaktorių atviro kuro galiai, ciklus, esant maksimaliai leistinai bei projektiniam reaktorių darbo laikotarpiui, ABWR pagamintų apie 81 TWh daugiau energijos, sukurtų 144 t daugiau NBK, kurio transuraninių elementų radiotoksiškumas 1,5 karto didesnis nei EPR reaktoriaus atveju. Švedijos ir Lietuvos reaktoriuose susidaręs NBK būtų tinkamas MOX kuro gamybai, bei galėtų būti panaudojamas ABWR ar EPR dalinai uždarame branduolinio kuro cikle. Tokio scenarijaus atveju trijų Švedijos reaktorių NBK galėtų būti sudegintas ABWR reaktoriuje per 287 metus ir EPR reaktoriuje per 211 metų, atitinkamai IAE NBK per 97 ir 71 metus. Planuojamų reaktorių nepakaktų perdirbto NBK sudeginimui, o susidariusių atliekų radiotoksiškumas liktų gana aukštas, lyginant su atviro kuro ciklo atveju (žr. 1 pav.). Būtų tikslinga transmutuoti atskirtą Pu ir aukštesniuosius aktinoidus tam skirtose sistemose.



I pav. EPR ir ABWR tipo reaktorių metinio NBK radiotoksiškumo kitimas laike dalinai uždaro branduolinio kuro ciklo atveju.

Reikšminiai žodžiai: naudotas branduolinis kuras, radiotoksiškumas, TATENA NFCSS, SCALE6 ORIGEN-ARP modeliavimas.

- R. Plukienė A. Plukis, D. Ridikas, V. Remeikis, A. Garbaras, Env.&Chem. Phys., 25 (4), 171 (2003).
- [2] IAEA NFCSS, https://infcis.iaea.org/NFCSS/About.chtml
- [3] B.T. Rearden and M.A. Jessee, Eds., SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.1, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee (2016).
- [4] Management of spent nuclear fuel and its waste, EASAC policy report No. 23, JRC Reference Report (2014) <u>https://ec.europa.eu/jrc</u>
- [5] VAE (Visagino atominė elektrinė). Lengvojo vandens reaktoriai. http://www.vae.lt/lt/apie-mus/veikla-2/pazangios-technologijos-br anduoliniai-reaktoriai

## Krūvininkų difuziškumo, gyvavimo trukmės ir lokalizacijos sąryšis AlGaN junginiuose

# Connection Between Carrier Diffusivity, Lifetime, and Localization in AlGaN

Žydrūnas Podlipskas, Ramūnas Aleksiejūnas, Jūras Mickevičius, Martynas Riauka Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, Vilnius zydrunas.podlipskas@tmi.vu.lt

Krūvininkų difuzijos koeficientas ir gyvavimo trukmė yra pamatiniai optoelektroninio prietaiso našumą lemiantys parametrai. Deja, AlGaN junginiuose nėra visapusiškai žinoma šiuos parametrus valdančių veiksnių – Al molinės dalies ir krūvininkų lokalizacijos – įtaka. Šiame pranešime mes parodome, kad krūvininkų gyvavimo trukmė ir difuziškumas yra ribojami jų lokalizacijos, o, tuo pačiu metu, gyvavimo trukmė sąlygojama ir krūvininkų difuzijos link defektų.

Mes tyrėme 0.13 – 1 µm storio AlGaN sluoksnius, užaugintus MOCVD ir MEMOCVD technologijomis ant c plokštumos GaN/safyro ir AlN/safyro šablonų. Al molinė dalis sluoksniuose siekė 11 – 71 %. Krūvininkų lokalizacijos gylis buvo įvertintas kvazinuostoviųjų sąlygų fotoliuminescencijos matavimų metu, atliktų 8 – 300 K temperatūrų intervale. Krūvininkų gyvavimo trukmė ir difuzijos koeficientas nustatyti dinaminių difrakcinių gardelių metodu. Dinaminės gardelės buvo indukuotos 25 ps trukmės 266 arba 213 nm bangos ilgio šviesos impulsais, nepusiausvirųjų krūvininkų tankiui siekiant nuo  $3x10^{18}$  iki  $1x10^{20}$  cm<sup>-3</sup>.

Matavimai atskleidė tris dėsningumus:

(I) Krūvininkų nespindulinės rekombinacijos trukmė mažėjo nuo 0.8 ns ir įsisotino ties 0.3 ns verte didėjant Al molinei daliai AlGaN sluoksniuose. Gyvavimo trukmės mažėjimas buvo sąlygotas Al atomų kuriamos struktūrinės netvarkos ir augančio defektų – nespindulinės rekombinacijos centrų – tankio. Tolesnis gyvavimo trukmės mažėjimas buvo slopinamas stiprėjančia krūvininkų lokalizacija.

(II) Didesnis difuzijos koeficientas lėmė spartesnę krūvininkų tėkmę link defektų, tokiu būdu mažindamas jų gyvavimo trukmę. Difuzijos koeficientas augo keliant fotosužadintų nepusiausvirųjų krūvininkų tankį dėl energinių būsenų pildymo ir aktyvesnės jų delokalizacijos, arba mažinant aplinkos temperatūrą dėl silpnėjančios krūvininkų sklaidos.

(III) Krūvininkų difuzijos koeficientas buvo ribojamas jų lokalizacijos ir sklaidos. Sklaidos centrus galimai atstovavo didelėmis Al atomų koncentracijomis indukuoti defektai. Lokalizacijos gylio įtaka krūvininkų difuziškumui pavaizduota 1 pav. Jame matyti, kaip difuzijos koeficientas sumažėjo nuo 2.5 iki 0.1 cm<sup>2</sup>/s lokalizacijos gyliui išaugus nuo 13 iki 65 meV.



l pav. Nepusiausvirųjų krūvininkų bipolinės difuzijos koeficiento prieklausa nuo jų lokalizacijos gylio AlGaN sluoksniuose esant kambario temperatūrai

Reikšminiai žodžiai: AlGaN, dinaminės difrakcinės gardelės, fotoliuminescencija, difuzija, lokalizacija, nespindulinė rekombinacija.

### Elipsoidinio slėnio elektronų spektras sferiniame kvantiniame taške

## Energy spectrum of ellipsoidal valley electrons in a spherical quantum dot

E. Pozingytė, B. Čechavičius, V. Karpus

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Puslaidininkių optikos laboratorija, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius evelina.pozingyte@ftmc.lt

Elektronų energijos spektras netiesioginių puslaidininkių nanokristalituose priklauso nuo nanokristalitų (kvantinių taškų, QD) radiuso  $r_0$  ir elektrono efektinių masių  $m_1$ ,  $m_2$ ,  $m_3$  elipsoidiniame slėnyje. Masių anizotropija paprastai yra ženkli,– silicyje  $m_1 = m_2 = 0.19$ ,  $m_3 = 0.916$ , germanyje  $m_1 = m_2 = 0.082$ ,  $m_3 = 1.58$ . Bismuto, kurio kvantiniai taškai buvo užauginti [1] darbe, T-slėniuose  $m_1 = m_2 = 0.059$ ,  $m_3 = 0.634$ , L-slėniuose  $m_1 = 0.0052$ ,  $m_2 = 0.0136$ ,  $m_3 = 1.21$ .

Šiame darbe atlikti elipsoidinio slėnio elektronų spektro sferiniame kvantiniame taške skaičiavimai.

Be galo aukštų potencinių barjerų kvantiniam taškui Schrödinger'io lygtis bedimensiniuose kintamuosiuose  $x = x/r_0$ ,  $y = y/r_0$ ,  $z = z/r_0$  turi pavidalą

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mu_2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \mu_3 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \pi^2 \epsilon\right] \psi = 0 \qquad (1)$$

ir turi būti sprendžiama esant kraštinei sąlygai  $\psi|_{r=1} = 0$ . Pastarojoje lygtyje  $\epsilon = \varepsilon/W$  – elektrono energija, matuojama dimensinio kvantavimo energijos  $W = \pi^2 \hbar^2/2m_1 r_0^2$ vienetais,  $m_1$  – mažiausia iš efektinių masių ( $m_1 \le m_2 \le m_3$ ),  $\mu_2 = m_1/m_2$  ir  $\mu_3 = m_1/m_3$  – santykinės atvirkštinės masės ( $0 \le \mu_3 \le \mu_2 \le 1$ ). Naudojantis kintamųjų pakeitimu  $\tilde{y} = y/\sqrt{\mu_2}$ ,  $\tilde{z} = z/\sqrt{\mu_3}$  nesunku įsitikinti, kad elipsoidinio slėnio elektronų sferiniame QD uždavinys yra ekvivalentus sferinio slėnio elektronų elipsoidiniame QD ( $x^2 + \mu_2 \tilde{y}^2 + \mu_3 \tilde{z}^2 \le 1$ ) uždaviniui.

Schrödinger'io lygtį (1) galima tiksliai išspręsti elipsoidinėje koordinačių sistemoje, kurioje kintamieji atsiskiria ir pilnutinę banginę funkciją galima išreikšti kaip parcialinių funkcijų, tenkinančių Lamé bangines lygtis, sandaugą [2]. Tai įgalina rasti QD energijos spektrą esant bet kurioms santykinių masių  $\mu_2$ ,  $\mu_3$  vertėms.

Skaičiavimų rezultatus iliustruoja 1 pav., kuriame pateikta kvantinio taško energijos spektro priklausomybė nuo santykinės masės  $\mu_3$  (esant  $\mu_2 = 1$ ). Ribiniais  $\mu_3 = 1$ ir  $\mu_3 = 0$  atvejais, kurie atitinka sferinio slėnio elektronų spektrą kvantiniame taške ir cilindrinėje kvantinėje vieloje, skaičiavimų rezultatai atkartoja žinomus analitinius rezultatus [3]. Kaip matyti iš 1 pav., elipsoidinio slėnio elektronų energijos spektras esant stipriai masių anizotropijai ( $\mu_3 \ll 1$ ) yra labai tankus ir tuo ženkliai skiriasi nuo sferinio slėnio elektronų energijos spektro ( $\mu_3 = 1$ ). Pastarąjį sudaro išsigimę pagal magnetinį kvantinį skaičių *m* energijos lygmenys, kurie skyla į |m| = 0, 1, ..., lkomponentes.

Esant silpnai masių anizotropijai, laikant  $(1-\mu_3) \ll$ 1 perturbacijos parametru, galima atlikti artutinius analitinius skaičiavimus. Gauta analitinė  $\epsilon$ -spektro formulė atitinka branduolinėje fizikoje žinomus Migdalo rezultatus. Esant stipriai masių anizotropijai ( $\mu_3 \ll 1$ ), artutinį Schrödinger'io lygties sprendimą galima atlikti naudojantis adiabatiniu artiniu. Riboje  $\mu_3 = 0$ , spektrą sudaro cilindrinės kvantinės vielos energijos lygmenys, kurie, esant baigtiniam  $\mu_3$ -parametrui, skyla į be galo daug lygmenų (1 pav. pavaizduota tik dalis jų), atitinkančių išilginio kvantinei vielai judėjimo pajuostę. Atlikti skaičiavimai rodo, kad adiabatinis artinys pakankamai aukštu tikslumu (santykinė paklaida < 2 %) aproksimuoja QD energijos spektrą 0 <  $\mu_3 < 0.2$  srityje, atitinkančioje praktiškai svarbias  $\mu_3$ -parametro vertes ( $\mu_3 = 0.05$ , 0.09, 0.21 germanyje, Bi-*T* ir Si, atitinkamai).

Šis ypatumas pagrindžia adiabatinio artinio naudojimą baigtinio barjero kvantinių taškų energijos spektro skaičiavimams. Esant baigtiniam kvantinio taško barjerui, kintamieji elipsoidinėje koordinačių sistemoje neatsiskiria, ir tikslaus Schrödinger'io lygties sprendimo atlikti nepavyksta. Adiabatinis artinys, esant stipriai masių anizotropijai, tuomet tampa pagrindiniu QD spektro tyrimo instrumentu. (Skaitmeninį sprendimą apsunkina erdvės diskretizavimo problema.)



1 pav. Sferinio kvantinio taško energijos spektro priklausomybė nuo santykinės (atvirkštinės) masės  $\mu_3 = m_1/m_3$ , esant  $\mu_2 = 1$  ( $m_2 = m_1$ ).

Reikšminiai žodžiai: sferiniai kvantiniai taškai, elipsoidiniai kvantiniai taškai

- R. Butkutė, G. Niaura, E. Pozingytė, B. Čechavičius, A. Sielskis, M. Skapas, V. Karpus, and A. Krotkus, Nanoscale Research Letters 12, 436 (2017).
- [2] M. Abramowitz and I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions (Washington, NBS, 1964).
- [3] V. Karpus, Dvimačiai elektronai (Vilnius, Ciklonas, 2004).

## Kai kurios klimatinės pasekmės dėl "British Petroleum" kompanijos naftos išsiliejimo

## On some climatic consequences of the BP oil spill

Nina Prokopciuk<sup>1</sup>, Nikolaj Tarasiuk<sup>1</sup>, Tomasz Petelsky<sup>2</sup>

<sup>1</sup>SRI Center for Physical Sciences and Technology, Savanorių ave. 231, 02300 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Institute of Oceanology, Polish Academy of Sciences, Powstańców Warszawy 55, 81-712 Sopot, Poland

nikanster@gmail.com

A start of the global warming was observed in the beginning of 90-ies of the last century. In Scandinavian countries, climate warming processes visibly increased after 2010. It is known that soft climatic conditions of the region are significantly affected by warm waters of the Gulf Stream. Interaction of the Gulf Stream warm waters with the frozen wastes of the Arctic results in the auto-oscillations of average annual temperatures [1]. Data on the annual course of those temperatures [2] for Kirkenes (N 69.73°; E 29.9°) and Jan Mayen (N 70.93°;  $-8.66^{\circ}$ ) meteorological stations in Norway, Ε respectively, are shown in Fig.1. In spite of the fact that data in 2002 and 2005 were unavailable, it is evidently seen that after 2010 the extreme oscillation amplitudes in both cases are elevated. The same view can be seen at the other numerous stations in Norway, Sweden and Finland [2].



Fig. 1. A course of average annual temperatures at Kirkenes (N 69.73°; E 29.9°) and Jan Mayen (N 70.93°; E -8.66°) meteorological stations in Norway.

The analysis of the seasonal course of the Gulf Stream temperature latitudinal distribution showed that after the British Petroleum (BP) oil spill in May 2010 the situation in the latitudinal interval of the Scandinavian countries and Great Britain sharply changed from June 2010 [3], Table 1.

Already in June 2010 (Table 1), temperatures in that latitudinal interval reached 28 - 28.5 °C. However, they usually varied in summer in the 10-15 °C interval (Table 1). Later, in January 2011 and up to 2015, the temperatures were elevated (28 - 28.5 °C interval) reaching 28.5 - 29 °C in summer. Only just in July 2015, the temperatures decreased down to their usual range.

Table 1. Average month temperatures (°C) in the Atlantic Ocean in the latitudinal interval of Great Britain and Scandinavia

Year	May	June	July
2000	10 - 5	10 - 5	15 - 10
2001-2009	10 - 5	15 - 10	15 - 10
2010	10 - 5	28.5 - 28	29 - 28.5
2011	28.5 - 28	28.5 - 28	29 - 28.5
2012	28.5 - 28	28.5 - 28	29 - 28.5
2013	28.5 - 28	28.5 - 28	29 28.5
2014	28.5 - 28	28.5 - 29	29 28.5
2015	28.5 - 28	28.5 - 28	15 - 10
2016	10 - 5	15 - 10	15 - 10

Temperature of the ocean surface water mainly depends on two components - the absorbed solar radiation and on energy losses related to evaporation. The influence of the solar activity on the absorbed radiation is too small and during the last years it was decreasing. Thus, the solar activity in terms of the Wolf number [4] for 23 solar cycles (August 1996 - 2008) was higher than that during the 24-th cycle (from December 2008 - in progress), but surface temperatures of the Atlantic Ocean in the latitudinal interval of Scandinavia till June 2010 were usual. Evidently, the main cause of the increase in the Gulf Stream water temperatures is related to the decrease of evaporation. It means that the oil spill in the Gulf of Mexico was not completely localized and practically during one month the surface waters of the Atlantic were covered with a film of the surface-active substances. With the main velocity of the Golf Stream surface waters of ~5 knots [5], it is surely possible.

Due to the wave breaking processes, the respective substances of the surface film might be found in aerosol particles during 2010-2015 and can be identified according to their origin.

Keywords: global warming, temperature, the Gulf Stream, oil spill.

#### **References:**

- Kagan B. A., 1995, Ocean Atmosphere Interaction and Climate Modeling. Cambridge University Press, 377 pp.
- [2] Global Climate Data: <u>https://en.tutiempo.net/climate</u>
- [3] Monthly Global Sea Surface Temperature Plot Archive: <u>http://www.noaa.gov/</u>
- [4] Wolf Number: http://www.sok-het.de/aktivitaetsverlauf/
- [5] Stommel H., 1965. The Gulf Stream: A Physical and Dynamical Description. Cambridge University Press, London, 248 pp.
#### Neutronais apšvitintų GaN sensorių elektrinio atsako charakteristikos

#### Characteristics of the electrical response of neutron irradiated GaN sensors

Kornelijus Pūkas, Tomas Čeponis, Eugenijus Gaubas

Vilniaus Universitetas, Taikomųjų Mokslų Institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

kornelijus.pukas@ff.stud.vu.lt

Ammono-termine technologija [1] užauginta galio nitrido (AT GaN) medžiaga yra viena perspektyviausių dalelių detektorių formavimui [2]. Šioje medžiagoje dislokacijų tankis (DD ~  $10^4$ - $10^5$  cm<sup>-2</sup>) yra ženkliai mažesnis (DD~ $10^4$ - $10^5$  cm<sup>-2</sup>) negu kitomis technologijomis (MOCVD, HVPE) užaugintose GaN medžiagose (DD $\ge 10^8$  cm<sup>-2</sup>). Todėl AT GaN pagrindu suformuotų apšvitų jutiklių atsparumo radiacijai ir šių detektorių signalų kaitos, didėjant apšitos įtėkiui, tyrimai yra aktualūs.

Šiame darbe buvo tiriamos AT GaN sensorių elektrinio atsako charakteristikos. AT GaN medžiagos buvo legiruotos (~10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup>) Mn ir Mg priemaišomis. Mg yra plačiausiai taikoma priemaiša p-laidumo GaN medžiagai suformuoti. Mn čia veikia kaip sparčios rekombinacijos centrai ir kompensuojančios kitu technologiniu defektu krūvi priemaišos, taip suformuojant pusiau-izoliuojančia GaN medžiaga. Struktūros metalas-izoliatorius-metalas (MiM) sensoriai buvo suformuoti metalizuojant ~400 µm storio AT GaN 0.3×0.3 cm<sup>2</sup> ploto plokštelių poliruotus paviršius. Viename metalizacijos paviršiuje yra formuojama skaidri diafragma optiniam sužadinimui lazerio pluošteliu. Šie sensoriai buvo apšvitinti reaktoriaus neutronais, keičiant apšvitos įtėkį  $10^{11}$ -5× $10^{16}$  n/cm<sup>2</sup>intervale.

Sensoriu impulsinis elektrinis atsakas buvo registruojamas srovės kinetikų (TCT- transient current technique) metodu [3, 4]. Lygiagrečiai buvo kontroliuojami krūvininkų rekombinacijos trukmės kitimai, krūvininkų gyvavimo trukmę įvertinant iš koncentracijos nykimo spartos, matuojamos nesąlytiniu mikrobangomis zonduojamo fotolaidumo kinetiku rekombinacijos Krūvininkų metodu. trukmės neapšvitintuose AT GaN:Mn bandiniuose siekė ~30 ns, o GaN:Mg – 1-10 µs. Šios rekombinacijos trukmės yra ženkliai ilgesnės už tipines krūvininkų dreifo kinetikas, esant išorinei įtampai >200 V.

Tipiškos TCT metodu užregistruotos krūvininkų dreifo kinetikos, žadinant krūvininkus priepaviršiniame sluoksnyje, yra iliustruojamos 1 pav. Mn legiruotuose GaN sensoriuose matoma (1a pav.) plokščia impulso viršūnė, kuri siejama su krūvininkų dreifo trukme (~1 ns), ir, dėl sąlyginai trumpos rekombinacijos trukmės GaN:Mn, nepavyksta išskirti dreifo sandų. Didėjant neutronų įtėkiui, TCT srovė mažėja dėl krūvininkų gyvavimo trukmės trumpėjimo, kai auga radiacinių rekombinacijos centrų koncentracija. Mg legiruoto AT GaN sensoriuose, kuriuose yra ženkliai ilgesnė krūvininkų gyvavimo trukmė, galima išskirti (1b pav.) bipolio (pradinė smailė) ir monopolio krūvininkų dreifo (vėlesnis vingis) komponentes. Kaip ir AT GaN:Mn sensoriuose, didėjant neutronų apšvitos įtėkiui, TCT srovė AT GaN:Mg sensoriuose mažėja dėl krūvininkų gyvavimo trukmės trumpėjimo dėl radiacinių rekombinacijos centrų.



1 pav. TCT kinetikų evoliucija, kintant reaktoriaus neutronų apšvitos įtėkiui, AT GaN:Mn (a) ir AT GaN:Mg sensoriuose.

Tikslesniems krūvininkų transporto parametrų kaitos įvertinimams buvo atlikti TCT kinetikų profiliavimai, skenuojant sužadinimo pluošteliu sensoriaus briauną. Šie rezultatai bus plačiau pateikti ir aptarti pranešime.

Reikšminiai žodžiai: Ammono-terminės technologijos GaN, srovės kinetikų metodas, kinetikų profiliavimas.

- R.Kucharski, et al, Ammonothermal growth of GaN crystals on HVPE-GaN seeds prepared with the use of ammonothermal substrates J. Cryst. Growth 427 (2015) 1.
- [2] E.Gaubas et al, Study of neutron irradiated structures of ammonothermal GaN, J. Phys. D: Appl. Phys. 50 (2017) 135102.
- [3] V.Eremin, et al, Development of transient current and charge techniques for the measurement of effective net concentration of ionized charges (N<sub>eff</sub>) in the space charge region of p-n junction detectors *Nucl. Instrum. Methods A* 372 (1996) 388.
- [4] E.Gaubas, T.Ceponis, E.Kuokstis, D.Meskauskaite, J.Pavlov, and I.Reklaitis Study of charge carrier transport in GaN sensors *Materials* 9 (2016) 293.

#### InGaN šviestukų rekombinacijos koeficientų nustatymas iš mažo sužadinimo fotoliuminescencijos matavimų

#### Small Signal Photoluminescence investigation of InGaN LED Recombination Coeffcients

I. Reklaitis<sup>1</sup>, F. Nippert<sup>2</sup>, R. Kudžma<sup>1</sup>, T. Malinauskas<sup>1</sup>, S. Karpov<sup>3</sup>, I. Pietzonka<sup>4</sup>, H. J. Lugauer<sup>4</sup>, M. Strassburg<sup>4</sup>,

P. Vitta<sup>1</sup>, R. Tomašiūnas<sup>1</sup>, A. Hoffmann<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Applied Research, Vilnius University, Saulėtekio 10, LT-10223 Vilnius, Lithuania
<sup>2</sup>Institut für Festkörperphysik, Technische Universität Berlin, Handenbergstraße 36, 10623 Berlin, Germany
<sup>3</sup>STR Group Soft-Impact Ltd., P.O.Box 83, 27 Engels av. 194156 St. Petersburg, Russia
<sup>4</sup>OSRAM Opto Semiconductors GmbH, Leibnizstraße 4, D-93055 Regensburg, Germany
ignas.reklaitis@tmi.vu.lt

Išmatuotas diferencines krūvininkų gyvavimo trukmes [1] (angl. *Differential carrier lifetime*, DLT) yra įprasta analizuoti naudojantis vadinamuoju ABCmodeliu [2], ypač, kai bandoma paaiškinti vadinamąjį *droop* reiškinį, kuomet sumažėja šviestuko išorinis kvantinis našumas didinant tiesioginę juo tekančią srovę [3]. Įvedus normuotos optinės galios P ir kokybės faktoriaus Q sąvokas, normuotą išorinį kvantinį našumą (EQE) galima apibrėžti taip [4]:

$$\frac{EQE_{max}}{EQE} = \frac{Q + P^{1/2} + P^{-1/2}}{Q+2},$$
 (1)

tuomet kokybės faktorių *Q* galima nustatyti atliekant nesudėtingą EL matavimą prie skirtingų šviestuku tekančių srovių. Jei yra žinodama DLT priklausomybė nuo šviestuku tekančios srovės stiprio, tuomet nesunkiai galima nustatyti ir *Shockley– Read–Hall* (SRH) rekombinacijos koeficientą *A*:

$$\tau = \frac{1}{A + 2BN + 3CN^2} \left[2\right] \tag{2}$$

$$\tau = \frac{A^{-1}}{1 + 2QP^{1/2} + 3P} \ [5]. \tag{3}$$

Čia A - Shockley-Read-Hall rekombinacijos, B - bimolekulinės rekombinacijos, o C - Ožė rekombinacijos koeficientai,  $\tau$  - diferencinė krūvininkų gyvavimo trukmė. Q ir P parametrų įvedimas [4] leidžia nustatyti SRH koeficientą vien iš EL ir DLT matavimų, tuo pačiu nereikia daryti sunkiai pagrindžiamų prielaidų dėl krūvininkų tankio priklausomybės nuo šviestuku tekančios srovės N(I) [5]. Kuomet yra žinomos Q ir A koeficientų vertės, nesunku apskaičiuoti ir kitus ABC-modelio rekombinacijos koeficientus [5].

Pranešime bus pristatyti ir palyginti (žr. 1 pav.) to paties šviestuko ABC-modelio rekombinacijos koeficientai nustatyti naudojant mažo signalo matavimo metodą su laikine skyra (angl. *small-signal time-resolved photo luminescence*, SSTRPL) ir su dažnine skyra (angl. smallsignal frequency-domain lifetime measurements, SSFD-LM). Iš pristatomų rezultatų buvo nustatyta, kad DLT priklausomybė nuo *P*, naudojant su skirtingus matavimo būdus yra identiška. Taip pat, atlikus eksperimento palyginimą su teoriniu modeliu, buvo nustatyta, kad ABC-modelis patikimai aprašo rezultatus, tik kai normuotos optinės galios vertė *P* viršija 4, t.y. kai galima ignoruoti krūvininkų ištrūkimą iš aktyviosios šviestuko srities.



1 pav. DLT matuotų naudojant SSFDLM (juodi rombai) ir SSTRPL (raudoni tuščiaviduriai apskritimai) palyginimas, kaip funkcija nuo normuotos šviestuko optinės galios P [6]. Linijos sumodeliuotos naudojant (3) lygtį.

Reikšminiai žodžiai: ABC-modelis, InGaN kvantinės duobės, diferencinė krūvininkų gyvavimo trukmė

- [1] A. David, M.J. Grundmann, Appl. Phys. Lett. 96, 103504 (2010).
- [2] B. Galler, P. Drechsel, R. Monnard, P. Rode, P. Stauss, S. Froehlich, W. Bergbauer, M. Binder, M. Sabathil, B. Hahn, J. Wagner, Appl. Phys. Lett. **101**, 131111 (2012).
- [3] J. Piprek, Phys. Status Solidi A 207(10), 2217(2010).
- [4] I.E. Titkov, S.Y. Karpov, A. Yadav, V.L. Zerova, M. Zulonas, B. Galler, M. Strassburg, I. Pietzonka, H.J. Lugauer, E.U. Rafailov, IEEE J. Quant. Electron. 50, 911 (2014).
- [5] F. Nippert, S. Karpov, I. Pietzonka, B. Galler, A. Wilm, T. Kure, C. Nenstiel, G. Callsen, M. Strassburg, H.J. Lugauer, A. Hoffmann, Jpn. J. Appl. Phys. 55, 05FJ01 (2016).
- [6] I. Reklaitis, F. Nippert, R. Kudzma, T. Malinauskas, S. Karpov, I. Pietzonka, H. J. Lugauer, M. Strassburg, P. Vitta, R. Tomasiunas, and A. Hoffmann, J. Appl. Phys. **121**, 035701 (2017).

#### Epitaksinių InGaAs kvantinių strypelių optiniai tyrimai

#### Optical investigation of epitaxial InGaAs quantum rods

Andrius Rimkus,<sup>1</sup> Evelina Pozingytė,<sup>1</sup> Ramūnas Nedzinskas,<sup>1</sup>Bronislovas Čechavičius,<sup>1</sup> Julius Kavaliauskas,<sup>1</sup> Gintaras Valušis,<sup>1</sup> Lianhe Li<sup>2</sup> and Edmund H. Linfield<sup>2</sup> <sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius <sup>2</sup>School of Electronic and Electrical Engineering, University of Leeds, Leeds LS2 9JT, United Kingdom

andrius.rimkus@ftmc.lt

Novel epitaxial nanostructures, quantum rods (QRs), have gained interest in fundamental and experimental physics due to potential applications in optoelectronics. QRs consists of vertically elongated InGaAs quantum dots (QDs) immersed in the shallower InGaAs/GaAs quantum well (QW). The combined 0D and 2D carrier confinement in QRs leads to a variety of new properties with respect to regular QDs, showing features of the pure QD, pure QW and mixed electronic states. Additionally, bound states can also appear within QW continuum states [1]. Therefore, to reveal interesting optical and carrier dynamic properties [2] QRs should be spectroscopically explored in more detail.

In this report, the temperature-dependent (3–300 K) optical investigation of different (0.25–4.1) aspect ratio (AR) InGaAs QRs is presented. The complementary spectroscopic techniques of photoluminescence (PL), PL excitation (PLE) and photoreflectance (PR) (Fig. 1), supported by the calculations within 8-band **kp** model (Fig. 2), has given an insight into the physical properties of the QR structures studied.

Photomodulation (PR) technique has been used to determine the band structure of OR/OW complex system (Fig. 1). The experimental results were then verified by the calculations of energy levels and wavefunctions of realistic 3D model, taking into account strain and piezoeffect. Temperature and excitation power dependent variation of interband optical transitions related to In-rich InGaAs QRs and the surrounding InGaAs QW are revealed and discussed. In particular, PL spectra show a QR height-dependent blueshift with increasing excitation power. This blueshift is discussed in terms of the phase-space filling effects in the QRs, according to calculated optical transition intensities (Fig. 2). The analysis of thermal quenching of emission intensity yield two activation energies, assigned to low and high temperature ranges. It is supposed that thermal escape of carriers from InGaAs QRs to the surrounding InGaAs QW is not very efficient due to a strong reverse process. Moreover, the possible channels of the carrier transfer were established from PLE investigations, performed at different temperatures.

Keywords: InGaAs quantum rods, interband transitions, photoreflectance, photoluminescence.



Fig. 1 Low- and high-excitation photoluminescence (PL), photoreflectance (PR) and photoluminescence excitation (PLE) spectra of high AR (4.1) InGaAs QR structure. Measurements were carried out at 3 K.



Fig. 2 Low temperature normalized PL spectra (excitation: 0.03-200 mW) and normalized intensity of calculated optical transitions (A), gradually including electronic states from  $1 \times 1$  to  $12 \times 12$ . The bars indicate QR optical transition energies and intensities calculated within strain-dependent 8-band **kp** model.

#### References

N. Prodanovic, N. Vukmirovic, D. Indjin, Z. Ikonic, P. Harrison, J. Appl. Phys. **111**, 073110 (2012).
 R. Nedzinskas, B. Čechavičius, A. Rimkus, E. Pozingytė, J. Kavaliauskas, G. Valušis, L.H. Li, and E.H. Linfield, J. Appl. Phys. **117**, 144304 (2015).

#### NgoMIV endonukleazės sąveikos su DNR dinamikos tyrimas panaudojant pavienių molekulių FRET

#### Probing the Dynamics of Restriction Endonuclease NgoMIV-DNA Interaction by Single-Molecule FRET

Marijonas Tutkus<sup>1</sup>, Giedrius Sasnauskas<sup>2</sup>, <u>Danielis Rutkauskas<sup>1</sup></u> <sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius <sup>2</sup>Biotechnologijos institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 7, LT-10257 Vilnius danielis@ar.fi.lt

Restrikcijos endonukleazės (REazės) yra esminės restrikcijos-modifikacijos sistemu komponentės, apsaugančios bakterijas nuo bakteriofagų infekcijos. Geriausiai žinomos yra II tipo REazės, naudojamos kaip molekulinės žirklės įvairioms in vitro manipuliacijoms. Jos atpažįsta 4-8 bazių porų DNR taikinius ir ties jais kerpa abi DNR grandines. Iprastai, šiai reakcijai pakanka Mg<sup>2+</sup> jonų kofaktoriaus. Nepaisant panašios funkcijos, II tipo REazės skiriasi oligomerine struktūra ir DNR karpymo mechanizmu. Ortodoksinės II tipo REazės yra homodimerai, sąveikaujantys su ir kerpantys pavienius DNR taikinius. Tuo tarpu, IIF tipo REazėms efektyviam karpymui būtina sąveika su dviem taikiniais tuo pačiu metu. Tokios sąveikos rezultatas yra DNR kilpojimasis, stebimas taip pat ir kituose biologiniuose procesuosegenų ekspresijos reguliacijoje, DNR replikacijoje ir rekombinacijoje. Dėl to, kad yra santykinai paprastos, REazės vra patogios modelinės sistemos kilpojimosi procesui tirti. Taigi, šio darbo tema buvo kiekybinis DNR saveikos charakterizavimas su homotetramerine REaze-NgoMIV, sąveikaujančia su dviem simetriškais 5'-GCCGGC-3' DNR taikiniais. NgoMIV indukuotas DNR kilpojimas buvo bandomas tirti anksčiau biocheminiais metodais,[1] bet DNR kilpos pasirodė esančios pernelyg nestabilios. Taip pat, panaudojant molekulių fluorescencijos pavieniu koreliacijos spektroskopiją buvo rastos NgoMIV-DNR kompleksų difuzijos charakteristikos.[2] Šiame darbe mes tyrėme NgoMIV sąveikos su ant paviršiaus imobilizuotais DNR fragmentais dinamiką realiu laiku, panaudodami pavienių molekulių Förster'io rezonansinės energijos pernašos (FRET) ir visiško vidaus atspindžio fluorescencijos (TIRF) mikroskopijos metodą. DNR fragmentai buvo pažymėti fluorescentiniais dažikliais arti NgoMIV atpažinimo sekų taip, kad DNR taikiniams suartėjus dėl sąveikos su REaze, atstumas tarp dažiklių tampa tinkamas efektyviai FRET. Tokiu būdu, FRET efektyvumo kitimas yra tiesiogiai susijes su DNR sąveikos su NgoMIV dinamika. Papildomai FRET, naudotai stebėti NgoMIV indukuojamam DNR kilpojimuisi, taip pat buvo panaudotas baltymo indukuotas fluorescencijos sustiprinimo efektas (PIFE) charakterizuoti NgoMIV-DNR kompleksų disociacijai. Kombinuojant šias dvi metodikas buvo gautos DNR išsikilpojimo ir NgoMIV disociacijos kinetinės konstantos. Buvo gauta, kad NgoMIV disocijuoja nuo pavienio DNR taikinio palyginti lėtai-vidutiniškai per ~5 min. Tuo tarpu, NgoMIV sąveika su dviem DNR taikiniais pasirodė esanti heterogeniška, demonstruojanti labai skirtingus DNR kilpos stabilumus (1 pav.).



1 pav. Skirtingos individualių DNR fragmentų FRET efektyvumo laikinės priklausomybės.

Stebėtas sąveikos nevienalytiškumas iš dalies buvo paaiškintas tuo, kad NgoMIV, būdamas tetramerinis baltymas, formuoja skirtingo pavidalo—specifines arba pusiau specifines kilpas, kuomet sąveikauja su dviem specifiniais arba vienu specifiniu ir vienu nespecifiniu DNR taikiniu, atitinkamai. Kita vertus, sąveikos įvairialypiškumas taip pat buvo susietas su galimu NgoMIV fermento konformaciniu heterogeniškumu.

Reikšminiai žodžiai: DNR kilpojimas, kinetinė greičio konstanta, heterogeniškumas.

- S. E. Milsom, S. E. Halford, M. L. Embleton, M. D. Szczelkun, *J Mol Biol* 2001, 311, 515.
- [2] Z. Katiliene, E. Katilius, N. W. Woodbury, *Biophys J* 2003, *84*, 4053.

#### Ultragarsiniai polimerų kompozitų su MoS<sub>2</sub> ir OLC nanodalelėmis tyrimai

Ultrasonic studies of polymer composites with MoS<sub>2</sub> type and OLC nanoinclusions

<u>V. Samulionis<sup>1</sup></u>, J. Macutkevic<sup>1</sup>, J. Belovickis<sup>1</sup>, J. Banys<sup>1</sup>, A. Sánches-Ferrer<sup>2</sup>, O. Shenderova<sup>3</sup> <sup>1</sup>Physics Faculty of Vilnius University, Sauletekio 9/3, LT-10222 Vilnius, Lithuania <sup>2</sup>Institute of Food, Nutrition & Health, ETH Zurich, Switzerland <sup>3</sup>International Technology Center, Raleigh, NC 27715, USA vytautas.samulionis@mail.lt

The integration of inorganic nanoparticles into a polymer matrix allows both properties from inorganic nanoparticles and polymer to be combined. Such polymer based nanocomposites have attracted increasing because of their attention unique emerging from the combination properties of materials. In particular, organic and inorganic nanoscale fillers such as carbon nanotubes or onion-like carbons (OLC) can be used to reinforce polymer matrices. Inorganic nanotubes, such as MoS<sub>2</sub> can be also used for fabrication of various composites based on polymer materials, because they exhibit a good homogeneity and solubility of the composite material. Composite materials made of polymers with functional nanofillers can become a perspective alternative for conventionally used materials in industry and science.

Ultrasonic waves as non-destructive testing technique is used for determination of elastic properties of polymers and polymer composites [1]. This method allows obtaining information about vibrating particles of a media and how it is influenced by addition of another material in the host lattice of polymer. Ultrasonic spectroscopy allows to observe and evaluate relaxation processes that govern nanocomposites elastic behaviour and to reveal variation of these processes because of the change of the filler concentration.

In this contribution we present the temperature measurements of longitudinal ultrasonic velocity and attenuation in two types of polymer composites with nanoinclusions: polyurea elastomers with MoS<sub>2</sub> nanotubes or  $Mo_6S_2I_8$  nanowires and polydimethyl siloxane (PDMS) composites with onion-like carbons (ZnO).The or zinc oxide (OLC) temperature dependencies of longitudinal ultrasonic velocity and attenuation, of these nanocomposites based on nanoinclusions have been studied in wide temperature range including glass transitions. Ultrasonic measurements were carried out using automatic computer controlled pulse-echo ultrasonic system in 10-30 MHz frequency range. The system has large dynamic range and large input ultrasonic power, therefore the large ultrasonic attenuation values we are able to measure.

All investigated composite materials showed large ultrasonic attenuation maxima – of the order of  $\alpha \approx$  15-30 cm<sup>-1</sup> for polyurea elastomers [2] and of the order of  $\alpha \approx 20$  - 25 cm<sup>-1</sup> for PDMS-OLS composites at 10 MHz frequency – which appeared above the glass

transition temperature  $T_g$  of the polyurea elastomer or PDMS polymer matrix. It was shown that the shape and position of these attenuation peaks was influenced by the presence of MoS<sub>2</sub> nanotubes in polyurea elastomers or OLC, ZnO nanoparticles in PDMS [3]. The increase of ultrasonic velocity with increase of nanoparticle concentration in investigated nanocomposites was observed showing the reinforce-ment of the polymer material. The significant increase of ultrasonic attenuation in PDMS with increase of OLS /ZnO concentration was observed at room temperature and such behavior can be attributed to ultrasound nanoparticle interaction in polymer matrix.

*Keywords: polymer composites, ultrasonic measurements, elastic properties, nanoinclusions, glass transitions.* 

#### References

- [1] V. Samulionis, J. Banys, A. Sánchez-Ferrer and R. Mezzenga, Ultrasonic Characterization of Dynamic Elastic Properties of Polymer Composites with Inorganic Nanotubes, *Sensors & Transducers* 12, 66 (2011).
- [2] V. Samulionis, S. Švirskas, J. Banys, A. Sánchez-Ferrer, S. Jeog Chin and T. McNally. Ultrasonic properties of composites of polymers and inorganic nanoparticles. *Phys. Status Solidi* A 210, 2348 (2013).
- [3] J. Belovickis, J. Macutkevic, Š. Svirskas, V. Samulionis, J. Banys, O. Shenderova and V. Bojarnovic. Ultrasonic and dielectric relaxations in PDMS/ZnO nanocomposite. *Phys. Status Solidi* B 252, 2778 (2015)

# Krūvinikų rekombinacija ir difuzija MAPbBr3 perovskitiniame kristale plačiame sužadinimų intervale

#### Carrier recombination and diffusion in MAPbBr<sub>3</sub> perovskite crystal in wide excitation range

Patrik Ščajev<sup>1</sup>, Arūnas Miasojedovas<sup>1</sup>, Saulius Miasojedovas<sup>1</sup>, Saulius Juršėnas<sup>1</sup> <sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Taikomųju mokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius patrik.scajev@ff.vu.lt

Neseniai švino halogenidų perovskitų kristalai pradėti auginti atvirkštinės kristalizacijos būdu iš tirpalo fazės [1]. Gauti kristalai panaudoti siauraspektriniams fotodetektoriams [2] bei dvifotoniniams autokoreliatoriams [3]. Tačiau išsamus krūvio transportas kristaluose reikalauja papildomų tyrimų.

Šiame darbe tiriamas  $MAPbBr_3$  kristalas buvo užaugintas atvirkštinės temperatūros kristalizacijos metodu 70 °C temperatūroje [1]. Pagamintas bandinys ( $3 \times 3 \times 0,6 \text{ mm}^3$ ) buvo nupoliruotas iki optinės kokybės, reikalingos matavimams.

Krūvininkų rekombinacijos ir difuzijos tyrimams MAPbBr<sub>3</sub> kristale plačiame sužadinimų intervale buvo pritaikytos dinaminių gardelių, laisvakrūvės sugerties, bei laikinės skyros fotoliuminescencijos metodikos esant vienfotoniam (527 ir 480 nm) ir dvifotoniam (1053 ir 900 nm) sužadinimams. Dideli krūvininkų tankiai (> 10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup>) ir paviršinis sužadinimas buvo pasiekti esant vienfotoniam sužadinimai, kadangi sugerties koeficientas ties naudotais bangos ilgiais yra 6×10<sup>4</sup> cm<sup>-1</sup>. Esant dvifotoniam sužadinimui pasiektas tūrinis sužadinimas ir maži krūvininkų tankiai (iki ~10<sup>16</sup> cm<sup>-3</sup>).

Mažų sužadinimų gyvavimo trukmės vertė buvo 1,700  $\mu$ s iš laisvakrūvės sugerties matavimų (FCA), bei 1,400  $\mu$ s iš laikinės skyros fotoliuminescencijos (PL) matavimų, atsižvelgiant į  $\tau_{PL} = \tau_{FCA}/2$  sąryšį. Pastaroji trukmė yra sąlygota nespindulinių defektų. Esant mažiems vienfotoniams sužadinimams gyvavimo trukmės siekė vos kelias nanosekundes, kas buvo sąlygota paviršinės rekombinacijos.

sugerties Laisvakrūvės ir laikinės skyros fotoliuminescencijos kinetikų matavimai didinant sužadintų krūvininkų tankiui parodė gyvavimo trukmės mažėjimą. Gautos gyvavimo trukmės priklausomybės leido nustatyti bimolekulinės rekombinacijos koeficienta:  $B = 3 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$  bei Ože koeficienta C = $1.2 \times 10^{-29}$  cm<sup>3</sup>/s. Bimolekulinės rekombinacijos sparta esant dvifotoniam sužadinimui buvo apie 20 kartų mažesnė dėl reabsorbcijos [4]. Taipogi stebėtas bimolekulinės rekombinacijos koeficiento mažėjimas nuo sužadinimo dėl išsigimimo, kas buvo patvirtinta teoriniais skaičiavimais.

Nustatytas difuzijos koeficientas kito nuo 0,45 iki 1,7 cm<sup>2</sup>/s didėjant sužadinimui, kas gali būti paaiškinta būsenų tankio uodegų pildymu ir išsigimimu. Naudojant nustatytas D ir  $\tau$  priklausomybes, apskaičiuota difuzijos ilgio priklausomybė nuo sužadinimo: difuzijos ilgis mažėjo nuo 7 iki 0,1 µm, kas rodo kad MAPbBr<sub>3</sub> kristalas yra pakankamai aukštos elektroninės kokybės.



1 pav. Fotoliuminescencijos irimo trukmės esant 900 nm sužadinimui bei difuzijos koeficiento priklausomybės nuo sužadintų krūvininkų tankio esant kombinuotam 1053 nm ir 527 nm sužadinimui.

Reikšminiai žodžiai: švino halogenidų perovskitai, difuzijos koeficientas, rekombinacijos trukmė, laisvakrūvė sugertis, dinaminės gardelės, laikinės skyros fotoliuminescencija.

- [1] M. I. Saidaminov, A. L. Abdelhady, B. Murali, E. Alarousu, V. M. Burlakov, W. Peng, I. Dursun, L. Wang, Y. He, G. Maculan, A. Goriely, T. Wu, O. F. Mohammed and Osman M. Bakr, High-quality bulk hybrid perovskite single crystals within minutes by inverse temperature crystallization, Nat. Commun. 6:7586, (2015).
- [2] Y. Fang, Q. Dong, Y. Shao, Y. Yuan and J. Huang, Highly narrowband perovskite single-crystal photodetectors enabled by surface-charge recombination, Nat. Photon. 9, 679–686 (2015).
- [3] G. Walters, B.randon R. Sutherland, S. Hoogland, D. Shi, R. Comin, D. P. Sellan, O. M. Bakr, E. H. Sargent, Two-Photon Absorption in Organometallic Bromide Perovskites, ACS Nano 9, 9340–9346 (2015).
- [4] T. Yamada, Y. Yamada, Y. Nakaike, A. Wakamiya, and Y. Kanemitsu, Photon Emission and Reabsorption Processes in CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbBr<sub>3</sub> Single Crystals Revealed by Time-Resolved Two-Photon-Excitation Photoluminescence Microscopy, Phys. Rev. Appl. 7, 014001 (2017).

#### GaAsBi/AlAs kvantinių duobių tyrimai peršviečiamuoju elektroniniu mikroskopu

#### GaAsBi/AlAs quantum wells characterisation by HRTEM

Martynas Skapas<sup>1,2</sup>, Renata Butkutė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius <sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius <u>Martynas.skapas@ftmc.lt</u>

Peršviečiamoji elektroninė mikroskopija – aukštos skiriamosios gebos tyrimų instrumentas, taip pat leidžiantis atlikti ir elementinę bei fazinę (difrakcinę) itin mažų kiekių ar netgi atskirų sluoksnių ar priemaišinių fazių analizę.

Šiame darbe buvo tiriamas Bi nanolašų (~10nm skersmens) susidarymas GaAsBi/AlAs supergardelėje atkaitinant aukštoje temperatūroje.

GaAsBi/AlAs supergardelė buvo užauginta molekulinių pluoštelių epitaksijos (MBE) būdu ant 100 orientacijos GaAs padėklų. Detaliai auginimo procesas aprašytas [1].

Bandiniai po auginimo buvo atkaitinti įvairiose temperatūrose nuo 650 °C iki 750 °C azoto atmosferoje 180s. Siekiant išvengti GaAs skilimo aukštoje temperatūroje, atkaitinimo metu bandiniai buvo uždengiami GaAs padėklu.

Bandiniai TEM analizei buvo paruošti FEI Helios nanolab 650 skenuojančiu elektroniniu mikroskopu (SEM) su fokusuotų Ga jonų šaltiniu (FIB). Paruošimo metu iš padėklo buvo išpjauti 10 um x 2 um dydžio skerspjūviai, kurie po to buvo nuploninti iki skaidrumo elektronams (storis ~30-50 nm).

TEM analizė atlikta FEI Tecnai G20 X-Twin aukštos skiriamosios gebos peršviečiamuoju elektroniniu mikroskopu su CCD kamera (Gatan), EDX spektrometru (Edax) ir skenavimo moduliu bei HAADF detektoriumi STEM darbo režimui. Skiriamoji geba vaizdo režimu -0.14 - 0.28 nm.

Darbo metu ištirta, kad atkaitinimo metu Bi perteklius iš GaArBi susirenka į Bi klasterius, kuriuose išsikristalina metalinio Bi kvantiniai taškai. Išmatuoti EDX žemėlapiai įrodo, kad AlAs sluoksniai efektyviai veikia kaip barjerai ir neleidžia Bi susimaišyti tarp skirtingų kvantinės gardelės sluoksnių. Bi kvantinio taško dydį riboja kvantinės duobės sluoksnio storis (1 pav.). Taip pat buvo padarytos aukštos skiriamosios gebos nuotraukos, kurioms atlikus Fourier transformaciją galutinai patvirtinta, kad Bi sankaupos yra sudarytos iš gryno metalinio Bi.

Peršviediamosios elektroninės mikroskopijos metodu nustatyta GaAsBi/AlAs kvantinių duobių struktūra, įrodytas metalinio Bi kvantinių taškų susidarymas, nustatyta, kad šie kvantiniai taškai sudaryti iš metalinio Bi fazės



1 pav. GaAsBi/AlAs kvantinės duobės STEM HAADF nuotrauka (viršuje) ir atskirų elementų EDX žemėlapiai (apačioje)

Reikšminiai žodžiai: HRTEM, praskiestieji bismidai, kvantiniai taškai

#### Literatūra

[1] Butkutė et al. Nanoscale Research Letters (2017) 12:436

#### Mikrostruktūros įtaka plonų SDC sluoksnių elektrinėms ir optinėms savybėms

#### Influence of microstructure on electrical and optical properties of SDC thin films

Mantas Sriubas, Nursultan Kainbayev, Giedrius Laukaitis

Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Fizikos katedra, Studentu g. 50, LT-1368,

Kaunas

<u>mantas.sriubas@ktu.lt</u>

Mikrostruktūra ir kristalitų dydis daro įtaką nanokristalinių medžiagų savitajam laidžiui ir draustinės juostos pločiui [1-4]. Todėl, buvo nuspręsta suformuoti plonus Sm<sub>0.2</sub>Ce<sub>0.8</sub>O<sub>2-δ</sub> sluoksnius ant 50 °C - 600 °C temperatūros SiO<sub>2</sub> ir Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> padėklų ir įvertinti mikrostruktūros poveikį elektrinėms bei optinėms savybėms. Padėklai prieš garinimą buvo nuplauti ultragarsinėje vonelėje gryname acetone ir pavalyti Ar+ jonų plazma. Priemaišų koncentracija buvo nustatyta EDS metodu. XRD matavimų duomenys apdoroti panaudojant programas "Eva" ir "TOPAS". Draustinės juostos pločio skaičiavimai atlikti pasinaudojus optinio pralaidumo spektrais ir Tauco saryšiu. Elektrocheminio impedanso matavimai atlikti esant 200 °C ÷ 1000 °C temperatūroms ir 10<sup>-1</sup>-10<sup>6</sup> Hz dažniams, oro aplinkoje. Zre ir –Zim priklausomybių nuo  $log(\omega)$  fitinimas buvo atliekamas pasinaudojant lygtimi, kuri aprašo Rg|Qg-R<sub>gr</sub>|Q<sub>gr</sub> grandinę (2 pav.). R<sub>g</sub>|Q<sub>g</sub> grandinės lygtis:

$$Z = \frac{R(1 + RQ\omega^{\alpha}c_{\alpha})}{1 + R^2 Q^2 \omega^{2\alpha} + 2RQ\omega^{\alpha}c_{\alpha}} - i \frac{R^2 Q\omega^{\alpha}s_{\alpha}}{1 + R^2 Q^2 \omega^{2\alpha} + 2RQ\omega^{\alpha}c_{\alpha}},$$
 (1)

čia R – varža, Q – kondensatoriaus talpą atitinkantis dydis,  $\omega$  – ciklinis dažnis,  $c_{\alpha} = cos(\pi \alpha/2)$ , o  $s_{\alpha} = sin(\pi \alpha/2)$ ,  $\alpha$  – koeficientas.

Savitasis laidis  $\sigma$  buvo skaičiuojamas pagal formulę:

$$\sigma = L/A(R_g + R_{gb}), \tag{2}$$

čia  $R_g$  – grūdelių varža,  $R_{gb}$  – grūdelių ribų varža, L – atstumas tarp elektrodų ir A – elektrodų plotas.

1 lentelė. Technologinių parametrų ( $v_g$  – augimo greitis,  $T_s$  – padėklo temperatūra) įtaka kristalitų dydžiui ( $\langle d \rangle$ ), aktyvacijos energijai ( $E_A$ ) ir savitajam laidžiui ( $\sigma$ )

$v_g$ , nm/s	$T_s, \mathbf{K}$	$\langle d \rangle$ ,	$E_A$ , eV	$\sigma$ , S/cm
0,4	50	10,2	0,896	4,40.10-7
	150	10,9	0,970	9,00·10 <sup>-4</sup>
	300	22,4	0,835	$1,50 \cdot 10^{-3}$
	450	39,9	0,895	3,30.10-3
	600	91,8	0,988	7,30.10-3

Eksperimentai parodė, kad draustinės juostos plotis didėja didėjant kristalitų dydžiui (1 pav.), dėl mažėjančios vakansijų koncentracijos didėjant kristalitų dydžiui. Plonų SDC sluoksnių įtrūkimai sąlygoja itin žemą savitąjį laidį (4,40·10<sup>-7</sup> S/cm) (1 lentelė). Be to, didėjant kristalitų dydžiui didėja savitasis laidis. Kristalitų dydžiui esant apie 10,9 nm savitojo laidumo vertė yra 9,00·10<sup>-4</sup> S/cm, o kristalitų dydžiui esant 91,8 nm savitojo laidžio vertė yra 7,3·10<sup>-3</sup> S/cm (1 lentelė). Kristalografinės orientacijos kitimo įtakos nepastebėta.



1 pav.  $(h\nu\alpha)^2$  priklausomybė nuo  $E_g$  fotonų energijos bei draustinės juostos pločio  $(E_g)$  priklausomybė nuo kristalitų dydžio (< d >)



2 pav. Plonų SDC sluoksnių, suformuotų garinant 203,3m<sup>2</sup>/g paviršiaus ploto miltelius bei palaikant 0,4 nm/s augimo greitį a)  $Z_{re}$  ir b)  $-Z_{im}$  priklausomybės nuo  $log(\omega)$ 

Reikšminiai žodžiai: savitasis laidis, draustinės juostos plotis, kristalitų dydis.

- [1] Amano, F., ir kt., J Phys Chem C, 120(12), 2016.
- [2] Bharti, B., ir kt., Sci Rep, 6, 2016.
- [3] Gobel, M.C. ir kt., Phys Chem Chem Phys, 13(23), 2011.
- [4] Chiang, Y.M., ir kt., App Phys Lett., 69(2), 1996.

#### GaInAsBi sluoksnių, užaugintų ant InP padėklų, tyrimai ir taikymai

#### Investigation and applications of GaInAsBi layers grown on InP substrates

Sandra Stanionytė, Vaidas Pačebutas, Bronislovas Čechavičius, Virginijus Bukauskas, Andrejus Geižutis,

Arūnas Krotkus

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

sandra.stanionyte@ftmc.lt

Bismidų junginiais domimasi jau daugiau nei dešimtmeti. Net ir nedidelio bismuto kiekio ivedimas i III-V grupės junginius žymiai sumažina draustinių energijų juostos tarpą ( $E_g$ ), be to, tokių junginių  $E_g$  tampa mažiau jautrus temperatūrai. GaAsBi/GaAs sistemų pritaikymas apsiriboja infraraudonųjų spindulių (IR) trumpesnių nei 1,3 µm bangų ruožu, nes didėjant Bi kiekiui sluoksniuose, prastėja jų kristalinė kokybė, o dėl Bi polinkio segreguoti, sluoksnio paviršius pasidengia metalo lašais. Todėl norint plėtoti optoelektronikos prietaisų veiką tolimesniame IR bangų ruože, Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Bi<sub>y</sub> junginiai yra perspektyvesni. Juos užauginus ant GaAs padėklų taikymo ruožą galima praplėsti iki 1,7-1,8 µm, o žvelgiant dar toliau ir auginant ant InP padėklo, Ga1-xInxAs1-vBiv junginiai gali būti alternatyva plačiai praktikoje naudojamoms suderintų gardelių In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As/InP sistemoms. Šios sistemos aprėpia telekomunikacijų bei vidurinio IR ruožo (iki ~1,7 µm), kuriame veikia optoelektronikos prietaisai, sritį. Auginant suderintų gardelių Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Bi<sub>y</sub> sluoksnio ir InP padėklo sistemą, galima veiklos sritį prasiplėsti net iki ~6 µm [1]. Tokie sluoksniai taip pat gali būti naudojami kaip sugerikliai pBp fotodioduose, nes bismutas  $E_{g}$  mažina labiau paveikdamas valentinę juostą.

Keturnariai bismidiniai junginiai dar nėra plačiai ištirti, jų auginimo technologija nėra gerai išvystyta, todėl šio darbo tikslas buvo molekulinių pluoštų epitaksijos metodu (MBE) užauginti ir ištirti  $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}Bi_y$  sluoksnius ant InP padėklų. Buvo siekiama užauginti kokybiškos kristalinės sandaros sluoksnius, kurie galėtų būti panaudoti optoelektronikos prietaisuose, veikiančiuose vidurinių IR bangų ruožo srityje.

 $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}Bi_y$  sluoksniai buvo auginami ant pusiau izoliuojančio InP (100) padėklo. Elementinė sudėtis, kristalinė sandara, morfologija ir optinės savybės buvo tiriamos atliekant XRD, AFM, fotoliuminescencijos ir pralaidumo spektrų matavimus.

Padėklo paviršiui išlyginti buvo auginamas suderintas su padėklo gardelės parametru Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As buferinis sluoksnis, o ant jo keturnario \_ Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-v</sub>Bi<sub>v</sub> sluoksnis. Kadangi Bi ivedimas i sluoksnį deformuoja gardelę (V grupės mazguose), tai susidariusius įtempimus buvo bandoma pašalinti į buferinį sluoksnį įterpiant didesnį indžio kiekį Ga<sub>0,43</sub>In<sub>0,57</sub>As, t. y. priartinant gardelės parametrą prie Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Bi<sub>y</sub> sluoksnio parametro. Iš AFM matavimų rezultatų žymios sluoksnio paviršiaus kokybės pokyčių nuo buferio sudėties ir storio neįžvelgta, todėl toliau koncentravomės į  $E_g$  sumažinimą.

Ga1-xInxAs1-vBiv sluoksniai su skirtingais In/Ga srautu santykiais buvo auginami ant Ga<sub>1-v</sub>In<sub>v</sub>As buferio, kurio gardelės parametras sutampa su InP. Bi/Ga srautų santykiai buvo keisti nuo 0,13 iki 0,35 (iki 5% Bi sluoksnyje). Iš XRD matavimų rezultatų matoma (žr. 1 pav.), kad keliant Bi/Ga srautų santykį (In/Ga srautų santykį laikant pastoviu), Ga1-xInxAs1-yBiy smailė slenkasi link mažesnių kampų. Taip yra todėl, kad didinant Bi/Ga srautų santykį, daugiau bismuto įsiterpia į gardelę ir ją deformuoja. Šie rezultatai koreliuoja su fotoliuminescencijos matavimų rezultatais, kuriuose didesnis Bi/Ga srautų santykis fotoliuminescencijos smailę pastumia į mažesnes energijas. Atlikti fotoluminescencijos matavimai parodė, kad užaugintų Ga1-xInxAs1-vBiv sluoksnių smailė pasistūmėjo net iki 0,52 eV (~2,4 µm).



1 pav. Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Bi<sub>y</sub> sluoksnių, augintų naudojant skirtingus Bi/Ga srautus, (004) smailės ω-2θ skenavimai

Aukščiau minėtiems sluoksniams parinktos technologinės auginimo sąlygos buvo panaudotos auginant Be legiruotus  $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}Bi_y$  sluoksnius ir pBp fotodiodus ant p tipo InP (100) padėklų. Fotodiodai buvo jautrūs iki 1,8 µm.

Apibendrinant galima teigti, kad MBE metodu buvo sėkmingai užauginti keturnariai  $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}Bi_y$ sluoksniai ant InP padėklų. Ištirtos jų optinės ir struktūrinės savybės bei pademonstruotas pBp fotodiodas su InGaAsBi aktyviąja sritimi leidžia teigti, kad tokie sluoksniai gali būti panaudoti optoelektronikos prietaisų gamyboje ir išplėsti jų funkcines savybes.

*Reikšminiai žodžiai: III-V grupės puslaidininkiai, bismidai, optoelektronikos prietaisai.* 

#### Literatūra

[1] J. P. Petropoulos et al. Applied Physics Letters 99 031110 (2011).

#### Ilgašvyčio fosforo Zn<sub>3</sub>Ga<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>O<sub>10</sub>:0,5%Cr<sup>3+</sup> emisijos spartos priklausomybė nuo temperatūros

#### Dependence of persistent Zn<sub>3</sub>Ga<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>O<sub>10</sub>:0,5%Cr<sup>3+</sup> phosphor emission rate on temperature

Jonas Gradauskas<sup>1,2</sup>, Jolanta Stupakova<sup>2,3</sup>, Algirdas Sužiedėlis<sup>1,2</sup>, Erika Jočytė<sup>2</sup>, Artūras Jukna<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT- 10257 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius

<sup>3</sup>Vilniaus technologijų ir dizaino kolegija, Antakalnio g. 54, LT-10303 Vilnius

jonas.gradauskas@ftmc.lt

Pasauliui susirūpinus dėl nuolat senkančių iškastinio kuro atsargų ir sparčios klimato kaitos, imtasi labai panaudojimo plačiai domėtis saulės energijos galimybėmis. Saulės modulių sistemos tampa vis paklausesnės energijos gamyboje tiek gyvenamųjų namų, tiek ūkio, tiek pramonės sektoriuose. Tačiau toks atsinaujinančios energijos panaudojimas, pasitelkus saulės elementus, negali visapusiškai užtikrinti energijos gamybos tamsiuoju paros metu. Generuotą saulės šviesos energiją būtina akumuliuoti, o tai reikalauja itin didelių investicijų. Ši problema skatina ieškoti kitų galimybių efektyviai išnaudoti gaunamą saulės šviesą. Vienas iš tokių būdų – ilgašvyčių fosforų sugebėjimas skleisti šviesa nesant apšvietimo duotu laiko momentu. Ilgašvyčiai fosforai, pasižymintys rekombinacine liuminescencija, gali švytėti tam tikrą laiką net nutraukus sužadinimo šaltini. Paprastai fosforų švytėjimo trukmės trumpėja, keliant jų temperatūrą. Šiame darbe pateikiamas ilgašvyčio fosforo Zn<sub>3</sub>Ga<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>O<sub>10</sub>:0,5%Cr<sup>3+</sup> fotoliuminescenciniu charakteristikų tyrimas mažinant jo temperatūrą. Medžiagos pasirinkimą lėmė jos populiarumas bei emituojamos šviesos bangos ilgis [1].

Buvo tiriamos fosforo emisijos charakteringosios laiko pastoviosios, jį apšviečiant 466 nm bangos ilgio spinduliuote skirtingomis laiko trukmėmis bei esant skirtingai aplinkos temperatūrai. Tiriamojo bandinio sužadinimo trukmės: 1 min, 5 min, 10 min ir 20 min. Pastebėta, kad fosforo emisijos intensyvumo gesimą laike galima aprašyti dviem laiko pastoviosiomis [2]:

$$I(t) = I_0 + A_1 e^{-t/\tau_1} + A_2 e^{-t/\tau_2}$$
(1)

čia  $I_0$  – galutinė intensyvumo vertė,  $A_{1,2}$  – pradinės spinduliavimo intensyvumo pastoviosios, t – laikas,  $\tau_1$  – pirminė, greitoji emisijos gesimo laiko pastovioji (trukmė),  $\tau_2$  –lėtoji emisijos gesimo laiko pastovioji (trukmė).

Apšvitinus tiriamąjį Zn<sub>3</sub>Ga<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>O<sub>10</sub>:0,5% Cr<sup>3+</sup> fosforo bandinį 466 nm bangos ilgio spinduliuote, jo emisijos gesimo laike pobūdžiui turi įtakos fosforo temperatūra. Tai matomai susiję su gardelės fononais bei krūvio mobilumo priklausomybe nuo temperatūros. Tiek  $\tau_1$ , tiek ir  $\tau_2$  vertės didėja žemėjant fosforo temperatūrai. Ši priklausomybė pavaizduota 1 pav. Matyti, kad greitojo gesimo trukmės  $\tau_1$  vertės labiau priklauso nuo temperatūros - jos padidėjo ~1,5 - 2 kartus bandinį atšaldžius nuo 20 °C iki -117 °C temperatūros. Tuo tarpu lėtojo gesimo trukmės  $\tau_2$  tame pačiame temperatūrų intervale kito silpniau,  $\sim 1, 1 - 1, 4$  kartus.

Apšvitos trukmė taip pat įtakoja būdingųjų gesimo laiko trukmių vertes: kuo ilgesnė buvo apšvita, tuo  $\tau_1$  ir  $\tau_2$  vertės didesnės, t.y. tuo lėčiau fosforas emituoja sukauptą energiją. Ši tendencija išlieka nepakitusi, kintant fosforo temperatūrai.

Reiktų taipogi paminėti, jog po atšaldymo  $Zn_3Ga_2Ge_2O_{10}:0,5\% Cr^{3+}$  fosforą atšildžius iki kambario temperatūros, abi būdingosios gesimo trukmės pakito. Jos tapo šiek tiek mažesnėmis, lyginant su gautomis -117°C temperatūroje, tačiau visgi išliko ilgesnės negu buvo iki šaldymo (22 °C).

Taigi, žeminant  $Zn_3Ga_2Ge_2O_{10}:0,5\% Cr^{3+}$  fosforo temperatūrą, galima sulėtinti jo emisijos spartą ir tokiu būdu ilgesnį laiką išlaikyti jo akumuliuotą šviesos energiją.



1 pav. Būdingųjų emisijos gesimo trukmių τ<sub>1</sub> ir τ<sub>2</sub> priklausomybės nuo temperatūros esant skirtingoms apšvitos trukmėms

Reikšminiai žodžiai: ilgašvytis fosforas, emisijos trukmė, laiko pastovioji

- [1] Z. Y. Lu, F. Liu, Nature Materials, 11, 58 (2012).
- [2] P. K. Bhushan, S. Tamboli, N. S. Dhoble, A. K. Sinha, M. N. Singh, S. J. Dhoble, H.C. Swart, Mater. Chem. Phys. 187, 233 (2017).

#### Universitetai ir jų vertinimo kriterijai

#### Universities and their evaluation criteria

Ferdinandas Vaitiekūnas Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT- 10222 Vilnius <u>ferdinandasv@gmail.com</u>

Lietuvoje 1922 m. steigiant universitetą suprasta, kad aukštųjų studijų pagrindą sudaro profesūros mokslinis lygis. Todėl gabūs jaunuoliai buvo siunčiami į Vakarų universitetus gauti mokslinius laipsnius. Taip sudarytas mokslinis potencialas leido 1940 m. gaivinti atgauto Vilniaus universiteto humanitarinius fakultetus.

1951 m. Kauno Vytauto Didžiojo universiteto technikos ir medicinos fakultetų bazėje buvo įsteigti KPI ir Kauno Medicinos institutas. Vilniaus universitete paliktas medicinos fakultetas.

1958 m. Vilniaus universiteto rektoriumi paskyrė mokslininką matematiką hab. m. dr. J. Kubilių. Pradėta universiteto atgaivinimo programa. Pirmiausiai iškeltas universitete skaitomų paskaitų mokslinis lygis. Jį gali suteikti tiktai mokslininkai su atestuota kompetencija apginta disertacija. Rektorius teigė, kad mokslo pasiekimų lygį studentams išdėstyti gali tiktai mokslininkai. Todėl pedagogai, aktyviai nedirbantys mokslinio darbo, nebuvo peratestuojami.

Antrą programos dalį sudarė svarbiausiose mokslo srityse, kurios gali sietis su studijų programomis, savų mokslininkų ugdymas. Į žymiausių mokslo centrų aspirantūras buvo siunčiamos 3-4 gabiausių studentų grupelės. Taip universitete atsirado puslaidininkių fizika, kvantinė elektronika, kardio chirurgija, biochemija. Įsteigė tikimybių teorijos aspirantūrą. Buvo rengiamos habilitacinės disertacijos. Jaunų mokslininkų grupėms universitete sudarytos sąlygos intensyviam moksliniam darbui.

Trečia programos dalis - skatinti mokslinio darbo plėtrą visuose fakultetuose. Apie 1965 m. pagal sutartis su aukštųjų technologijų firmomis pradėti moksliniai disertacinio lygio darbai. Tam universitete buvo įsteigtas Mokslinių tyrimų sektorius. Jis vykdė sutarčių registraciją, buhalterinę apskaitą. Pradėjo formuotis nedideli etatinių mokslo darbuotojų kolektyvai, kurie apie 1976 m. buvo įvardinti kaip mokslinės laboratorijos su savais moksliniais vadovais, profesoriais, docentais.

Tokia sistema stiprino mokslo padalinių materialinę bazę, buvo mokami papildomi 0,5 etato atlyginimai, fizikos, chemijos, medicinos, gamtos mokslų fakultetuose įdarbinami vyresnių kursų studentai. Pagal mokslinių laboratorijų tematiką ir universiteto reikalavimus buvo rengiamos daktarų ir habilituotų daktarų disertacijos. Tokiuose etatuose pastoviam moksliniam darbui įdarbinta apie 600 žmonių. Jie dalyvaudavo ir akademinėje veikloje.

Ketvirtą programos dalį sudarė visuose padaliniuose kas antrą savaitę vykstantys moksliniai seminarai. Juose nagrinėtos mokslinės problemos, aptariami publikavimui teikiami straipsniai, iš kitų universitetų gautos disertacijos gynimui. Toks priemonių kompleksas kėlė visų darbuotojų mokslinį lygį.

Universiteto humanitariniuose, socialiniuose fakultetuose, mokslo darbas skiriasi. Ekonomistai privalėtų gerai išmanyti mikro ir makro ekonomikos, finansų, bankininkystės mokslo pasiekimus ir mokėti matematiškai modeliuoti aktualias problemas.

Technikos ir technologijos universitetų vertinimo kriterijus sudaro jo mokslinių tyrimų lygis, gautų rezultatų sąryšis su pasiekimų įdiegimu į aukštąsias technologijas, gaminamą produkciją. KPI yra praėjęs įvairius brendimo etapus. Verta paminėti radioelektronikos mokslų mokyklą su sudėtingos matavimo aparatūros pramonine gamyba. Reikšmingi vibrotechnikos laboratorijos darbai, virš 1000 patentų.

Aukštųjų studijų dalykinė reforma turi turėti aiškius kriterijus. Sudarant reformos dėlionę akivaizdu, kad Vilniuje turi būti klasikinis ir technikos universitetai. Vilniaus universitete įvairiose specialybėse yra pedagoginiai profiliai. Edukologijos universiteto įsijungimas į Vilniaus universitetą būtų natūralus.

Kaune reikia vieno plataus profilio universiteto su moksline ir technologine kryptimis. KTU lygis yra aukštas. Būtina prie jo jungti Vytauto Didžiojo universitetą ir Žemės ūkio universitetą. KTU būtina grąžinti jam priklausantį Vytauto Didžiojo vardą.

Sveikatos universitetas yra mokslinė aukštoji mokykla. Pagal veiklos profilį jam tiktų sporto universitetas, kartu plėtotų mokslą.

Klaipėdoje reikalingas universitetas su jūros, uosto, laivų statybos mokslo profiliais. Būtina medicinos programa, kad išliktų universitetinė ligoninė.

Šiaulių universitetas specifinis. Pradinukams reikalingi geri mokytojai. Jį reikia jungti prie edukologijos studijų Vilniaus universitete.

Universiteto įvertinimo kriterijus yra mokslinio lygio bazė, pedagoginio personalo mokslinė kvalifikacija, atliekamų mokslinių darbų svarba ir lygis, šaliai reikalingų aukštos kvalifikacijos specialistų rengimas.

#### Vėžinių inksto sričių nustatymas paviršiaus sustiprintos Ramano sklaidos metodu

#### Detection of cancerous kidney tissue areas by means of SERS spectroscopy

<u>Martynas Velička</u><sup>1</sup>, Milda Pučetaitė<sup>1</sup>, Justinas Čeponkus<sup>1</sup>, Sonata Adomavičiūtė<sup>1</sup>, Vidita Urbonienė<sup>1</sup>, Feliksas Jankevičius<sup>2,3</sup>, Valdas Šablinskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Bendrosios fizikos ir spektroskopijos katedra, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Medicinos Fakultetas, Gastroenterologijos, nefrourologijos ir chirurgijos klinika,

Santariškių g. 2, LT-08661 Vilnius,

<sup>3</sup>Nacionalinis vėžio institutas, Santariškių g. 1, LT-08660 Vilnius martynas.velicka@ff.vu.lt

Susirgimų inkstų vėžiu skaičius Lietuvoje yra vienas didžiausių lyginant su kitomis Europos valstybėmis [1]. Kol inkstų audinio vėžys dar nėra išplitęs (jo skersmuo mažesnis nei 7 cm), jį galima pašalinti rezekcijos operacijos metu taip išsaugant sveiką inksto dalį. Šios operacijos sėkmingumą nulemia tikslus vėžinių ir sveikų inkstų audinių sričių nustatymas. Šiomis dienomis klinikinėje praktikoje šiam tikslui yra taikomi histologiniai tyrimai, tačiau greitas ir tikslus vėžinio inkstų audinio nustatymas vis dar yra viena iš klinikinių problemų.

Vėžinėms ląstelėms yra būdinga sparti proliferacija (augimas ir dauginimasis), todėl jų metabolizmui reikia daugiau energijos bei spartesnio maisto medžiagų tiekimo. Dėl šios priežasties pastarųjų metabolizmas skiriasi nuo sveikų ląstelių metabolizmo. Esant anaerobinėms sąlygoms (deguonies stygiui) vėžinės ląstelės energiją pradeda gaminti fermentacijos būdu (*Warburg* efektas [2]). Taip pat nustatyta vėžinių ląstelių priklausomybė nuo tam tikrų amino rūgščių [3].

Pakitęs ląstelių metabolizmas yra tiesiogiai susijęs su tarpląstelinio skysčio sandara. Kadangi tarpląstelinis skystis yra terpė supanti visas ląsteles, jo sudėtis keičiasi pakitus ir ląstelės mitybai. Dėl šios priežasties tarpląstelinio skysčio, supančio sveikas ir vėžines ląsteles, sudėtis yra nevienoda. Nustačius cheminės sudėties pokyčius turėtų būti galima atskirti sveikus ir vėžinius inkstų audinius.

Molekulinę bandinio sudėtį galima nesunkiai nustatyti naudojant virpesinės spektrometrijos metodikas kaip IR sugertis ar Ramano sklaida. Ankstesniuose tyrimuose buvo irodyta, kad FTIR-ATR metodika gali padėti atpažinti vėžinius ir sveikus inkstų audinius nagrinėjant tarpląstelinio skysčio ir inkstų audinio ląstelių cheminę sandarą [4]. Tačiau norint tiksliai išsiaiškinti stebimų pokyčių priežastis reikalingi papildomi tyrimai. Ramano sklaida suteikia papildomos informacijos, tačiau plonų sluoksnių tyrimams šis metodas nėra efektyvus dėl mažos molekuliu koncentracijos. Vis dėlto, mažų koncentracijų molekulių spektrus galima užregistruoti nestandartine spektroskopine metodika – paviršiaus sustiprinta Ramano sklaida (angl. SERS).

Šiame darbe paviršiaus sustiprinta Ramano sklaida buvo pritaikyta inkstų audinio tarpląstelinio skysčio, su pavienėmis inksto audinio ląstelėmis, bandinių tyrimams. Koloidinis sidabro nanodalelių tirpalas buvo naudojamas *SERS* efektui pasiekti. Spektrai buvo registruoti Ramano sklaidos spektrometru Bruker MultiRAM naudojant 1064 nm bangos ilgio žadinančią lazerio spinduliuotę.

Bandiniai (tepinėliai) buvo ruošiami ant kalcio fluorido langelio prie jo pincetu prispaudžiant ir atitraukiant išoperuotą inkstų audinio mėginį. Taip buvo suformuojamas tarpląstelinio skysčio sluoksnis, su pavienėmis inksto audinio ląstelėmis. Sidabro nanodalelių tirpalo lašas (30 µL) buvo išdžiovinamas ant paruošto tepinėlio prieš registruojant SERS spektrus.

Atlikus užregistruotų spektrų analizę buvo identifikuoti pagrindiniai vėžinių ir sveikų inkstų audinių tepinėlių cheminės sudėties pokyčiai. Nustatyta, kad *SERS* metodika gali būti naudojama tiksliam vėžinių audinių atpažinimui.



1 pav. Vėžinio ir sveiko inkstų audinių tarpląstelinio skysčio SERS spektrai.

Reikšminiai žodžiai: SERS, inkstų vėžys, tarpląstelinis skystis.

- [1] J. Ferlay et al., Eur J Cancer, 49, 1374-403, (2013).
- [2] Otto Warburg, Science, 123, 309-3014, (1956).
- [3] Tang X, et al., Cancer Res. 76, 1892-1903, (2016).
- [4] V. Urboniene, et al., J. Biomed. Opt., 19, 1-6, (2014).

# Augalų transmembraninių šviesą sugeriančių baltyminių kompleksų tyrimai dirbtinėje ir į natūralią panašioje aplinkoje pasitelkiant pavienių molekulių fluorescencijos mikroskopiją

# Studies of plant transmembrane light-harvesting protein complexes in artificial and natural-like environment using single molecule fluorescence microscopy

Marijonas Tutkus<sup>1</sup>, Danielis Rutkauskas<sup>1</sup>, Jevgenij Chmeliov<sup>1</sup>, Petra Ungerer<sup>3</sup>, Parveen Akhar<sup>4</sup>, <u>Oskaras Venckus<sup>1,2</sup></u>, Petar Lambrev<sup>4</sup>, Alexander Ruban<sup>3</sup>, Francesco Saccon<sup>3</sup>, Gediminas Trinkūnas<sup>1</sup>, Leonas Valkūnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius, Lietuva
 <sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Biomokslų institutas, Saulėtekio al. 7, 10257 Vilnius, Lietuva
 <sup>3</sup>School of Biological and Chemical Sciences, Queen Mary University of London, Mile End Road, London E1 4NS, UK
 <sup>4</sup>Hungarian Academy of Sciences, Biological Research Centre, Institute of Plant Biology, Temesvári krt. 62, 6726

Szeged, Hungary marijonas.tutkus@ftmc.lt

Pirmieji primityvūs šviesą surenkantys baltyminiai kompleksai atsirado prieš daugiau nei du milijardus metų. Nuo to laiko fotosintetinantys organizmai išvystė labai įvairių būdų, kaip surinktą šviesą išsaugoti organinėse molekulėse ryšių pavidalu. Natūralios šviesą surenkančios sistemos labai efektyvios – optimaliomis sąlygomis sintezei panaudojama virš 90 % sugertų fotonų. Tačiau esant intensyviam apšvietimui, įsijungia apsauginiai mechanizmai, gesinantys žalingos perteklinės energijos saugojimą ir perdavimą [1].

Augaluose gausiausias ir daugiausiai tyrinėjamas baltymų-pigmentų kompleksas – LHCII. Jo sudėtyje esantys chlorofilai *a* ir *b* atsakingi už efektyvią šviesos sugertį, o karotenoidų sudėtis daro įtaką nefotocheminiam gesinimui, tačiau tikslūs valdymo mechanizmai vis dar nežinomi [2].

LHCII tyrimams pasitelkiame inovatyvią, šioje srityje dar mažai taikytą TIRF mikroskopiją [3], pagrįstą visiškojo vidaus atspindžio kuriamu itin siauru, eksponentiškai gęstančiu, *evanescuojančiu* lauku, kuris leidžia optiškai žadinti išskirtinai tik imobilizuotus molekulinius darinius. (pav. 1A).





B) LHCII intensyvumo priklausomybė nuo laiko esant
 635 nm žadinimui.

C) Reprezentatyvus vienos molekulės intensyvumo signalas ir jo laiptuota idealizacija.



2 pav. Eksperimento schemoje pavaizduotos į įvairaus skersmens imobilizuotas liposomas įterpti LHCII ir fluorescentiškai žymėti lipidai. Baltymo-pigmento kompleksų kiekybinės fluorescencijos tyrimas dažo molekulių atžvilgiu, rodo, kad daugiau LHCII turi smulkesnės liposomos.

LHCII fluorescenciją tiriame dviejose aplinkose: dirbtinėje - tilakoidų membranos suardomos, o išlaisvinti pavieniai kompleksai ištirpinami detergento micelėse, ir į natūralią panašioje - iš tilakoidų fosfolipidų suformuojamos liposomos su iterptais LHCII. Pavieniu kompleksų, išskirtų iš mutantinių augalų, tyrimai reikalingi norint susieti karotenoidų įtaką nefotocheminio gesinimo procesams. O liposomose iterpto LHCII tyrimai leidžia nagrinėti ryšį tarp fluorescencijos intensyvumo signalų ir liposomų skersmens. LHCII jautrumas membranos kreivumui gali veikti kaip mechanizmas padedantis nuo antrosios fotosistemos (PSII) atsiplaidavusiems LHCII sueiti į kreivają tilakoidų dalį ir lokaliai padidinti jų koncetraciją.

*Reikšminiai žodžiai: LHCII, TIRFM, fluorescencija, mikroskopija, liposomos.* 

- T. Mirkovic, E. E. Ostroumov, J. M. Anna, R. van Grondelle, Govindjee and G. D. Scholes, Chem. Rev. 117, 249–293 (2017).
- [2] M. Fuciman, M. M. Enriquez, T. Polívka, L. Dall'Osto, R. Bassi and H. A. Frank, J. Phys. Chem. B, **116**, 3834–3849 (2012).
- [3] A. A. Deniz, S. Mukhopadhyay and E. A. Lemke, J. R. Soc. Interface. 5, 15–45 (2008).

# NaGdF<sub>4</sub>: Yb<sup>3+</sup>, Er<sup>3+</sup> nanodalelių sužadintų būsenų trukmės priklausomybės nuo branduolio dydžio ir apvalkalo storio tyrimai

# Investigations of NaGdF<sub>4</sub>: Yb<sup>3+</sup>, Er<sup>3+</sup> nanoparticles excited state lifetimes dependence on particles core size and shell thickness

<u>Aivaras Vilkas</u><sup>1</sup>, Dovile Baziulyte-Paulaviciene<sup>2</sup>, Simas Sakirzanovas<sup>2</sup>, Vitalijus Karabanovas<sup>1,3</sup>, Ricardas Rotomskis<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>Biomedicininės Fizikos Laboratorija, Nacionalinis Vėžio Institutas, Baublio 3b, LT-08406, Vilnius, Lietuva
<sup>2</sup>Vilniaus Universitetas, Chemijos ir Geomokslų Fakultetas, Naugarduko 24, LT-03225, Vilnius, Lietuva

<sup>3</sup>Chemijos ir Bioinžinerijos Katedra, Vilniaus Gedimino Technikos Universitetas, LT-10223 Vilnius, Lietuva

<sup>4</sup>Lazerinių Tyrimo Centro Biofotonikos Grupė, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222, Vilnius, Lietuva

#### aivaras.vilkas@ff.stud.vu.lt

Apkonvertuojančios nanodalelės (angl. upconverting nanoparticles) gali tapti puikia alternatyva kitiems iprastai naudojamiems fluoroforams. Dauguma fluoroforų pasižymi emisija su Stokso poslinkiu žadinimui naudojant ultravioletinės, mėlynos ir žalios spektro sričių spinduliuotę. Žadinant šioje spektro srityje iškyla tam tikrų problemų. Minėtosios spektro dalies spinduliuotė pasižymi prasta skvarba biologiniuose audiniuose, taip pat ilgai trunkantis ultravioletinės ir kitos trumpabangės šviesos poveikis gali pažeisti biologinius audinius. Apkonvertuojančių nanodalelių žadinimui yra naudojama artimojo infraraudonojo spektro spinduliuotė ( $\lambda_{zad} = 980$  nm), kuri pakliūna į "optinio skaidrumo langą". Žadinant šia spinduliuote gaunamas pakopinis žadinimo procesas, ko rezultatas vra emisija UV, regimojoje ir artimosios infraraudonosios spinduliuotės spektru sritvse. Žadinimui artimoii naudoiama infraraudonoii spinduliuotė taip pat yra skvarbesnė biologiniuose audiniuose ir nedaro jiems žalos [1]. Vienas iš būdų pagerinti šių nanodalelių emisijos intensyvumus yra padengti nanodaleles inertiniu apvalkalu. Šio darbo tikslas buvo: ištirti apkonvertuojančių nanodalelių emisijos intensyvumo ir sužadintų būsenų relaksacijos trukmių priklausomybę nuo nanodalelių dydžio ir jas dengiančio inertinio apvalkalo storio.

Darbo metu buvo tiriamos heksagoninės NaGdF<sub>4</sub>:  $Yb^{3+}$ ,  $Er^{3+}$ apkonvertuojančios nanodalelės tirpios toluene. turinčios NaGdF<sub>4</sub> inertini apvalkala. Nanodaleliu liuminescencijos emisijos spektras matuotas naudojant Edinburgh Instruments FLS980 spektrometra. Žadinant 980 nm IR lazeriu pastebėta, kad nanodalelių emisijos spektras pasižymi emisijos smailėmis ties: 379, 407, 520, 540, 647, 710, 842 nm. Šios smailės buvo priskirtos atitinkamiems Er<sup>3+</sup> kaip energetiniams šuoliams. Ištyrėme, kinta nanodaleliu emisijos intensyvumai ir sužadintos gyvavimo trukmės apkonvertuoiančiu būsenos nanodalelių 6 ir 12 nm dydžio branduolius padengiant skirtingo dydžio inertiniu apvalkalu. Rezultatai parodė, kad tiek emisijos intensyvumai, tiek sužadintos būsenos didėja didėjant nanodalelių gyvavimo trukmės apvalkalo storiui. To priežastis gali būti energijos migracija, kurios metu energija laisvai judėdama nanodalelėje gali pasiekti jos kraštą, kur yra paviršiaus defektų sritys, kurias pasiekus energija prarandama. Didinant nanodalelių branduolio dydį ir didinant jas dengiančio apvalkalo storį, šių defektų įtaka mažėja, kas lemia emisijos intensyvumo ir sužadintos būsenos gyvavimo trukmių padidėjimą.

Rezultatai parodė, kad sužadintos būsenos gyvavimo trukmės ir emisijos intensyvumai gali būti padidinti padengiant nanodaleles inertiniu apvalkalu.



1 pav. NaGdF<sub>4</sub>: Yb<sup>3+</sup>, Er<sup>3+</sup> 12 nm dydžio dalelių su skirtingais inertinio apvalkalo storiais gesimo kinetikos esant emisijai ties 407 nm. Apvalkalo storiai: 1, 3, 5 nm.

Reikšminiai žodžiai: sužadintos būsenos gyvavimo trukmės, emisijos spektras, gesimo kinetikos, nanodalelės, apkonvertuojančios nanodalelės, inertinis apvalkalas.

<sup>[1]</sup> Guanying Chen, Hailong Qiu, Paras N. Prasad and Xiaoyuan Chen "Upconversion Nanoparticles: Design, Nanochemistry, and Applications in Theranostics", *Chemical reviews*, Vol. 114 (10), pp 5161–5214, 2014.

#### Fotoelektrovara Si p-n sandūroje apšviestoje lazerio spinduliuote

#### Photovoltage across Si p-n junction exposed to laser radiation

S. Ašmontas<sup>1</sup>, Jonas Gradauskas<sup>1</sup>, Algirdas Sužiedėlis<sup>1</sup>, O. Žalys<sup>1</sup>, Aldis Šilėnas<sup>1</sup>, Edmundas Širmulis<sup>1</sup>, Vitas Švedas<sup>1</sup>,

Viktoras Vaičikauskas<sup>1</sup>, Vytautas Vaičiūnas<sup>1</sup>, Vitaliy Kostylyov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

ovidijus.zalys@gmail.com

Electric energy generated by solar cells (SC) is most promising and environmentally friendly energy source. At the present time about 80% of worldwide SC are made from silicon. The efficiency of a single junction silicon solar cell produced in a scientific laboratory reaches 25,6% and is close to the theoretical limit of 33,3% [1]. Solar cell efficiency is limited by the efficient use only of photons having energy close to the forbidden energy gap. Photons with higher energies create electron-hole pairs, and the excess energy is transmitted to carriers, they become hot carriers. In an ideal single junction solar cell about 55% of incident solar radiation is lost due to the thermalization of hot carriers with lattice [2]. Ross and Nozik proposed the idea of hot carrier solar energy convertors in which photoexcited carriers could be extracted over a narrow range of energies at a rate faster than they lose the energy to the lattice [3]. Theoretical efficiency of such devices can be sufficiently high, up to 66%. Nevertheless, hot carriers must be taken into account during the study of photovoltage formation across a p-n junction under the sunlight illumination.

In this communication we present the results of experimental investigation of hot carriers' influence on the photoresponse formation across Si p-n junction illuminated by laser radiation of different wavelength.

The investigated p-n junction was produced by chemical vapor deposition of epitaxial p-type Si layer on n-type Si substrate. Electron density was  $7 \times 10^{15}$  cm<sup>-3</sup>, and hole density was  $5 \times 10^{16}$  cm<sup>-3</sup>.

Temporal analysis of the photovoltage U across the p-n junction induced by 25 ns-long 1489 nm pulsed laser radiation showed that it consists of two components:

$$U = U_f + U_{ph}.$$
 (1)

Here  $U_f$  is the fast component with polarity corresponding to that of thermoelectromotive force of hot carriers [4], and  $U_{ph}$  is the slow component of opposite polarity;  $U_{ph}$  is caused by electron-hole pair generation. Investigations revealed that  $U_{ph}$  increases with the intensity of laser radiation following the square law. This fact indicates that electron-hole pair generation is determined by the two-photon absorption since the single laser photon energy is lower than the forbidden energy gap of silicon.

The dependencies  $U_f$  and  $U_{ph}$  on laser radiation wavelength are depicted in Fig. 1. It is seen that  $U_{ph}$ decreases with the wavelength increase, and at  $\lambda > 2500$  nm the slow component of the photovoltage vanishes. Such behavior is associated with the diminution of two-photon absorption coefficient with wavelength [5]. At  $\lambda > 2500$  nm the energy of two photons is lower than the forbidden energy gap of Si, and no generation of electron-hole pairs is observed.

The hot carrier thermoelectromotive force  $U_f$  also drops down when  $\lambda$  increases from 1489 nm to 1900 nm. However, at longer laser wavelengths,  $\lambda > 1900$  nm, in contrast to  $U_{ph}$ ,  $U_f$  does not tend to zero but even slightly increases. In this spectral range the hot carrier thermoelectromotive force is determined by the free electron and free hole absorption of the radiation.

As a result, the carrier heating reduces the efficiency of a solar cell as far as the polarity of the thermoelectromotive force of hot carriers is opposite to that of the classical photovoltage.



Fig.1. Spectral dependence of the hot carrier thermoelectromotive force  $U_f$  and the electron-hole pair generation-caused  $U_{ph}$  under laser illumination

Keywords: silicon, laser radiation, p-n junction, solar cell, hot carriers

#### References

- [1] A. Polman, M. Knight, E.C. Garnett, B. Ehler, W.C. Sinke, Science 352, aad4424 (2016).
- [2] L.C. Hirst, N.J. Ekins-Daukes, Prog. Photovolt: Res. Appl. 19, 286 (2011).
- [3] R.T. Ross, A.J. Nozik, J. Appl. Phys. 53, 3813 (1982).
- [4] J. Gradauskas, E. Širmulis, S. Ašmontas, A. Sužiedėlis, Z. Dashevsky, V. Kasiyan, Acta Phys. Pol. A 119, 273 (2011).
- [5] A.D. Bristow, N. Rotenberg, H.M van Driel, Appl. Phys. Lett. 90, 191104 (2007).

#### Augmenijos įtakos radijo bangų sklidimui modeliavimas naudojant optinio spektro palydovinius duomenis

#### Modeling of radio wave propagation through vegetation using satellite-based optical band data

Rimvydas Aleksiejūnas, Gediminas Žukauskas, Vytautas Jonkus, Kęstutis Svirskas, Albert Cesiul Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius rimvydas.aleksiejunas@ff.vu.lt

Radijo bangų sklidimui prie Žemės paviršiaus didelę įtaka daro sudėtingos aplinkos ir klimatinės sąlygos, todėl sklidimo nuostolių prognozavimui dažniausiai naudojami artutiniai empiriniai modeliai. Šie modeliai pagrįsti laipsnine atstumo funkcija, kurios rodiklis yra nustatomas iš eksperimentinių matavimų. Tačiau praktiškai atlikti matavimus didelėse teritorijose yra sudėtinga, todėl ieškoma kitų būdų, kaip nustatyti nežinomus sklidimo modelio koeficientus [1]. Daugiaspektriniai Europos kosmoso agentūros Sentinel-2 palydovai leidžia įvertinti augmenijos tankio kitimą kelių dienų intervalais [2]. Tai leidžia kurti sklidimo modelius su dinamiškai kintančiais parametrais. Šio darbo tikslas yra nustatyti koreliacines priklausomybes tarp augmenijos indeksų ir radijo bangų slopinimo rodiklių, kurių pagalba galima būtų sukurti sklidimo nuostolių prognozavimo algoritmą. Augmenijos indeksas NDVI yra aprašomas

$$NDVI = (\rho_{\rm NIR} - \rho_{\rm R})/(\rho_{\rm NIR} + \rho_{\rm R}), \qquad (1)$$

čia  $\rho_{\rm R}$  ir  $\rho_{\rm NIR}$  yra atspindžio koeficientai matomoje raudonoje ir artimojoje infraraudonoje šviesoje. Sentinel-2 palydovų spektriniai atvaizdai yra apdorojami ir iš jų sudaromi augmenijos indeksų rinkiniai kiekvienai pasirinktai vietovei. Naudojamas empirinis sklidimo nuostolių priklausomybės nuo atstumo *d* modelis

$$P_{\rm L}(d) = P_{\rm L}(d_0) + \alpha \cdot 10 \log_{10}(d/d_0) + X_{\sigma}, \qquad (2)$$

čia  $d_0$  atitinka minimalų nuostolių matavimo atstumą, o  $X_{\sigma}$  yra atsitiktinis dydis pasiskirstęs pagal lognormalųjį skirstinį. Sklidimo rodiklis  $\alpha$  įvertinamas lyginant empirinį modelį su eksperimentiniais matavimų duomenimis.

Eksperimentui buvo naudojamas sukonstruotas daiktų internetui skirtas duomenų perdavimo įrenginys su integruotu Texas Instruments radijo ryšio modulis CC1200, veikiantis 868 MHz dažniu. Programinį kodą valdo NXP mikrovaldiklis LPC11e14, kuris radijo signalo matavimo rezultatus registruoja naudodamas abipusio patvirtinimo metodą. Gauti signalo lygio duomenys susiejami su GPS koordinatėmis, kurios atvaizduoja judančio modulio poziciją realiu laiku.

Žemiau pateikiamas 2017 m. birželio mėn. matavimų pavyzdys iš Kauno miesto Ąžuolyno rajono lapuočių medžių miško. Iš Sentinel-2 palydovo duomenų nustatytas NDVI išilgai matavimų trajektorijos ir radijo bangų sklidimo nuostoliai yra parodyti 1 pav. Visas matavimo atstumų intervalas padalintas į tris dalis, kuriose NDVI indeksas įgyja skirtingas reikšmes. Sklidimo nuostolių aproksimavimas tiesine ir segmentine regresija pateiktas 2 pav. Naudojant tiesinę regresiją pasiekiamas 5.25 dB, o segmentinės regresijos atveju – 4.81 dB vidutinis kvadratinis nuokrypis. Kiekvieno atstumo intervalo rezultatai pateikti 1 lentelėje.



1 pav. Radijo bangų sklidimo nuostolių  $P_{\rm L}$  ir augmenijos indekso NDVI priklausomybė nuo atstumo d.



2 pav. Sklidimo nuostolių priklausomybės nuo atstumo aproksimavimas tiesine ir segmentine regresija.

1 lentelė. Sklidimo nuostolių rodiklio  $\alpha$  ir NDVI vertės skirtingiems atstumo intervalams.

<i>d</i> (m)	α	$\sigma_{ m PL}~({ m dB})$	NDVI	$\sigma_{ m NDVI}$
0 - 75	1.98	4.90	0.13	0.01
75 – 127	5.06	4.46	0.19	0.02
127 - 160	2.84	4.99	0.15	0.02

Tokiu būdu galima sudaryti empirinį radijo bangų sklidimo modelį, priklausantį nuo augmenijos tankio indekso ir patikslinantį įprastai naudojamą tiesinės regresijos modelį.

Reikšminiai žodžiai: radijo bangos, sklidimo nuostoliai, palydoviniai duomenys

- S. Jiang et al., 39th Annual IEEE Conference on Local Computer Networks Workshops, 592–596, September 2014.
- [2] M. Drusch et al., Remote Sensing of Environment, 120 25 (2012).

# Autorių rodyklė

### <u>A</u>

Abakevičienė B. - 194, 226 Abdulajev V. – 285 Abramavičius D. – 17, 37, 44 Acus A. - 102 Adachi C. - 41, 73, 193 Adamchuk D. – 286 Adamson J. – 218 Adomavičius K. – 57 Adomavičius R. – 292 Adomavičiūtė S. - 335 Adomėnas P. – 41, 193, 208, 262 Adomėnienė O. – 208 Agafonov V. – 189 Aglinskaitė J. – 227 Akhar P. – 336 Aidas K. - 151, 155, 288 Aleinikovas T. – 289 Aleksa V. - 162, 298 Aleksiejūnas R. - 64, 65, 66, 73, 316, 321, 339 Ališauskas S. - 27 Alkauskas A. – 51, 63, 65, 116 Ambrozas M. – 89 Anbinderis M. – 174, 287 Anisimovas E. - 36, 90, 114, 119 Aniskevich A. – 220 Anusca I. – 42 Ardaravičius L. – 72 Arlauskas K. - 18, 204 Armaitis J. - 34, 106 Astromskas G. - 205 Ašmontas S. – 192, 287, 338 Augulis R. – 83, 152, 263 Auksorius E. – 25

## B

Bachanovas P. – 181 Backfolk K. – 111 Badokas K. – 297, 312 Bagdonas S. – 93, 95, 288 Bagdonas V. – 80, 127, 129 Bagušinskaitė-Šležienė A. – 289 Balachninaitė O. – 251 Balakauskas S. – 49 Balčiūnas S. – 42, 118, 182, 217, 218 Balevičius V. – 175 Balevičius jaun. V. – 45 Baliulytė L. – 290 Baltriukienė D. – 233 Baltuška A. – 27

Bandzevičiūtė R. – 291 Banevičius D. - 165 Banevičius G. - 163 Banys J. - 42, 75, 118, 167, 180, 182, 183, 195, 201, 206, 209, 216, 217, 218, 219, 220, 221, 222, 254, 255, 266, 267, 272, 275, 276, 286, 328 Baradokė A. – 164 Barkauskas V. – 141 Baronas P. - 41, 165, 193, 264 Bartulevičius T. - 61 Barzda V. – 30 Baziulytė-Paulavičienė D. – 261, 337 Beklešovas B. - 166 Beleckaitė I. – 292 Belianinov A. - 267 Bellouard Y. – 244 Belovickis J. - 42, 167, 266, 275, 276, 328 Beresnevičius G. - 242 Bernotas A. - 97 Bertašius V. - 185 Bieliauskas A. - 264 Bieroń J. – 110, 115 Bikbajevas V. - 168 Bilotas E. – 293 Bychanok D. - 219, 270, 272 Byčenkienė S. – 308 Bočkutė K. – 169, 188 Bogdanovičius P. - 107, 130 Borisevich A. - 267 Borisova A. - 220 Borovik O. - 145, 146, 147, 148 Borovik V. - 145, 146, 147 Brazaitytė A. - 265 Braždžiūnas G. - 228 Bričkus D. – 257 Bridžius A. - 81, 310 Bubnienė U. - 314 Bucevičius J. – 186 Bučiūnas T. – 165, 170, 186 Bučytė G. – 262 Budreckaitė M. - 316 Budrytė G. – 226 Budvytytė R. – 159 Bukauskas V. - 49, 205, 269, 332 Bukauskytė A. – 152 Buscaglia V. – 286 Butkus L. - 317 Butkus R. - 243 Butkus S. - 69, 244, 251 Butkutė R. - 74, 330 Buzelis R. - 70, 138, 234

### <u>C</u>

Cashman F. H. – 130 Cedillo A. – 151 Celzard A. – 272 Cesiul A. – 339 Chang K.-F. – 124, 125, 126 Charkova T. – 50 Chmeliov J. – 83, 336 Cho H.-W. – 124, 125, 126 Chorniy Y. – 127, 129, Church R. P. – 134, Ciomaga C. E. – 180 Cisek R. – 30 Clark A. – 297, 312 Couairon A. – 241 Crepin-Gilbert C. – 157

# Č

Čeburnis D. – 24 Čechavičius B. – 74, 322, 326, 332 Čeponis M. – 128 Čeponis T. – 296, 315, 319, 324 Čeponkus J. – 157, 335 Čerkasovas V. – 41 Černauskas M. – 171, 178 Čerškus A. – 174, 287 Česnavičius R. – 199 Čiplys D. – 240 Čiplys I. – 86, 294 Čižas V. – 229

## <u>D</u>

Dagys L. - 175 Dapkus H. - 247 Dapkutė D. – 78, 94 Dargis R. – 297, 312 Dargys A. - 102, 277 Daugėla S. – 176, 214 Daugmaudis J. V. – 94 Davulienė L. – 295 Deveikis A. – 103 Deveikis L. - 296 Dikčius G. – 304 Dindune A. – 214 Diska L. – 85 Dkhil B. – 42 Dmukauskas M. - 64, 297 Dobrovolskas D. – 64, 66 Dodonova J. – 186 Doherty M. W. - 51 Dolmantas P. - 177 Dovydaitis V. - 178 Drazdauskas A. - 80, 127, 129 Drazdys R. – 138, 234 Dreyer C. E. – 63 Druteikienė R. – 317 Dubietis A. – 230, 231, 238, 241, 242 Dudek M. – 176 Dudoitis V. – 295, 308 Dudutis J. – 258 Duffy C. D. P. – 45 Duine R. – 34 Dundulis L. – 283 Dūdėnas V. – 135 Džiaugys A. – 216, 267

### E

Eckardt A. – 36, 114 Eckstein A. – 185 Eliseev E. A. – 267 Engel M. – 63 Ežerinskis Ž. – 317

### F

Fahmi A. – 269 Feltzing S. – 134 Ferland G. J. – 130 Fettkenhauer C. – 42 Fierro V. – 272 Fiutowski J. – 187 Fox K. F. – 45 Franckevičius M. – 156, 263, 269 Frankinas S. – 61 Frentrup M. – 297

### G

Gadonas R. - 48, 53, 54, 55, 244 Gaidelis V. - 278 Gaigalaitė L. – 279, 300 Gaigalas G. – 110, 115, 142 Gailevičius D. - 48, 235 Gaižiūnas I. - 104 Gajauskaitė A. – 248, 249 Gajdosik T. – 135, 136 Galli R. – 92 Garankin J. – 137 Garbaras A. – 137 Garejev N. – 231, 238 Garjonytė R. – 313 Gaspariūnas M. - 138, 311 Gaška R. – 19 Gaubas E. – 283, 296, 315, 319, 324 Gečys P. – 258 Gegevičius R. – 263 Geižutis A. - 332 Gelžinis A. – 44, 83, 117

Gelžinytė K. – 65 Gemeiner P. - 42 Genevičius K. - 18, 22 Germanas D. - 141, 144 Gertus T. - 60, 250 Getautis J. - 179 Getautis V. - 179, 264 Gegžna V. – 86, 294 Giffin G. A. – 183 Glemža J. – 299 Glemža K. – 298 Golaraei A. – 30 Gollner C. – 27 Gontis V. - 123 Gorina I. - 300, 301 Gotovski P. - 232 Gradauskas J. – 287, 333, 338 Gražulevičius J. V. - 156, 165, 191, 197, 202 Grebinskij S. - 207 Grigalaitis R. – 180, 255 Grigalevičiūtė G. – 233 Grigaliūnaitė-Vonsevičienė G. - 215 Grinevičiūtė L. - 70, 234 Grinys T. – 64, 297, 312 Grivickas V. – 168 Gruodis A. - 152 Gudaitis R. - 39, 173, 210, 271 Gudeika D. – 197 Gudelis A. - 137, 213, 279, 285, 300, 301 Gulbinas V. - 25, 104, 152, 156, 185, 263 Gusowska M. – 75 Gvozdaitė R. – 300, 309

### H

Hamedi H. R. – 120, 121 He Q. – 267 Hedley G. J. – 25 Henzie J. – 268 Hertel T. – 185 Hoffmann A. – 325

## I

Ibenskas A. – 153 Ignatjev I. – 158, 159 Ikamas K. – 58 Ilyin I. – 132 Iljinas A. – 163, 177, 181 Imbrasas P. – 165, Inoue M. – 73 Ivanauskas F. – 94 Ivaniuk K. – 191 Ivanov E. – 201 Ivanov M. – 42, 57, 60, 182, 183, 217, 218, 250, 255 Ivanovaitė Š. – 77, 302 Izai V. Y. – 206

## Y

Yu I. A. - 35, 124, 125, 126

# J

Jablonskas D. - 183, 255 Janavičius A. J. - 184 Jankauskas V. - 179, 278 Jankauskienė J. – 265 Jankevičius F. – 291, 335 Janulis R. – 80 Jarutis V. – 245 Jasaitis D. - 303 Jasinevičius K. – 105 Jasulaitienė V. – 214 Jarockytė G. – 94 Jašinskas V. – 185 Jočionis L. – 162 Jočytė E. – 333 Jokubauskis D. – 280 Jonauskas V. – 88, 109, 112, 113, 140 Jonkus V. – 339 Jönsson P. – 115, 142 Jonušas P. - 100 Jonušauskas L. – 48, 233, 235, 260 Josse M. – 221 Jovaišaitė J. – 186 Jukna A. - 289, 303, 333 Jukna V. – 241 Juknevičius V. – 106 Juodagalvis A. - 89, 136 Juodėnas M. – 268 Juodis L. – 141, 320 Juodkazis S. – 48 Juodkazytė J. – 164 Jurčiukonis D. – 136, 139 Jurkevičius J. – 66 Jurkevičiūtė A. – 187 Juršėnas A. – 252, 253 Juršėnas S. - 41, 73, 165, 170, 186, 193, 196, 197, 202, 203, 208, 262, 264, 329 Juška G. – 18, 22 Juškaitis R. - 21 Iuškevičius K. – 138 Juzeliūnas G. - 35, 90, 114, 120, 121, 124, 125, 126 Juzikienė V. – 317

### K

Kadys A. – 64, 66, 297, 316 Kainbayev N. – 188, 331 Kaliasas R. - 177 Kalinauskas R. K. - 144 Kalinin S. – 267 Kalyk F. - 226 Kalnaitytė A. – 95 Kamarauskas E. - 179, 278 Kamarauskas M. - 49, 189 Kamba S. - 180 Kancleris Ž. – 200, 293 Kandrotas G. - 301 Karabanovas V. - 94, 337 Karalius N. - 269, 273 Karenauskaitė V. – 304 Karpavičius M. - 69 Karpicz R. - 152, 314 Karpov S. - 325 Karpus V. - 74, 322 Karpuškienė R. - 107 Kartashov D. - 27 Karzaitė G. - 77, 302 Kašalynas I. – 280 Kašėtaitė S. - 260 Kausteklis J. - 162 Kavaliauskas J. – 326 Kavaliūnas V. - 154 Kazakevičius E. - 40, 190 Kazakevičius R. - 108 Kazlauskas K. - 41, 165, 193, 196, 197, 202, 203, 262, 264 Kazlauskas S. - 40, 190 Kelchner K. M. – 65 Keruckienė R. – 191 Kežionis A. - 40, 176, 190, 206, 214, 256 Kėželis R. - 199 Kinch K. M. - 81 Kinka M. – 221 Kiprijanovič O. - 72, 192 Kirsch M. - 92 Kirvelis D. - 305 Kisielius R. – 107, 130 Kiveris A. - 306 Kynienė A. - 88, 109, 113 Klebonas L. - 80 Klimavičius V. – 155 Koch E. – 92 Kojima S. - 209 Kokhan O. P. - 206 Kolenda M. – 64, 66 Komskis R. – 208 Koncevičiūtė J. - 88, 140 Kononovičius A. - 122, 123 Konstantinova M. - 307 Kontenis L. - 30 Kontrimas T. - 236 Korjik M. – 198, 211

Korolik O. - 168 Korsakas S. - 268 Kostylyov V. - 338 Kotsilkova R. - 201 Kovalevskij V. – 138, 269 Kranauskaitė I. - 219, 220 Kresse G. - 63 Kreiza G. - 41, 193, 196, 264 Krikščikas L. – 308 Krotkus A. - 74, 332 Krouglov S. - 30 Krugly E. - 154 Krumina A. - 214 Kučas S. - 113, 140 Kudarauskas D. - 230 Kudriašov V. - 124, 125, 126 Kudžma R. – 325 Kuimova M. - 46 Kukhta N. A. - 165 Kuksėnaitė G. – 264 Kulbickas A. - 269 Kuliešaitė M. – 245 Kuliešius F. – 224 Kulkarni V. P. - 130 Kuodis Z. - 158 Kuokštis E. - 99 Kupec A. – 199 Kupliauskienė A. - 145, 146, 147, 148 Kuritzky L. – 65 Kuzhir P. - 201, 254, 272 Kvedaravičiūtė S. - 151

### $\underline{\mathbf{L}}$

Labanauskas L. - 152 Lackner G. - 42 Lagzdina E. - 137, 309, 311 Lambrev P. - 336 Lapeika V. - 269, 306 Laukaitis G. - 154, 169, 188, 331 Lavoura L. - 139 Lazauskaitė R. - 304, 310 Lee C.-Y. - 124, 125, 126 Lee M.-J. – 124, 125, 126 Lelis M. - 214 Lengvinaitė D. – 155 Lengvinas A. - 224 Leščinskaitė A. - 131 Li L. - 326 Liberis J. – 72 Linfield E. H. - 326 Lingis D. - 137, 309, 311 Lis B. – 176 Lisauskas A. - 58, 282 Liupševičius D. – 110

Lozovski T. – 111 Lučun A. – 174, 287 Lugauer H. J. – 325 Lukauskas M. – 194 Lukyanov G. N. – 303 Lukošiūnas J. – 242 Lukša A. – 205 Lukšienė B. – 307 Lupascu D. C. – 42

### <u>M</u>

Maceika E. - 307 Maciulevičius M. - 84 Mackoit M. - 51 Mackonis P. - 237 Macutkevic J. - 167, 195, 201, 219, 220, 221, 222, 254, 270, 272, 328 Maczka M. – 75 Mačernis M. - 85, 105 Mačiulaitis J. - 259 Mačiulaitis R. - 259 Maglione M. – 221 Magomedov A. - 179 Maksymovych P. - 267 Malakauskaitė J. – 196 Maldžius R. – 111 Maleckaitė K. – 197 Malinauskas M. - 48, 53, 54, 55, 233, 235, 244, 259, 260, 261 Malinauskas T. - 64, 66, 297, 312, 325 Maneikis A. - 207, 214, 215 Marcinauskas L. - 171, 178, 199 Marcinkevičius S. - 63 Marcinkevičiūtė A. – 238, 242 Marčiulionis T. – 77, 302 Marčiulionytė V. – 198, 211 Marsman M. - 63 Maršalka A. - 93, 288 Martone A. - 220 Marudinas V. – 177 Masilionis I. - 164 Masys S. – 88, 109, 112, 113, 140 Matheson A. – 25 Mathew J. S. - 199 Matijošius A. - 60, 250 Matsushima T. – 73 Matukas J. - 201, 282, 299 Matulaitienė I. – 49, 50, 172 Matulaitis T. - 156, 165 Matulionis A. – 72 Matulis A. – 200 Mazanik A. - 168 Mazėtytė R. - 314 Mažeika K. – 313

Mažulė L. – 70 Medvids A. - 178 Meisak D. - 219, 270 Mekys A. - 212 Melninkaitis A. - 70, 234, 239 Melvydas V. - 313 Mennucci B. - 45 Meškauskaitė D. – 296, 315 Meškinis Š. – 39, 210, 271 Miasojedovas A. - 197, 264, 329 Miasojedovas S. - 65, 73, 329 Michailovas A. - 61 Mickevičius J. – 64, 66, 321 Mickevičius S. - 144, 207 Mikolaitis Š. – 80, 129 Miliauskienė J. – 265 Milieška M. – 199 Mimaitė V. - 156 Minialga V. - 225 Minkevičius L. – 280 Minkevičiūtė R. - 132 Mirinavičius T. - 311 Mironas A. - 49, 189 Mirsanaye K. - 30 Misikonytė Ž. – 129 Mitoseriu L. - 180 Mitrofanov A. - 27 Mizeikis V. – 48 Molak A. – 195, 222 Momgaudis B. - 239 Monkman A. – 208 Mordas G. - 308, 318 Morozovska A. - 267

## N

Nakamura S. - 65 Namal I. - 185 Nargelas S. - 65, 73, 316 Nargelienė V. - 205 Naruševičiūtė A. - 162 Naujalis E. – 160 Naujalis R. – 133 Naujokaitis A. – 204 Navab R. - 30 Navakauskas E. - 159 Nedzinskas R. - 326 Nekrasovas J. - 204, 278 Neverauskienė L. – 86, 294 Niaura G. - 49, 50, 74, 158, 159, 172 Nippert F. - 325 Nomeika K. – 64, 65, 66, 316 Norkus M. - 49 Normantas P. - 162 Novičenko V. – 90

## <u>0</u>

Ö'Dowd C. D. – 24 Ogilvie J. P. – 44 Onufrijevs P. – 171, 178 Orliukas A. F. – 214 Orlov S. – 228, 232, 236, 246, 248, 249, 252, 253, 257 Ostrauskaitė J. – 260 Ovadnevaitė J. – 24

# <u>P</u>

Pabedinskas A. - 317 Pačebutas V. - 332 Paddubskaya A. - 254 Paipulas D. - 68, 69, 244, 319 Pakalka S. - 88, 109, 113 Pakštas V. – 263 Pakštienė E. – 80 Palaimienė E. - 221, 222 Palenskis V. - 299 Passerini S. - 183 Paškevič Č. – 174, 287 Pauliukaitė R. - 164 Pauraitė J. - 318 Pavasaris Č. – 281 Pavlov J. - 296, 315, 319 Pavlova A. - 224 Pearson S. J. - 25 Peckus D. - 152, 156 Perrenoud M. – 244 Petelsky T. - 323 Peterson A. - 218 Petrulėnas A. – 237 Petrulionis D. - 40, 256 Petrulis A. - 247 Pietzonka I. - 325 Pivrikas A. – 22 Pyragas K. - 31, 149, 150 Pyragas V. - 149 Pyragienė T. - 150 Platakytė R. – 157 Plėšnienė L. – 269 Plyushch A. - 254, 272 Plukienė R. – 141, 309, 311, 320 Plukis A. - 137, 138, 141, 309, 311, 320 Podlipskas Ž. – 66, 321 Pogodin A. I. - 206 Pöppl A. – 75 Pozingytė E. - 74, 322, 326 Pralgauskaitė S. – 201, 299 Pranculis V. - 25 Prokopciuk N. - 323

Pučetaitė M. – 335 Pugžlys A. – 27 Puišys A. – 68 Purlys R. – 184 Puzas A. – 309 Pūkas K. – 324

## Q

Qin C. – 73

# <u>R</u>

Račiukaitis G. - 29, 258 Račiūnas M. - 36, 114 Radiunas E. – 193, 202, 264 Radžiūtė L. – 110, 115 Ragulis P. – 293 Raišys S. - 197, 202, 203, 262 Rajackaitė E. - 173, 210 Ramanauskas R. - 177 Ramanavičius A. - 314 Ramonas M. - 72 Rancova O. - 37 Rastenienė L. – 269 Razinkovas L. - 116 Reklaitis I. - 319, 325 Rekštytė S. - 235, 244, 259 Remeikis V. - 138, 141, 317 Riauka M. – 321 Ribierre J.-C. - 41 Rimeika R. – 240 Rimkus A. - 326 Rinkevičius A. – 32 Rinkūnas R. - 184 Rybakovas E. - 117 Rynkun P. – 110, 142 Rodin A. - 237 Roman V. - 148 Roos W. H. - 269 Rotomskis R. - 30, 78, 94, 95, 337 Roskos H. G. – 58 Rubahn H.-G. - 187 Ruban A. V. - 83, 336 Rumbauskas V. – 296, 315 Ruseckas A. – 25 Ruseckas J. - 35, 106, 108, 120, 121, 124, 125, 126 Rutkauskas D. – 77, 302, 327, 336 Rutkūnienė Ž. – 188

### <u>S</u>

Sabonis V. – 204 Sabov M. Y. – 206 Saccon F. – 336 Sakanas A. – 180 Sakavičius A. - 205 Samavičius R. - 225 Samuel I. D. W. - 25 Samim M. - 30 Samulionis V. - 42, 167, 266, 272, 275, 276, 328 Sánches-Ferrer A. - 328 Sanlialp M. – 42 Sasnauskas G. – 327 Schackert G. - 92 Seliuta D. - 200, 280 Selskis A. - 70, 74, 220, 234 Semionov D. - 133 Senulis M. - 207 Serevičius T. - 170, 186, 208 Serov I. N. - 303 Shafranyosh I. – 145, 146, 147 Shen J.-X. - 63 Shenderova O. - 167, 254, 275, 328 Shumakova V. – 27 Shvartsman V. V. - 42 Sidaravičius J. - 111 Sidey V. I. - 206 Sidorov-Biryukov D. – 27 Silibin M. – 266, 276 Simokaitienė J. – 156 Simon Y. - 203 Sirutkaitis V. – 68, 69, 244, 245, 251 Sysa A. – 276 Skapas M. - 74, 330 Skliutas E. – 260 Skruibis J. – 251 Smalakys L. – 70 Smilgevičius V. - 60, 243, 250 Smiljanic R. - 127 Smolianskis M. – 162 Solnyshkin A. - 276 Songaila E. - 83 Speck J. S. – 65 Spielman I. B. – 114 Sriubas M. – 188, 331 Stabinis A. - 243 Stakėnas V. – 213 Staliūnas K. – 20, 48 Stanionytė S. - 297, 332 Stanislovaitis P. - 60, 250 Stankevičiūtė A. – 226 Stankus V. – 166, 181 Steikūnas G. – 287 Steikūnienė A. – 287 Steiner G. - 92, 172 Steponėnas V. – 86 Steponkienė S. – 78 Stepšys A. - 144 Stonys R. - 258

Stonkutė E. – 129, 134 Stonkutė R. – 128, 131, 133 Strassburg M. – 325 Sträter C. – 114 Strazdaitė S. – 159 Striela R. – 152 Studenyak I. P. – 206 Stupakova J. – 333 Sūdžius J. – 310 Sužiedėlis A. – 174, 287, 333, 338 Svirskas K. – 339 Svirskas Š. – 42, 167, 209, 286 Svirskas Ž. – 57

# Š

Šablinskas V. – 157, 171, 172, 291, 335 Šačkus A. – 264 Šakalys J. – 295 Šakirzanovas S. – 48, 261, 337 Šalkauskas O. – 320 Šalkus T. – 176, 206, 214 Šapolaitė J. – 317 Šarlauskas J. – 160, 273 Šatkauskas S. – 84 Šatkovskienė D. – 98 Šatrauskas E. – 303 Ščajev P. - 41, 73, 329 Ščiuka M. – 70 Šermukšnis E. – 72 Šetkus A. – 49, 189 Šileikis A. – 273 Šilėnas A. – 287, 338 Šimatonis L. – 187 Šimėnas M. – 75, 118, 153 Šimonis V. – 143 Širmulis E. – 338 Šlekas G. – 200 Šlepetytė G. – 169 Špandyreva M. – 158 Šulskus J. – 104 Šuminas R. – 238, 241 Švedas V. – 338

### T

Tamošauskas G. – 230, 231, 238, 241, 242 Tamošiūnas M. – 84 Tamošiūnas S. – 100 Tamulaitis G. – 64, 66, 198, 211 Tamulevičienė A. – 210 Tamulevičius S. – 39, 156, 173, 210, 268 Tamulevičius T. – 156, 187, 268 Tamulienė J. – 160, 269, 273, 290 Tamulienė V. – 243 Tarasiuk N. – 307, 323 Tautvaišienė G. - 80, 127, 129, 132 Terbetas G. - 86, 294 Thanigachalam B. - 199 Tičkūnas T. - 244 Tolenis T. - 70, 234 Tomašiūnas R. - 325 Tornau E. E. - 118, 153 Tratsiak Y. - 211 Treideris M. - 49, 189 Tretjak M. - 201 Trinkūnas G. - 336 Trusova E. - 198, 211 Tsao M.-S. - 30 Tumkevičius S. - 186 Tutkus M. - 77, 302, 327, 336

### $\underline{\mathbf{U}}$

Uckermann O. – 92 Ulevičius V. – 308, 318 Ünal N. – 36 Ungerer P. – 336 Urba A. – 160 Urbonienė V. – 291, 335 Ušinskienė J. – 86

## V

Vaičaitis V. – 57 Vaičikauskas V. – 338 Vaičiūnas V. – 338 Vaišnoras R. - 269, 273 Vaitiekūnas F. - 274, 334 Vaitkevičius A. – 198, 211 Vaitkus J. – 212, 294 Vaitkuvienė A. – 86, 294 Vaitukaitytė D. – 179 Valantinas A. – 81 Valdniece D. – 214 Valinčius G. – 159 Valiokas R. – 164 Valiulis D. – 160, 213 Valiulis G. – 241 Valkūnas L. - 44, 83, 85, 105, 117, 336 Valušis G. – 280, 326 Vansevičius V. – 128, 131, 133 Varanavičius A. – 28 Varanius D. - 86, 294 Varapnickas S. – 261 Vasiliauskas A. – 39, 187, 271 Vaštakaitė V. – 265 Velička M. – 335 Venckus O. – 336 Venckutė V. – 214 Vengalis B. – 215 Vengelis J. – 245

Vengris M. – 53, 54, 55, 230 Venius J. - 30 Venslauskas M. S. - 84 Vertelis V. – 212 Viliūnas M. – 278 Vilkas A. – 337 Virbukas D. – 181 Viršilė A. – 265 Vithanage D. A. – 25 Vitta P. - 227, 229, 247, 325 Vyčaitė S. – 169 Vysochanskii Y. - 216, 267 Vyšniauskas A. – 46 Vyšniauskas J. - 282, 283 Voß D. - 58 Volyniuk D. - 156, 191 Völkel G. – 75 Voronin A. – 27 Vosylius V. – 246

## W

Wada S. – 182, 217 Van de Walle C. G. – 51, 63 Wang K. – 142 Weston L. – 51 Wickramaratne D. – 51, 63 Wilson B. – 30

# $\underline{\mathbf{Z}}$

Zabiliūtė-Karaliūnė A. – 227, 247 Zacharovas E. – 162 Zamaraitė I. – 216 Zarrelli M. – 220 Zaremba M. – 77, 302 Zdaniauskienė A. – 50 Zheltikov A. – 27 Zimmerer C. – 172 Zopelis E. – 237

# Ž

Žalga A. – 40, 162 Žalys O. – 338 Ženovienė R. – 80, 129 Žlabys G. – 119 Žmuidzinas J. – 23 Žukauskas A. – 247 Žukauskas G. – 339 Žurauskas E. – 30