



# Lietuvos Nacionalinė Fizikos Konferencija

skirta Tarptautinių kvantinių mokslų ir  
technologijų metams pažymėti

**2025 m. spalio 8-10 d., Kaunas**

**infk.ktu.edu**

## PROGRAMA IR PRANEŠIMŲ TEZĖS

Organizatoriai:



VYTAUTAS  
MAGNUS  
UNIVERSITY  
MCMXXII



FIZINIŲ IR  
TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ  
CENTRAS



kauno  
technologijos  
universitetas



VILNIUS  
TECH  
Vilniaus Gedimino  
technikos universitetas



Rėmėjai:



SPEKTRA

VILDOMA



inospectra



OPTOGAMA



LIGHT  
CONVERSION



LMT  
Lietuvos mokslo taryba

**Konferencijos data:**

2025 m. spalio 8-10 d.

**Konferencijos vieta:**

KTU "Santakos" slėnis,  
K. Baršausko g. 59 LT-51423, Kaunas, Lietuva

**Konferencijos pirmininkas:**

G. Tautvaišienė (VU FF TFAI), konferencijos pirmininkė, LFD prezidentė,  
G. Laukaitis (KTU), programinio ir organizacinio komitetų pirmininkas

**Programos komitetas:**

G. Tautvaišienė (VU FF TFAI)  
G. Laukaitis (KTU)  
D. Adlienė (KTU),  
Ž. Rutkūnienė (KTU),  
S. Tamulevičius (KTU),  
I. Kašalynas (FTMC),  
G. Račiukaitis (FTMC),  
G. Valušis (FTMC),  
V. Vansevičius (FTMC),  
R. Lazauskaitė (VDU),  
S. Mickevičius (VDU),  
A. Jukna (VGTU),  
D. Abramavičius (VU FF ChFI),  
R. Aleksiejūnas (VU FF FNI),  
E. Anisimovas (VU FF TFAI),  
J. Banys (VU FF TETI),  
J. Chmeliov (VU FF ChFI),  
J. Čeponkus (VU FF ChFI),  
A. Dubietis (VU FF LTC),  
G. Gaigalas (VU FF TFAI),  
K. Genevičius (VU FF ChFI),  
R. Grigalaitis (VU FF TETI),  
V. Jonauskas (VU FF TFAI),  
A. Juodagalvis (VU FF Branduolių ir elementariųjų  
dalelių fizikos centras, TFAI),  
S. A. Juršėnas (VU FF FNI),  
G. Juzeliūnas (VU FF TFAI),  
D. Kaškelytė (VU FF LTC),  
A. Kynienė (VU FF TFAI),  
M. Mackoit-Sinkevičienė (VU FF TFAI),  
A. Matijošius (VU FF LTC),  
E. Palaimienė (VU FF TETI),  
R. Rotomskis (VU FF LTC),  
Š. Svirskas (VU FF TETI),  
G. Tamulaitis (VU FF FNI),  
J. V. Vaitkus (VU FF FNI),  
R. Skorulskienė (Kauno Jėzuitų gimnazija),  
J. Berzinš (Light Conversion).

**Organizacinis komitetas:**

Giedrius Laukaitis (KTU),  
Diana Adlienė (KTU),  
Kristina Bočkutė (KTU),  
Andrius Juodagalvis (VU),  
Alina Kotkevičienė (KTU),  
Teresa Moskaliovienė (KTU),  
Živilė Rutkūnienė (KTU).

# Turinys

|                                                                                                                                                                                                                                                                               |     |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>Konferencijos programa</b>                                                                                                                                                                                                                                                 | 3   |
| <b>Stendinių pranešimų sąrašas</b>                                                                                                                                                                                                                                            | 6   |
| <b>Konferencijos dalyvių tezės</b>                                                                                                                                                                                                                                            | 12  |
| <b>Plenariniai pranešimai</b>                                                                                                                                                                                                                                                 | 12  |
| <b>Kviestiniai pranešimai</b>                                                                                                                                                                                                                                                 | 22  |
| <b>Žodinės sesijos</b>                                                                                                                                                                                                                                                        | 31  |
| Sesija 1A (Elementariųjų dalelių, atomų ir branduolių fizika, materijos sandara; Statistinė fizika)                                                                                                                                                                           | 31  |
| Sesija 1B (Lazerių fizika ir šviesos technologijos)                                                                                                                                                                                                                           | 35  |
| Sesija 1C (Cheminė fizika)                                                                                                                                                                                                                                                    | 40  |
| Sesija 2A (Teorinė ir skaičiuojamoji fizika)                                                                                                                                                                                                                                  | 45  |
| Sesija 2B (Fizikos istorija, terminija ir mokslo politika; Fizikos edukologija ir sklaida)                                                                                                                                                                                    | 50  |
| Sesija 2C (Cheminė fizika)                                                                                                                                                                                                                                                    | 56  |
| Sesija 3A (Astrofizika, astronomija ir kosmologija)                                                                                                                                                                                                                           | 62  |
| Sesija 3B (Biofizika ir medicinos fizika)                                                                                                                                                                                                                                     | 67  |
| Sesija 3C (Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika, Nanomokslas ir nanotechnologijos)                                                                                                                                                                                           | 72  |
| Sesija 4A (Astrofizika, astronomija ir kosmologija)                                                                                                                                                                                                                           | 77  |
| Sesija 4B (Nanomokslas ir nanotechnologijos)                                                                                                                                                                                                                                  | 82  |
| Sesija 4C (Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika)                                                                                                                                                                                                                             | 88  |
| Sesija 5A (Elektronika ir optoelektronika, Kvantinė optika ir kvantinė informacija)                                                                                                                                                                                           | 94  |
| Sesija 5B (Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos)                                                                                                                                                                                                           | 99  |
| Sesija 5C (Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos; Energetikos fizika ir technologijos; Instrumentai ir matavimai)                                                                                                                                           | 105 |
| <b>Stendinės sesijos</b>                                                                                                                                                                                                                                                      |     |
| Sesija 1 (Elementariųjų dalelių, atomų ir branduolių fizika, materijos sandara, Statistinė fizika, Teorinė ir skaičiuojamoji fizika, Cheminė fizika, Lazerių fizika ir šviesos technologijos, Fizikos istorija, terminija ir mokslo politika, Fizikos edukologija ir sklaida) | 110 |
| Sesija 2 (Astrofizika, astronomija ir kosmologija, Aplinkos fizika, Biofizika ir medicinos fizika, Nanomokslas ir nanotechnologijos, Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika)                                                                                                   | 151 |
| Sesija 3 (Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos)                                                                                                                                                                                                            | 191 |
| Sesija 4 (Kvantinė optika ir kvantinė informacija, Elektronika ir optoelektronika, Energetikos fizika ir technologijos, Instrumentai ir matavimai, Technologiniai taikymai)                                                                                                   | 223 |
| <b>Autorių rodyklė</b>                                                                                                                                                                                                                                                        | 250 |

# KONFERENCIJOS PROGRAMA

Spalio 8 d.

|                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 08:30                                                                               | Atvykimas ir registracija / 1 aukšto Fojė                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| 09:45                                                                               | Konferencijos atidarymas, Sveikinimo žodis KTU Rektorius E. Valatka, EPS Prezidentas José María De Teresa, LFD Prezidentė G. Tautvaišienė<br>Konferencijos informacija - Programinio ir organizacinio komiteto pirmininkas G. Laukaitis                                                                        |
| Plenariniai pranešimai I / 1 Salė. Pirmininkas: Gražina Tautvaišienė                |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
| 10:10                                                                               | Plenarinis pranešimas 1. <b>José María De Teresa</b> , Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (INMA), CSIC-Universidad de Zaragoza, Zaragoza, Spain<br><i>Nanofabrication using focused electron and ion beams</i>                                                                                    |
| 10:45                                                                               | Plenarinis pranešimas 2. <b>Gediminas Juzeliūnas</b> , Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Fizikos Fakultetas, Vilniaus universitetas<br><i>Šaltųjų atomų valdymas šviesos pluoštais / Optical control of ultracold atoms</i>                                                                         |
| 11:20                                                                               | Kavos pertrauka / 1 aukšto Fojė                                                                                                                                                                                                                                                                                |
| Plenariniai - Kviestiniai pranešimai II / 1 Salė. Pirmininkas: Sigitas Tamulevičius |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
| 11:40                                                                               | Plenarinis pranešimas 3. <b>Arūnas Varanavičius</b> , Lazerinių tyrimų centras, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas<br>Ekstremalioji šviesa: generavimo principai, eksperimentinis įgyvendinimas ir taikymai / <i>Extreme light: basic principles, experimental implementation and applications</i>     |
| 12:15                                                                               | Kviestinis pranešimas 1. <b>Arturas Vailionis</b> , Stanford Nano Shared Facilities, Stanford, U.S.A., Department of Physics, Kaunas University of Technology<br><i>X-ray Computed Tomography for Materials Science: From Batteries to Biomaterials</i>                                                        |
| 12:45                                                                               | Kviestinis pranešimas 2. <b>Arturs Mozers</b> , Laser Centre, University of Latvia<br><i>The advances of University of Latvia in quantum sensor development for magnetometry</i>                                                                                                                               |
| 13:15                                                                               | Pertrauka                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| 14:10-15:10                                                                         | <b>Stendinė sesija 1</b> / 1 aukšto Fojė<br>Elementariųjų dalelių, atomų ir branduolių fizika, materijos sandara, Statistinė fizika, Teorinė ir skaičiuojamoji fizika, Cheminė fizika, Lazerių fizika ir šviesos technologijos, Fizikos istorija, terminija ir mokslo politika, Fizikos edukologija ir sklaida |

|       | Žodinė sesija 1A (Elementariųjų dalelių, atomų ir branduolių fizika, materijos sandara; Statistinė fizika).<br>1 Salė. Pirmininkas: Simonas Draukšas                                                                                                                          | Žodinė sesija 1B (Lazerių fizika ir šviesos technologijos).<br>2 Salė. Pirmininkas: Arūnas Varanavičius                                                                                                                                                                                                               | Žodinė sesija 1C (Cheminė fizika)<br>3 Salė. Pirmininkas: Vytautas Klimavičius                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 15:10 | Kviestinis pranešimas 3. <b>Tadas Kaliatka</b> , Lietuvos energetikos institutas<br>Branduolinė energetika šiandien ir rytoj: mažieji moduliniai reaktoriai, jų tyrimų iššūkiai / <i>Nuclear Energy Today and Tomorrow: Small Modular Reactors, Their Research Challenges</i> | Kviestinis pranešimas 4. <b>Julius Vengelis</b> , Vilniaus universitetas<br>Subnanosekundiniai parametriniai šviesos šaltiniai: iššūkiai ir vystymo perspektyvos / <i>Subnanosecond optical parametric sources: challenges and development perspectives</i>                                                           | Kviestinis pranešimas 5. <b>Ricardo J. Fernández-Terán</b> , Department of Physical Chemistry, University of Geneva, Geneva, Switzerland<br><i>Towards Controlling Excited State Reactivity in Organic and Organometallic Systems: A Perspective Through Ultrafast Multidimensional Spectroscopies</i>                                                                          |
| 15:40 | <b>Mindaugas Šarpis</b> , Vilniaus universitetas<br>CERN LHCb eksperimentas ir su juo susijusios veiklos Lietuvoje / <i>LHCb experiment at CERN and related activities in Lithuania</i>                                                                                       | <b>Mindaugas Juodėnas</b> , Kauno technologijos universitetas<br>VCSEL lazeriai su integruotomis metagardelėmis kompaktiškomis biofotonikos platformoms / <i>Metagrating-Integrated VCSELs for Compact Biophotonic Platforms</i>                                                                                      | <b>Stepas Toliautas</b> , Vilniaus universitetas<br>BODIPY molekulinį jutiklį kūrimas naudojant skaičiuojamosios chemijos modelius / <i>Design of BODIPY molecular sensors by means of computational models</i>                                                                                                                                                                 |
| 16:00 | <b>Surya Revanth Ayyagari</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br><i>Far-Field Measurements of a Subwavelength Size Resonator in the Terahertz Range</i> / Tolimojo lauko matavimai sub-banginių matmenų dydžio vieno rezonatoriaus terahercų diapazone              | <b>Viktorija Tamulienė</b> , Vilniaus universitetas<br>Netiesinių X-bangų itaka atbulinės bangos šviesos parametriniam osciliatoriui kaupinamam subnanosekundiniams lazeriniams impulsais / <i>Influence of nonlinear X-waves on backward-wave optical parametric oscillator pumped by subnanosecond laser pulses</i> | <b>Einaras Sipavičius</b> , Vilniaus universitetas<br>Cholino lizinato ir vandens mišinių tarpmolekulinės struktūros tyrimas BMR ir molekulių dinamikos / kvantinės mechanikos metodais / <i>Intermolecular organization in aqueous mixtures of choline lysinate studied by NMR and molecular dynamics / quantum mechanics</i>                                                  |
| 16:20 | <b>Rytis Kazakevičius</b> , Vilniaus universitetas<br>Aplinkos su laike kintančiu difuzijos koeficientu aprašymas taikant statistinės fizikos metodus / <i>Description of an environment with a time-dependent diffusion coefficient using statistical physics methods</i>    | <b>Jokūbas Pimpė</b> , Vilniaus universitetas<br>Didelio pasikartojimo dažnio ir didelės vidutinės galios parametrisinis šviesos stiprintuvas artimojoje infraraudonojoje spektro srityje / <i>High repetition rate and high average power optical parametric amplifier in the near-infrared spectral range</i>       | <b>Ivan Halimski</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Ar fluorescencijos slopinimo kinetika yra veiksminga priemonė analizuoti fluorescencijos gesinimo kilmę ir van der Valso sąveikos pasireiškimą? / <i>Is fluorescence decay kinetics an effective tool to analyze the origin of fluorescence quenching and the manifestation of van der Waals interaction?</i> |
| 16:40 |                                                                                                                                                                                                                                                                               | <b>Dominykas Karvelis</b> , Vilniaus universitetas<br>Vienalytė aukštos energijos impulsų antrinė spūda stiklo plokštelėje iki 1,5 optinio ciklo / <i>Homogeneous high energy pulse post-compression in a single thin plate to 1.5 optical cycles</i>                                                                 | <b>Paulius Rindzevičius</b> , Vilniaus universitetas<br>Deimantinių adatų su metalinėmis nanostruktūromis KARS mikrospektroskopija / <i>CARS microspectroscopy of diamond needles with metal nanostructures</i>                                                                                                                                                                 |
| 17:00 | Kavos pertrauka / 1 aukšto Fojė                                                                                                                                                                                                                                               |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |

|       | Žodinė sesija 2A (Teorinė ir skaičiuojamoji fizika)<br>1 Salė. Pirmininkas: Gediminas Juzeliūnas                                                                                                                                                             | Žodinė sesija 2B (Fizikos istorija, terminija ir mokslo politika; Fizikos edukologija ir sklaida)<br>2 Salė. Pirmininkė: Aušra Kynienė                                                                                                                             | Žodinė sesija 2C (Cheminė fizika)<br>3 Salė. Pirmininkas: Kristijonas Genevičius                                                                                                                                                                                                      |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 17:20 | <b>Artūras Acus</b> , Vilniaus universitetas<br>Matricų funkcijų skaičiavimas apibendrintoje spektrinėje bazėje / <i>Computation of matrix functions using generalised spectral basis</i>                                                                    | <b>Judita Puišio</b> , Kauno technologijos universitetas<br>Eksperimentinės fizikos profesorius Alex Montwill / <i>Professor of Experimental Physics Alex Montwill</i>                                                                                             | <b>Vytautas Klimavičius</b> , Vilniaus universitetas<br>BMR spektroskopija baterijų ir baterijų medžiagų tyrimuose / <i>NMR spectroscopy for battery and battery materials research</i>                                                                                               |
| 17:40 | <b>Simonas Draukšas</b> , Vilniaus universitetas<br>Kvarkų maišymosi matricos pernормavimas ir W bozono skilimas į kvarkus / <i>Renormalization of the quark mixing matrix and W boson decay into quarks</i>                                                 | <b>Dalia Šatkovskienė</b> , Vilniaus universitetas<br>Jaunieji tyrėjai Baltijos šalyse: iššūkiai ir perspektyvos kintančiame akademiniam kraštovaizdyje / <i>Young Researchers in the Baltic States: Challenges and Prospects in a Changing Academic Landscape</i> | <b>Dovilė Lengvinaitė</b> , Vilniaus universitetas<br>Tikslus 1H BMR spektrų modeliavimas: [C4mim][BF4] joninis skystis ir jo mišiniai su vandeniu / <i>Towards accurate modelling of 1H NMR spectra of ionic liquids: The case of [C4mim][BF4] and its aqueous mixtures</i>          |
| 18:00 | <b>Šarūnas Masys</b> , Vilniaus universitetas<br>Nanodeimantų magnetinės savybės: priklausomybės nuo nanodalelių dydžio teorinis tyrimas / <i>Magnetic properties of nanodiamonds: Theoretical investigation on the dependence of the nanoparticles size</i> | <b>Sandra Pralgauskaitė</b> , Vilniaus universitetas<br>Balansuojant įvairovę / <i>Balancing diversity</i>                                                                                                                                                         | <b>Ieva Kiminaitė</b> , Lietuvos energetikos institutas<br>Polipropileno ir plastikinių pakuočių atliekų skilimo kinetikos analizė greitosios pirolizės metu / <i>Kinetic Analysis of Pyrolytic Decomposition of Polypropylene and Plastic Packaging Waste during Flash Pyrolysis</i> |
| 18:20 | <b>Mindaugas Mačernis</b> , Vilniaus universitetas<br>Karotinoidų kristalinių savybių modeliavimas: Ramano spektrai ir struktūra / <i>Modeling of Carotenoid Crystals: Raman spectra and Structural Insights</i>                                             | <b>Rigonda Skorulskienė</b> , Kauno jėzuitų gimnazija<br>Fizikos mokymo ypatumai bendrojo ugdymo pagrindinėje mokykloje / <i>Peculiarities of teaching physics in lower secondary education</i>                                                                    | <b>Žyginta Murnikova</b> , Vilniaus universitetas<br>Peptidas [Emim][TFA] mišiniuose su vandeniu – struktūros ir BMR savybių teorinis tyrimas / <i>Peptide in [Emim][TFA] Mixtures with Water – Theoretical Study of Structural and NMR Properties</i>                                |
| 18:40 |                                                                                                                                                                                                                                                              | <b>Edita Palaimienė</b> , Vilniaus universitetas<br>Fizikos didaktikos aspektai / <i>Didactic Aspects of Physics Education</i>                                                                                                                                     | <b>Marius Navickas</b> , Vilniaus universitetas<br>Photoinitiation dynamics in SZ2080 photoresist sensitized with different photoinitiators                                                                                                                                           |

|               |                                                        |
|---------------|--------------------------------------------------------|
| 19:00 – 20:30 | <b>Konferencijos atidarymo vakaras</b> / 1 aukšto Fojė |
|---------------|--------------------------------------------------------|

# Spalio 9 d.

| Plenariniai pranešimai III<br>1 Salė. Pirmininkas: Gediminas Gaigalas |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|-----------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 10:00                                                                 | Plenarinis pranešimas 4. <b>Hans Kjeldsen</b> , Stellar Astrophysics Centre, Department of Physics and Astronomy, Aarhus Space Centre (SpaCe), Aarhus University, Denmark<br><i>Looking Inside Stars: Asteroseismology of Solar-Type Stars</i>                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| 10:35                                                                 | Plenarinis pranešimas 5. <b>Grażina Tautvaišienė</b> , Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas<br>CNO – kartiniai cheminiai elementai žvaigždžių ir galaktikų evoliucijos tyrimuose / <i>CNO as key chemical elements in stellar and galactic evolution</i>                                                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| 11:15                                                                 | Kavos pertrauka / 1 aukšto Fojė                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| Plenariniai pranešimai IV<br>1 Salė. Pirmininkas: Aidas Matijošius    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| 11:35                                                                 | Plenarinis pranešimas 6. <b>Gediminas Gaigalas</b> , Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas<br>Antrosios eilės Relėjaus ir Šrėdingerio trikdymų teorija reliatyvistinių konfigūracijų superpozicijos metodui / <i>Second-order Rayleigh-Schrödinger perturbation theory for the relativistic configuration interaction method</i> |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| 12:10                                                                 | Plenarinis pranešimas 7. <b>Jūras Banys</b> , Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas<br>Šiuolaikinių medžiagų plačiajuosčiai dažniniai matavimai / <i>Broad band frequency measurements of advanced materials</i>                                                                                                                                                              |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| 12:45                                                                 | Plenarinis pranešimas 8. <b>Gediminas Račiukaitis</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Ar lazeriai padės reinkarnuoti Lietuvos puslaidininkių pramonę? / <i>Will lasers help revive the Lithuania's semiconductor industry?</i>                                                                                                                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| 13:20                                                                 | Pertrauka                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| 14:10–15:10                                                           | Stendinė sesija 2 / 1 aukšto Fojė<br>Astrofizika, astronomija ir kosmologija, Aplinkos fizika, Biofizika ir medicinos fizika, Nanomokslas ir nanotechnologijos, Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika                                                                                                                                                                              |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|                                                                       | Žodinė sesija 3A (Astrofizika, astronomija ir kosmologija)<br>1 Salė. Pirmininkas: Vladas Vansevičius                                                                                                                                                                                                                                                                              | Žodinė sesija 3B (Biofizika ir medicinos fizika),<br>2 Salė. Pirmininkas: Ričardas Rotomskis                                                                                                                                                                                                                                                                     | Žodinė sesija 3C (Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika, Nanomokslas ir nanotechnologijos),<br>3 Salė. Pirmininkas: Jūras Banys                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| 15:10                                                                 | <b>Leonid S. Pilyugin</b> , Vilniaus universitetas<br><i>Spiral galaxies with unusual azimuthal asymmetry in oxygen abundance</i>                                                                                                                                                                                                                                                  | <b>Agnė Kalnaitytė-Vengeliienė</b> , Vilniaus universitetas<br>Aplinkos sąlygų įtaka CuInZnS/ZnS kvantinių taškų poveikiui gelų vandenų fitoplanktonui / <i>Environmental conditions impact on effects of CuInZnS/ZnS quantum dots on freshwater phytoplankton</i>                                                                                               | <b>Patrik Ščajev</b> , Vilniaus universitetas<br>Krūvio nešėjų judrio ir gyvavimo trukmės poveikis CdSeTe saulės celių našumui / <i>Impact of carrier mobility and lifetime to polycrystalline CdSeTe solar cell efficiency</i>                                                                                                                                                                    |
| 15:30                                                                 | <b>Marius Maskoliūnas</b> , Vilniaus universitetas<br>Gravitacinis mikrolėšis – įrankis aptikti nematomus planetinės masės objektus / <i>Gravitational microlensing is a tool to detect invisible planetary-mass objects</i>                                                                                                                                                       | <b>Saulius Bagdonas</b> , Vilniaus universitetas<br>Tetrapiroliniai junginiai – radiosensibilizatoriai ir radioprotektoriai, jų taikymo vėžio terapijoje problematika ir ateities perspektyvos / <i>Tetrapyrrolic compounds – radiosensitizers and radioprotectors, issues of their application in cancer therapy and future prospects</i>                       | <b>Justinas Jorudas</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Lazerinio mikroapdirbimo taikymai GaN ir Ga2O3 puslaidininkių prietaisų gamyboje / <i>Additive processing of the GaN and Ga2O3 based semiconductor devices by Direct Laser Micromachining</i>                                                                                                                                 |
| 15:50                                                                 | <b>Bruno Čurjurić</b> , Vilniaus universitetas<br>[C/N] gausių santykiai padrikuosiuose spiečiuose kaip žvaigždžių amžiaus indikatoriai / <i>Tracing Stellar Ages from [C/N] Abundance Ratios in Open Clusters</i>                                                                                                                                                                 | <b>Simona Steponkienė</b> , Nacionalinis vėžio institutas<br>Mezenchiminių kamieninių ląstelių panaudojimas dendrimerinių nanoklasterių gabenimui į vėžines ląsteles / <i>Mesenchymal stem cells for the targeted delivery of dendrimer-based nanoclusters to cancer cells</i>                                                                                   | <b>Šarūnas Meškis</b> , Kauno technologijos universitetas<br>Tiesioginė grafeno sintezė ant SiO2 ir h-BN mikrobange plazma aktyvuoto cheminio nusodinimo iš garų fazės būdu ir taikymas lauko tranzistoriams bei fotodiodams / <i>Direct synthesis of graphene on SiO2 and h-BN by microwave plasma enhanced chemical vapor deposition for field-effect transistor and photodiode applications</i> |
| 16:10                                                                 | <b>Barkha Bale</b> , Vilniaus universitetas<br><i>Lithium and CNO Abundances in Chromospherically Active RS CVn Stars</i>                                                                                                                                                                                                                                                          | <b>Karolis Adomavičius</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Didelio pralaidumo erdvinė-laikinė optinė koherentinė tomografija / <i>High-throughput spatio-temporal optical coherence tomography</i>                                                                                                                                                  | <b>Vita Petrikaitė</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Terminis lazeriu indukuotas nanodalelių generavimas iš plonų titano-aukso dangų / <i>Thermal laser-induced generation of nanoparticles from thin titanium-gold films</i>                                                                                                                                                       |
| 16:30                                                                 | Kavos pertrauka / 1 aukšto Fojė                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|                                                                       | Žodinė sesija 4A (Astrofizika, astronomija ir kosmologija)<br>1 Salė. Pirmininkė: Gražina Tautvaišienė                                                                                                                                                                                                                                                                             | Žodinė sesija 4B (Nanomokslas ir nanotechnologijos)<br>2 Salė. Pirmininkas: Artūras Vailionis                                                                                                                                                                                                                                                                    | Žodinė sesija 4C (Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika),<br>3 Salė. Pirmininkas: Gediminas Račiukaitis                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| 16:50                                                                 | <b>Vladas Vansevičius</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Užgalaktinių atstumų tikslumas ir krizė kosmologijoje / <i>The accuracy of extragalactic distances and the crisis in cosmology</i>                                                                                                                                                                          | <b>Tomas Tamulevičius</b> , Kauno technologijos universitetas<br>Mašininio mokymo taikymai plazmoninių nanodalelių ekstinkcijos spektrų interpretavimui / <i>Applications of Machine Learning for Interpreting the Extinction Spectra of Plasmonic Nanoparticles</i>                                                                                             | <b>Vytautas Janonis</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Paviršinių plazmonų-fononų poliaritonų artimo lauko vaizdinimas legiruoto GaN puslaidininkio paviršiuje / <i>Near field imaging of surface plasmon phonon polaritons on the surface of doped GaN semiconductor</i>                                                                                                            |
| 17:10                                                                 | <b>Kastytis Zubovas</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Supermasyvių juodųjų skylių kilmė / <i>The origin of supermassive black holes</i>                                                                                                                                                                                                                             | <b>Domantas Peckus</b> , Kauno technologijos universitetas<br>Spyglių geometrijos įtaka linijinėms ir nelinijinėms optinėms auksinių nanoežių savybėms / <i>Spike geometry-dependent linear and nonlinear optical properties of gold nanourchins</i>                                                                                                             | <b>Evelina Dudutienė</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>GaAsBi/(Al,Ga)As kvantinių duobių atkaitinimo tyrimas / <i>Investigation of the annealing effect on GaAsBi/(Al,Ga)As quantum wells</i>                                                                                                                                                                                       |
| 17:30                                                                 | <b>Karolis Daugevičius</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>M31 disko žvaigždžių spiečių dydžio ir masės funkcijos evoliucija / <i>Evolution of star cluster size and mass function in the M31 disc</i>                                                                                                                                                                | <b>Virginijus Bukauskas</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Struktūros ir elektrinių savybių priklausomybė nuo augimo temperatūros PVD telūro nanostorio sluoksniuose / <i>Dependence of Structure and Electrical Properties on Growth Temperature in PVD Tellurium nano-thin Films</i>                                                             | <b>Aidas Mikalauskas</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Susitvarkiusių GaAsBi bisimidų dielektrinė funkcija: spektroskopinis elipsometrinis tyrimas / <i>Dielectric Function of Ordered GaAsBi Bismides: Spectroscopic Ellipsometry Study</i>                                                                                                                                        |
| 17:50                                                                 | <b>Erikas Cicėnas</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Automatinis žvaigždžių spiečių aptikimas galaktikų diskuose / <i>Automated Star Cluster Detection in the Disks of Galaxies</i>                                                                                                                                                                                  | <b>Kernius Vilkevičius</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Paviršiumi sustiprintos Ramano spektroskopijos platforma, pasižyminti kintama periodinių aukso nanodarinių morfologija / <i>Surface-enhanced Raman spectroscopy platform featuring variable morphology of periodic gold nanostructures</i>                                               | <b>Justas Žuvelis</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>AlGaAs barjerų dizaino įtaka InGaAs kvantinių duobių optinėms savybėms / <i>Influence of AlGaAs barrier design on the optical properties of InGaAs quantum wells</i>                                                                                                                                                            |
| 18:10                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | <b>Rodrigas Liudvinavičius</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Paviršiniai plazmonų rezonansai aukso ir sidabro mikrogumbelių gardelėse, suformuotuose plonose metalo dangose naudojant tiesioginį lazerinį rašymą / <i>Surface plasmon resonances in silver and gold bumps arrays fabricated in thin metallic films using direct laser writing</i> | <b>Karolina German</b> , Vilniaus universitetas<br>GaN sluoksnyje esančių dislokacijų sumažinimas auginant ant profiliuoto safyro padėklo / <i>Dislocations reduction in GaN layer grown on patterned sapphire substrate</i>                                                                                                                                                                       |
| 18:30 – 20:30                                                         | Konferencijos vakariinė / 1 aukšto Fojė                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |

# Spalio 10 d.

## Plenariniai-Kviestiniai pranešimai V

1 Salė. Pirmininkė: Diana Adlienė

|                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
|---------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 10:00               | Plenarinis pranešimas 9. <b>Juozas Vidas Gražulevičius</b> , Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Kauno technologijos universitetas<br>Organiniai puslaidininkiai optoelektronikos prietaisams bei optiniams jutikliams / <i>Organic semiconductors for the devices of optoelectronics and for optical sensors</i> |
| 10:35               | Kviestinis pranešimas 6. <b>Darius Abramavičius</b> , Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas<br>Optinių sužadinimų dinamika molekulių kompleksuose / <i>Dynamics of optical excitations in molecular complexes</i>                                                                       |
| 11:05               | Kviestinis pranešimas 7. <b>Aleksej Žarkov</b> , Vilniaus universitetas<br>Europio savaiminė redukcija fosfatinėse matricose / <i>Europium self-reduction in phosphate-based matrices</i>                                                                                                                                 |
| 11:35               | Kviestinis pranešimas 8. <b>Rokas Kondrotas</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Reaktyvaus atkaitinimo įtaka spindulinei rekombinacijai stibio selenido plonuose sluoksniuose / <i>The influence of reactive annealing for radiative recombination in antimony selenide thin films</i>                       |
| 12:05               | Kavos pertrauka / 1 aukšto Foje                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| 12:05<br>-<br>13:05 | <b>Stendinė sesija 3</b> / 1 aukšto Foje<br>Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos                                                                                                                                                                                                                       |

### Žodinė sesija 5A (Elektronika ir optoelektronika, Kvantinė optika ir kvantinė informacija) 1 Salė. Pirmininkas: Darius Abramavičius

### Žodinė sesija 5B (Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos) 2 Salė. Pirmininkas: Tomas Tamulevičius

### Žodinė sesija 5C (Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos; Energetikos fizika ir technologijos; Instrumentai ir matavimai) 3 Salė. Pirmininkė: Živilė Rutkūnienė

|       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 13:05 | <b>Roland Tomašiūnas</b> , Vilniaus universitetas<br>Didelės dielektrinės skvarbos $\text{HfO}_2$ , $\text{ZrO}_2$ , $\text{Ta}_2\text{O}_5$ , $\text{TiO}_2$ , $\text{Nb}_2\text{O}_5$ ir $\text{Y}_2\text{O}_3$ plėvelių tyrimas GaN MOS struktūrose / <i>Investigation of high-k <math>\text{HfO}_2</math>, <math>\text{ZrO}_2</math>, <math>\text{Ta}_2\text{O}_5</math>, <math>\text{TiO}_2</math>, <math>\text{Nb}_2\text{O}_5</math>, and <math>\text{Y}_2\text{O}_3</math> films on GaN MOS structures</i> | <b>Renata Butkutė</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>A3-B5-Bi kvantinių darinių inžinerija taikymams puslaidininkiniuose artimosios infraraudonosios srities šaltiniuose: technologiniai iššūkiai ir dizaino strategija / <i>Engineering of A3-B5-Bi quantum structures for applications in near infrared semiconductor sources: technological challenges and design strategies</i> | <b>Artūras Ulčinas</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Didelio ploto ir spartos atominių jėgų mikroskopija našiams paviršių tyrimams nanometrų lygmenyje / <i>Large area and high speed atomic force microscopy for high-throughput investigation of surfaces on the nanoscale</i> |
| 13:25 | <b>Jan Devenson</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Stibidų technologinės platformos su kvantinių kaskadų lazeriais ir plazmoniniais emiteriais kūrimas viduriniojo IR diapazono jutikliams / <i>Developing an Antimonide Technology Platform with Quantum Cascade Lasers and Plasmonic Emitters for Mid-Infrared Sensing</i>                                                                                                                                                                         | <b>Karolis Kazlauskas</b> , Vilniaus universitetas<br>Singuletinės generacijos valdymas tripletiniuose anihiliatoriuose siekiant efektyvesnės fotonų konversijos / <i>Tuning singlet yield in triplet-triplet annihilation for enhanced photon upconversion</i>                                                                                                                                   | <b>Robertas Virkėtis</b> , Vilniaus universitetas<br>Liuminescencinių YAG:Ce3+ 3D mikrostruktūrų lazerinis spausdinimas / <i>Laser Printing of Luminescent YAG:Ce3+ 3D Microstructures</i>                                                                                                      |
| 13:45 | <b>Julius Janušonis</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Siauro spektro kvantinių defektų kūrimas heksagoniniame boro nitride / <i>Manufacturing Narrowband Fluorescent Defects in Hexagonal Boron Nitride</i>                                                                                                                                                                                                                                                                                         | <b>Nerija Žurauskienė</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Hibridinis manganito-grafeno jutiklis magnetinio srauto tankio ir krypties matavimui / <i>Hybrid Manganite-Graphene Sensor for Measurement of Magnetic Flux Density Magnitude and Direction</i>                                                                                                                            | <b>Gediminas Usevičius</b> , Vilniaus universitetas<br>Planariniai superlaidūs YBCO mikrorezonatoriai didelio jautrumo elektronų sukinių rezonansui / <i>Superconducting YBCO planar microresonators for conventional high sensitivity ESR</i>                                                  |
| 14:05 | <b>Maxim Moscotin</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Didelio elektronų judrio tranzistorių su struktūriniais užtūros elektrodais taikymas terahercų spinduliuotės detekcijai / <i>Modified edge-gating geometry of high-electron-mobility transistors for terahertz detection</i>                                                                                                                                                                                                                    | <b>Alexandr Belosludtsev</b> , Fizinių ir technologijos mokslų centras<br>Daugiasluoksnių metalo-dielektrinių dangų kūrimas labai jautriems biologinėms sąveikoms jutikliams / <i>Development of multilayer metal-dielectric coating for highly sensitive biological interactions sensor</i>                                                                                                      | <b>Benas Gabrielis Urbonavičius</b> , Kauno technologijos universitetas<br>Vandenilis transporto: kodėl tai nėra klimato sprendimas / <i>Hydrogen in Transportation: Why it is Not a Climate Solution</i>                                                                                       |
| 14:25 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | <b>Zulfiqar Khalil</b> , Lietuvos energetikos institutas<br>Metalų hidridų susidarymo sferinėse struktūrose plėtra ir detali skaitmeninė hidrinimo proceso analizė / <i>The Development of Metal Hydrides formation on Spherical Structures and an In-Depth Numerical Analysis of the Hydrogenation Process</i>                                                                                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |

|                     |                                                                                                                                                                                                              |
|---------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 14:45               | Kavos pertrauka / 1 aukšto Foje                                                                                                                                                                              |
| 14:45<br>-<br>15:45 | <b>Stendinė sesija 4</b> / 1 aukšto Foje<br>Kvantinė optika ir kvantinė informacija, Elektronika ir optoelektronika, Energetikos fizika ir technologijos, Instrumentai ir matavimai, Technologiniai taikymai |

## Konferencijos uždarymas / 1 aukšto Foje

Organizatoriai:



FIZINIŲ IR  
TECHNOLOGIJOS  
MOKSLŲ  
CENTRAS



kauno  
technologijos  
universitetas



VILNIUS  
TECH  
Vilniaus Gedimino  
technikos universitetas



Rėmėjai:



SPEKTRA



inospectra



OPTOGAMA



LIGHT  
CONVERSION



LMT  
Lietuvos mokslo taryba

# Stendinių pranešimų sąrašas

## Stendinė sesija 1

Elementariųjų dalelių, atomų ir branduolių fizika, materijos sandara, Statistinė fizika, Teorinė ir skaičiuojamoji fizika, Cheminė fizika, Lazerių fizika ir šviesos technologijos, Fizikos istorija, terminija ir mokslo politika, Fizikos edukologija ir sklaida

## Trečiadienis, spalio 8 d., 13:10 - 14:10

|            |                                                                                                                                                                                                      |
|------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>T1</b>  | <b>Julius Ažukas</b> , Retinolio izomerų elektroninio sužadavimo energijų skaičiavimas moderniais teorinės chemijos metodais.                                                                        |
| <b>T2</b>  | <b>Romualdas Čepas</b> , Skersaryšiniai naftaleno diimido akceptoriai saulės elementams.                                                                                                             |
| <b>T3</b>  | <b>Vilius Čirgelis</b> , Špinelio ir perovskito nanodariniai kvantiniam skaidymui.                                                                                                                   |
| <b>T4</b>  | <b>Amina Elkady</b> , Tetrapeptido BMR spektrų ir struktūrinių savybių joninių skysčių ir vandens mišiniuose teorinis tyrimas.                                                                       |
| <b>T5</b>  | <b>Rokas Garbačauskas</b> , Transformerių neuroninių tinklų taikymas DFT molekulinė struktūrų optimizavimo skaičiavimams spartinti.                                                                  |
| <b>T6</b>  | <b>Jogilė Mačytė</b> , Sviesto rūgšties struktūrinė analizė teoriniu DFT ir eksperimentiniu matricinės izoliacijos FTIR spektriniu metodu.                                                           |
| <b>T7</b>  | <b>Benjaminas Malmiga</b> , Cholino glicinato joninio skysčio ir vandens mišinių struktūrinių parametrų modeliavimas molekulinės dinamikos metodais.                                                 |
| <b>T8</b>  | <b>Gabrielė Rankelytė</b> , Baltyminės aplinkos įtaka pigmentų sužadintosioms būsenoms fotosintetiniuose kompleksuose.                                                                               |
| <b>T9</b>  | <b>Paulius Rindzevičius</b> , Van der Valso sąveikos tarp resveratolio ir heksagoninio boro nitrido spektroskopinis tyrimas.                                                                         |
| <b>T10</b> | <b>Juozas Šulskus</b> , Karbamido vandens tirpalų modeliavimas kvantinėmis technologijoms.                                                                                                           |
| <b>T11</b> | <b>Martynas Zalieckas</b> , Daugiafunkciniai anglies pagrindo kvantiniai taškai aplinkosaugos ir medicinos taikymams.                                                                                |
| <b>T12</b> | <b>Neilas Beniušis</b> , $\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D^{*0} K^-$ skilimo klasifikavimas taikant mašininio mokymosi algoritmą XGBoost ir SHAP požymių svarbos analizę.                       |
| <b>T13</b> | <b>Eliza Holvoet</b> , TMVA ir giluminio neuroninio tinklo klasifikatorių, palyginimas signalo ir fono atskyrimui $\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D^{*0} K^-$ skilime LHCb eksperimente CERN'e. |
| <b>T14</b> | <b>Rasa Karpuškienė</b> , Teoriniai sudėtingų daugiakrūvių volframo jonų spinduliuotės spektrai.                                                                                                     |
| <b>T15</b> | <b>Mantas Kučinskas</b> , Antrosios eilės Relėjaus-Šrėdingerio trikdimų teorija GRASP2018 programiniame pakete: trijų dalelių Feinmano diagramos įtaka kamieno- valentinėms koreliacijoms.           |
| <b>T16</b> | <b>Meda Paulavičiūtė</b> , ECC metodo taikymas trūkstamo judesio kiekio $\Lambda_b$ barionų skilimuose atkūrimui.                                                                                    |
| <b>T17</b> | <b>Artūras Plukis</b> , Radioaktyviųjų metalinių atliekų lazerinis deaktivavimo technologijos.                                                                                                       |
| <b>T18</b> | <b>Kristupa Šeškauskaitė</b> , Mikrostruktūruota dujinė elektronų detektoriaus sistema rentgeno spindulių vaizdinimui.                                                                               |
| <b>T19</b> | <b>Aušra Kynienė</b> , $Kr^+$ jono jonizacijos elektronais tyrimas.                                                                                                                                  |
| <b>T20</b> | <b>Eimantas Ledinauskas</b> , Quantum Robustness of the Toric Code via Multi-State Neural Quantum States.                                                                                            |
| <b>T21</b> | <b>Darius Likandrovas</b> , Branduolių rezonansinių būsenų parametrinė evoliucija.                                                                                                                   |
| <b>T22</b> | <b>Austėja Mikalčiūtė</b> , Pilnas eksitoninis hamiltonianas fotosintetiniams šviesorankos kompleksams.                                                                                              |
| <b>T23</b> | <b>Viktoras Pyragas</b> , Neuroninių populiacijų suvidurkinti modeliai su Gausiniu triukšmu ir ne Koši Heterogeniškumu.                                                                              |
| <b>T24</b> | <b>Tatjana Pyragienė</b> , Mašininio mokymosi modelių kūrimas prognozuojančiai chaoso sinchronizacijai.                                                                                              |
| <b>T25</b> | <b>Irmantas Ratas</b> , Chaotinių sistemų prognozavimas iš dalinių stebėjimų naudojant naujos kartos rezervuarinius skaičiavimus.                                                                    |
| <b>T26</b> | <b>Augustinas Stepšys</b> , Harmoninio osciliatoriaus skliausteliai $SU(3)$ bazėje.                                                                                                                  |

|            |                                                                                                                                                                                    |
|------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>T27</b> | <b>Justina Vaičiaitė</b> , Kvantinio dimero atvaizdavimas sukabintais klasikiniais osciliatoriais.                                                                                 |
| <b>T28</b> | <b>Aleksejus Kononovičius</b> , Netriviali dinamika rinkejo modelyje su periodine sąveika.                                                                                         |
| <b>T29</b> | <b>Andrius Juodagalvis</b> , Studentų supažindinimas su eksperimentinės dalelių fizikos iššūkiais.                                                                                 |
| <b>T30</b> | <b>Šarūnas Mikolaitis</b> , EAAE ir NASE: Astronomijos švietimo Europoje peržūra.                                                                                                  |
| <b>T31</b> | <b>Ignas Bitinaitis</b> , Investigation of silver-aluminium mixed mirrors for space applications.                                                                                  |
| <b>T32</b> | <b>Martynas Keršys</b> , ISO protokolų tobulinimas lazerine spinduliuote sukeltos pažaidos vertinimui: testavimo metodų lyginamoji analizė ir įžvalgos iš Monte Karlo simuliacijų. |
| <b>T33</b> | <b>Anton Koroliov</b> , Rentgeno spindulių generavimas panaudojant 2 $\mu\text{m}$ femtosekundinius lazerio impulsus.                                                              |
| <b>T34</b> | <b>Abdul Mannan Majeed</b> , Polymer additive engineering for the optimized Zn-alloyed perovskite distributed feedback lasers.                                                     |
| <b>T35</b> | <b>Neda Mažeikytė</b> , Stiklo suvirinimas ultratrumpų impulsų lazerio papliūpomis.                                                                                                |
| <b>T36</b> | <b>Marijus Mozdeikis</b> , Plazmoninės difrakcinės gardelės formavimas ant ITO padėklo naudojant tiesioginį lazerinį rašymą.                                                       |
| <b>T37</b> | <b>Rugilė Pečiulytė</b> , Priverstinės Briliueno sklaidos lazerio impulsų spaustuvas naudojant HT-230 skystį.                                                                      |
| <b>T38</b> | <b>Ignas Pikas</b> , Optimizuoto optinio fazės poslinkio UV veidrodžiai sudaryti iš standartinių ir nanostruktūrizuotų sluoksnių.                                                  |
| <b>T39</b> | <b>Aivaras Špokas</b> , GaAsBi puslaidininkinių emitterių epitaksija ir prietaisų dizaino optimizavimas.                                                                           |
| <b>T40</b> | <b>Titas Tamošauskas</b> , Lazeriu nusodintų elektrodų ir elektrochrominių plonų dangų kombinacija išmaniųjų langų taikymams.                                                      |

## Stendinė sesija 2

Astrofizika, astronomija ir kosmologija, Aplinkos fizika, Biofizika ir medicinos fizika, Nanomokslas ir nanotechnologijos, Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika

**Ketvirtadienis, spalio 9 d., 13:10 - 14:10**

|            |                                                                                                                                                                     |
|------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>K1</b>  | <b>Dmitrij Semionov</b> , Jaunų padrikųjų spiečių dinaminės istorijos tyrimas.                                                                                      |
| <b>K2</b>  | <b>Matas Tartėnas</b> , Paprasti sąryšiai sudėtingose AGN tėkmėse: M- $\sigma$ sąryšio atsiradimas realistiškuose galaktikų centriniuose telkiniuose.               |
| <b>K3</b>  | <b>Milda Valytė</b> , Ar kosmologiniai modeliai atkuria stebimas galaktines tėkmes?                                                                                 |
| <b>K4</b>  | <b>Carlos Viscasillas Vázquez</b> , Paukščių Tako vidinių vijų atšakas naudojant žvaigždžių cheminę sudėtį.                                                         |
| <b>K5</b>  | <b>Ireneuš Bezručkinas-Nadtočij</b> , Grunto bandinių beta spinduliuotės tyrimas SBT-13 detektoriumi.                                                               |
| <b>K6</b>  | <b>Evaldas Maceika</b> , $^{14}\text{C}$ išmetimų į atmosferą iš Ignalinos AE vertinimas, panaudojant valandinius radioanglies matavimus pažemės ore prie IAE.      |
| <b>K7</b>  | <b>Agnė Mašalaitė</b> , Organinių aerozolių izotopinės kompozicijos tyrimas siekiant nustatyti fotocheminių senėjimo reakcijų poveikį.                              |
| <b>K8</b>  | <b>Tomas Stonkus</b> , Characterization and Distribution of Airborne Microplastic Particles in Lithuanian School Environments.                                      |
| <b>K9</b>  | <b>Sonata Adomavičiūtė-Grabusovė</b> , Paviršiaus sustiprintos Ramano spektroskopijos taikymas smegenų skysčio bandinių tyrimui.                                    |
| <b>K10</b> | <b>Shirin Arslonova</b> , Greitųjų neutronų silpimo 3D spausdintuose ABS kompozituose tyrimas.                                                                      |
| <b>K11</b> | <b>Alėja Marija Daugėlaitė</b> , Doksorubicinu ir indocianino žaliuoju pakrautų dendrimerų pasiskirstymo organizme ir fototoksiškumo tyrimas pelių navikų modelyje. |
| <b>K12</b> | <b>Irma Dumbrytė</b> , Neardomojo dantų mikroįtrūkimų vaizdinimo galimybių išplėtimas: multispektrinis metodas.                                                     |
| <b>K13</b> | <b>Tadas Jelinskas</b> , Jėgos spektrometrijos taikymas tiriant mikrogravitacijos poveikį audinių modeliams.                                                        |
| <b>K14</b> | <b>Džiugas Jurgutis</b> , Laisvo ir inkapsuliuoto dendrimeruose doksorubicino kaupimosi tyrimai mezenchiminėse kamieninėse ląstelėse.                               |
| <b>K15</b> | <b>Greta Karpavičienė</b> , Spindulinės terapijos tikslumas esant skirtingam atsakui į gydymą.                                                                      |
| <b>K16</b> | <b>Kotryna Naujokaitė</b> , The impact of propofol on the functional activity of vascular Cx37 channels.                                                            |
| <b>K17</b> | <b>Elena Osteikaitė</b> , Gimdos kaklelio vėžio tyrimas netiesinės mikroskopijos ir statistinės analizės metodais.                                                  |
| <b>K18</b> | <b>Augustė Paciukonytė</b> , CdTe ir CdSe/ZnS kvantinių taškų neigiamo poveikio vienalaščiams dumbliams slopinimas antioksidantais.                                 |
| <b>K19</b> | <b>Emilė Pečiukaitytė</b> , PAMAM dendrimerų nanoklasteriai: sintezė, savybės ir taikymo perspektyvos fototerapijoje.                                               |
| <b>K20</b> | <b>Andrius Puzas</b> , Ilgaamžių dirbtinių radionuklidų erdvinis pasiskirstymas ir nevienalytiškumas Lietuvoje.                                                     |
| <b>K21</b> | <b>Jekaterina Skibickaja</b> , Mezenchiminių kamieninių ląstelių formos ir dydžio įtaka plazminės membranos ir lipidinių lašelių mikrokloppai.                      |
| <b>K22</b> | <b>Simona Streckaitė</b> , Molekuliniai ir membraniniai greito fotosintezės atsistatymo po rehidratacijos mechanizmai dykumos samanoje.                             |
| <b>K23</b> | <b>Skaistė Talanovaitė</b> , Doksorubicino fluorescencinės savybės: laisvos formos ir dendrimerinėse dalelėse inkapsuliuoto doksorubicino palyginimas.              |
| <b>K24</b> | <b>Greta Tamoliūnaitė</b> , Neutralioje vandeninėje terpėje susidariusių TPPS4 agregatų fluorescencinių savybių tyrimai.                                            |
| <b>K25</b> | <b>Erikas Tarvydas</b> , Aukštos raiškos dinaminė optinė koherentinė mikroskopija.                                                                                  |
| <b>K26</b> | <b>Dominyka Vienažindytė</b> , Netiesinė optinė mikroskopija įvairiai dažytiems histologiniams audiniams.                                                           |
| <b>K27</b> | <b>Patricija Žemaitytė</b> , Mašininio mokymosi pagrindu atlikta Syntrichia caninervis hiperspektrinių vaizdų analizė dehidratacijos/rehidratacijos sąlygomis.      |
| <b>K28</b> | <b>Linas Ardaravičius</b> , Karštųjų elektronų pernašos savybių tyrimai GaN dariniuose stipriame elektriniame lauke.                                                |
| <b>K29</b> | <b>Margarita Biveinytė</b> , Iškaitinimų nulemti elektrinių charakteristikų pokyčiai silicio dalelių sensoriuose su vidiniu stiprinimu.                             |

|            |                                                                                                                                                              |
|------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>K30</b> | <b>Faustina Kiaušaitė</b> , p-tipo silicio mažo stiprinimo lavinės detektorių (LGAD) spinduliuotės atsparumo tyrimai aukštos energijos fizikai.              |
| <b>K31</b> | <b>Oleg Kiprijanovič</b> , Judančios S-N ribos būsenos apibrėžimas YBaCuO plonų sluoksnių impulsinio S-N perjungimo metu.                                    |
| <b>K32</b> | <b>Giedrė Kuktaitytė</b> , CsPbCl <sub>3</sub> : Yb <sup>3+</sup> structural analysis using HYSCORE spectroscopy.                                            |
| <b>K33</b> | <b>Oleksandr Masalskyi</b> , Karštųjų krūvininkų fotosrovė - papildomi saulės elementų nuostoliai.                                                           |
| <b>K34</b> | <b>Mantas Migauskas</b> , Daugiamatis InGaN V defektų charakterizavimas.                                                                                     |
| <b>K35</b> | <b>Gabija Soltanaitė</b> , Laikinės skyros katodoluminescencija nitridinių junginių V defektuose.                                                            |
| <b>K36</b> | <b>Mykolas Strigūnas</b> , X-defektas ir B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> radiaciniai defektai p tipo silicyje: lyginamasis tyrimas dalelių jutiklių taikymams. |
| <b>K37</b> | <b>Dovilė Vasiliauskaitė</b> , Naujų medžiagų tyrimas perovskitiniuose saulės elementuose taikant kinetinio fotolaidumo metodą.                              |
| <b>K38</b> | <b>Frydrichas Mireckas</b> , Hibridinių kompozitų su anglies ir metalo nanodalelių užpildais žemo dažnio triukšmas.                                          |
| <b>K39</b> | <b>Hasan Sarigul</b> , Anizotropinių aukso nanodalelių masyvų konfigūracijos parinkimas SERS padėklams skirtiems nanoplastikų aptikimui.                     |

## Stendinė sesija 3

Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos

**Penktadienis, spalio 10 d., 11:15 - 12:15**

|            |                                                                                                                                                                                                   |
|------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>P1</b>  | <b>Darius Antonovič</b> , Tunelinių reiškinų magnetinėse nanostruktūrose valdymas magnetiniu lauku.                                                                                               |
| <b>P2</b>  | <b>Ugnė Balčiūnaitė</b> , Metalinių priemaišų (Ni, Nb, Co, Cr) įtaka ferolektrinėms $\text{Pb}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ savybėms.                                                                  |
| <b>P3</b>  | <b>Paula Baltaševičiūtė</b> , Krūvininkų pernašos dinamika 2D ir 3D perovskituose.                                                                                                                |
| <b>P4</b>  | <b>Domantas Berenis</b> , Didelės tripletinių eksitonų energijos medžiagos su dibenzofurano ir dihidrobenzodioksino grupėmis mėlyniams TADF organiniams šviestukams.                              |
| <b>P5</b>  | <b>Manvydas Dapkevičius</b> , Singuletinio eksitono susidarymo tikimybės nustatymas tripleto-tripleto anihiliacijos metu modeliniuose fotonų konversijos junginiuose.                             |
| <b>P6</b>  | <b>Saulius Daugėla</b> , Mišrios YSZ ir GDC keramikos impedanso spektroskopijos analizė.                                                                                                          |
| <b>P7</b>  | <b>Goda Grybauskaitė</b> , Dibenzofurano pagrindu paremtų matricos medžiagų pritaikymas mėlyniams trečios kartos šiluma aktyvuojamos uždelstosios fluorescencijos (TADF) organiniams šviestukams. |
| <b>P8</b>  | <b>Mindaugas Ilickas</b> , PVB/ZnO-T/NaPT nanokompozitinių dangų fizinių ir antimikrobinių savybių analizė.                                                                                       |
| <b>P9</b>  | <b>Mikas Paulius Iršėnas</b> , Polimerinių scintiliuojančių šviesolaidžių optinių ir mechaninių savybių tyrimas naudojant konfokalinę ir atominės jėgos mikroskopiją.                             |
| <b>P10</b> | <b>Gerarda Jocyte</b> , $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ energijos juostų suderinamumas su įvairiais elektronų ištraukimo sluoksniais, naudojant fotoelektronų spektroskopiją.                            |
| <b>P11</b> | <b>Martynas Kinka</b> , PEBA/UIO-66 kompozitų paviršinio krūvio dydžio ir poliškumo valdymas.                                                                                                     |
| <b>P12</b> | <b>Augustas Koklevičius</b> , Lanksti daugiasluoksnė tekstilės struktūra su metapaviršiumi elektromagnetinių bangų atspindžiui mažinti.                                                           |
| <b>P13</b> | <b>Ignas Ledzinskas</b> , Overshoot pulses in perovskite light emitting diodes. The role of operation conditions.                                                                                 |
| <b>P14</b> | <b>Justas Lekavičius</b> , Nekoherentinė fotonų konversija naujuose monomeriniame ir heksameriniame TIPS-antraceno junginiuose.                                                                   |
| <b>P15</b> | <b>Andrejus Litvakas</b> , Bismuto ferito plonų plėvelių, gautų reaktyviuoju magnetroniniu ko-purškimu, optinių savybių nustatymo metodų lyginamoji analizė.                                      |
| <b>P16</b> | <b>Žygimantas Logminas</b> , Fosfatais klijuotų keramikų tankinimas.                                                                                                                              |
| <b>P17</b> | <b>Liutauras Marcinauskas</b> , Užpildų rūšies poveikis $\text{Cr}_2\text{O}_3$ kompozito dangų tribologinėms savybėms.                                                                           |
| <b>P18</b> | <b>Eglė Martinaitytė</b> , NBT-BT plonųjų sluoksnių auginimas lazerinio nusodinimo metodu.                                                                                                        |
| <b>P19</b> | <b>Edita Palaimienė</b> , 3D spausdintų CNT/ $\text{BaTiO}_3$ kompozitų dielektrinės ir elektromagnetinių bangų sugerties savybės.                                                                |
| <b>P20</b> | <b>Pavel Piatrou</b> , Magnetinio lauko dinamika magnetinio impulsinio suvirinimo procese.                                                                                                        |
| <b>P21</b> | <b>Oskars Platnieks</b> , Sidabru ir titanu legiruotų deimanto-tipo anglies dangų savybių tyrimas.                                                                                                |
| <b>P22</b> | <b>Giedrius Puidokas</b> , Aukštos tripletinės energijos krūvio pernašos matricų paieška stabiliems mėlynosios srities TADF-OLED prietaisams.                                                     |
| <b>P23</b> | <b>Gabrielius Rimkus</b> , B vietos katijonų maišymo įtaka $\text{MAPb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Br}_3$ hibridinių perovskitų faziniams virsmams ir dielektrinėms savybėms.                          |
| <b>P24</b> | <b>Arnoldas Solovjovas</b> , Kristalo kokybė už stiklo gamybos kainą: ceriu aktyvuoti granatai amorfiniame kvarce.                                                                                |
| <b>P25</b> | <b>Mantas Sriubas</b> , Ni/SDC anodų sintezė naudojant porų formuotojus.                                                                                                                          |
| <b>P26</b> | <b>Gabrielius Stankus</b> , Metalų druskų priemaišų įtaka spalvinių apšvitos indikatorių jautrumui.                                                                                               |
| <b>P27</b> | <b>Tomas Šalkus</b> , $\text{A}_{0.33}\text{BO}_3$ (A – La, Nd, Per, Gd; B – Ta, Nb) perovskitų elektrinių ir elektromechaninių savybių tyrimas.                                                  |
| <b>P28</b> | <b>Aistė Štaupienė</b> , GaAsBi QW emisijos intensyvumo stiprinimas panaudojant AlGaAs gradientinius barjerus bei struktūrų atkaitinimą.                                                          |
| <b>P29</b> | <b>Marius Treideris</b> , Molibdeno disulfido vienalytės sandūros formavimas lazeriu.                                                                                                             |
| <b>P30</b> | <b>Reda Venskauskaitė</b> , Development of 3D-Printed Materials Mimicking Biologically Equivalent Tissues for Use under High-Energy X-ray Photons Irradiation.                                    |
| <b>P31</b> | <b>Titas Chimičius</b> , Kobalto įtaka plonasluoksnių geležies oksido dangų sintezei, struktūrai ir elektrocheminėms savybėms.                                                                    |

## Stendinė sesija 4

Kvantinė optika ir kvantinė informacija, Elektronika ir optoelektronika, Energetikos fizika ir technologijos, Instrumentai ir matavimai, Technologiniai taikymai

**Penktadienis, spalio 10 d., 13:55 - 14:55**

|            |                                                                                                                                                                                                   |
|------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>P32</b> | <b>Saulius Alminas</b> , Sintetinis Menamas Magnetinis Laukas itin šaltiems atomams.                                                                                                              |
| <b>P33</b> | <b>Tadas Paulauskas</b> , Vienfotoniai šaltiniai hBN medžiagoje kvantinių ryšių taikymams.                                                                                                        |
| <b>P34</b> | <b>Vakaris Šilys</b> , Magnetinio lauko kvantinių jutiklių optimizavimas.                                                                                                                         |
| <b>P35</b> | <b>Justinas Turcak</b> , Atominio vandenilio kubitų molekuliname narvelyje EPR tyrimai.                                                                                                           |
| <b>P36</b> | <b>Maksimas Anbinderis</b> , Lokaluotos harmoninės emisijos CMOS sub-THz šaltinyje tyrimas AFM ir SNOM metodais.                                                                                  |
| <b>P37</b> | <b>Simonas Driukas</b> , THz srities metalėšiai pagaminti naudojant laidžius polimerus.                                                                                                           |
| <b>P38</b> | <b>Karolis Galvanauskas</b> , Derinamų InAsSb ir T2SL heterostrukturų taikymas ilgbangės infraraudonosios spinduliuotės aptikimui.                                                                |
| <b>P39</b> | <b>Ingrida Pliaterytė</b> , Grafeno/h-BN/Si sandūrų žemadažnio triukšmo charakteristikos.                                                                                                         |
| <b>P40</b> | <b>Sandra Pralgauskaitė</b> , Artimojo infraraudonojo spektro spinduliuotės šaltinių su GaAsBi kvantinėmis duobėmis žemo dažnio triukšmo charakteristikos.                                        |
| <b>P41</b> | <b>Kasparas Stanaitis</b> , THz vaizdinimo kokybės priklausomybė nuo Gauso, Beselio ir Airy lęšių kombinacijų.                                                                                    |
| <b>P42</b> | <b>Andrej Vedernikov</b> , GeS kristalinių plonų sluoksnių formavimas optoelektronikos prietaisams.                                                                                               |
| <b>P43</b> | <b>Domantas Vizbaras</b> , Sub-terahercinis jutiklio su KMOP šaltiniu taikymas tirpalų koncentracijų nustatymui.                                                                                  |
| <b>P44</b> | <b>Andrea Zelioli</b> , InGaAs ir GaAsBi MQW VECSEL tipo lazeriai skirti 976 nm ir 1070 nm emisijai.                                                                                              |
| <b>P45</b> | <b>Tautvilas Breivė</b> , Trinario puslaidininkio ZnIn <sub>2</sub> S <sub>4</sub> sluoksnių sintezė ir savybių tyrimas.                                                                          |
| <b>P46</b> | <b>Žydrūnas Kavaliauskas</b> , Plonasluoksnių termoelektrinio generatoriaus (Bi-Ni) gamyba naudojant magnetroninio dulkinimo technologiją ir tyrimai.                                             |
| <b>P47</b> | <b>Pijus Kuliavas</b> , Sb <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> užuomazginių sluoksnių formavimas sparčios selenizacijos būdu iš metalinio stibio sluoksnelių.                                            |
| <b>P48</b> | <b>Kristina Mikalauskienė</b> , Gama spektrometrinio metodo taikymas radioaktyviųjų atliekų paviršiaus ir tūrio aktyvumui nustatyti in-situ naudojant CeBr <sub>3</sub> scintiliacinį detektorių. |
| <b>P49</b> | <b>Rita Plukienė</b> , Gama spektrometrinio metodo paremto Komptono-pilnos sugerties smailės santykiu taikymas metalinių atliekų charakterizavimui taikant lazerinį deaktyvavimą.                 |
| <b>P50</b> | <b>Darius Virbukas</b> , SDC plonasluoksnių keramikų elektrinių savybių tyrimas.                                                                                                                  |
| <b>P51</b> | <b>Arūnas Gudelis</b> , Trečiasis tarplaboratorinis radionuklidų kalibratorių palyginimas EURAMET.RI(II)-S9.                                                                                      |
| <b>P52</b> | <b>Aistė Peštenytė</b> , Purcelio efektu sustiprintos sukinio kubito relaksacijos modeliavimas esant stipriai nehomogeniškai sukinio–rezonatoriaus sąveikai.                                      |
| <b>P53</b> | <b>Ignas Pocius</b> , Superlaidžių planarinių mikrorezonatorių modeliavimas bei taikymas aukšto jautrumo EPR spektroskopijai.                                                                     |
| <b>P54</b> | <b>Aleksandras Iljinas</b> , Talpinių jutiklių sistemos skirtos vandens nuotekų valymo procesui kontroliuoti sukūrimas ir tyrimai.                                                                |
| <b>P55</b> | <b>Vilius Žalėnas</b> , Sintiliaciniams detektoriams su signalo formavimu skirta duomenų apdorojimo ir analizės realiojo laiko sistema.                                                           |
| <b>P56</b> | <b>Justina Žemgulytė</b> , Dielektrinės rezonansinės antenos, pagamintos iš perovskito–ilmenito medžiagų su magnio nestechiometrija.                                                              |
| <b>P57</b> | <b>Rokas Dobužinskas</b> , Pageidaujama orientacija ir sisteminis stilbeno rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) smailių gesinimas.                                                                |

## **Plenariniai pranešimai**

# Nanofabrication using focused electron and ion beams

José María De Teresa<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (INMA), CSIC-Universidad de Zaragoza, Zaragoza, Spain  
[deteresa@unizar.es](mailto:deteresa@unizar.es)

In this talk, I will review the results obtained by the Nanomidas group at INMA in the topic of nanofabrication using focused electron and ion beams, as well as its application to various topics in Physics and Materials Science. Focused electron beams are produced in a Scanning Electron Microscope (SEM) and are mainly used for imaging or for electron beam lithography, whereas the Focused Ion beam (FIB) is mostly popular for nanopatterning via the local removal of material [1, 2]. Interestingly, if one combines focused electron or ion beams with a precursor material, a local deposit can be grown, and the techniques are respectively named Focused Electron Beam Induced Deposition (FEBID) and Focused Ion Beam Induced Deposition (FIBID). The talk will describe the fundamentals of these techniques and a few examples of application in the fields of Magnetism, Superconductivity, Quantum Technologies and Nanoelectronics.

One of such examples to be discussed is the growth of ultra-sharp tips on cantilevers by FEBID, with applications in Atomic Force Microscopy (AFM) and Magnetic Force Microscopy (MFM). In AFM, these FEBID nanotips are used to image biomolecules in liquid environment with a very high spatial resolution, whereas in MFM, the FEBID nanotips are utilized not only for their very high spatial resolution, but also for their great performance to image the magnetic textures of soft magnetic materials. In Figure 1, one of these nanotips is shown, together with some MFM measurements [3].

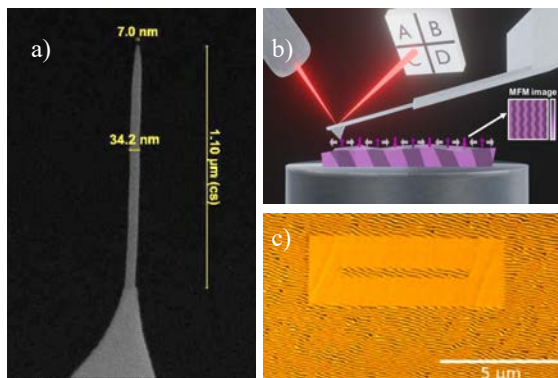


Fig. 1. a) An Fe nanotip for MFM, grown by FEBID using the  $\text{Fe}_2(\text{CO})_9$  precursor, b) sketch of an MFM measurement, with the nanotip probing the magnetic state of a thin film, c) imaging of magnetic domains of a  $\text{NdCo}_5$  thin film with perpendicular magnetic anisotropy (black and white contrast).  $\text{He}^+$  irradiation performed with a Helium Ion Microscope on rectangular areas has locally changed the magnetic anisotropy, and those areas appear white due to the fact that the magnetization lies in the film plane.

As is shown in Figure 2, FIB can be used for several purposes such as FIB milling for material removal, FIB-induced exposure of resists for lithography, FIBID for the growth of functional materials, and FIB irradiation for the local change of physical properties of materials.

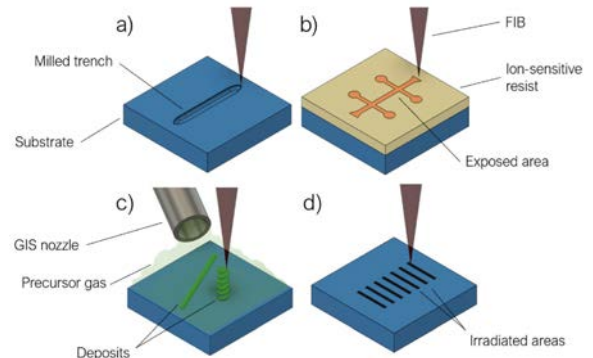


Fig. 2. Nanofabrication techniques using a focused ion beam (FIB) include: a) FIB milling, b) FIB lithography, c) FIB-induced deposition, d) FIB irradiation

By means of FIBID, we have grown superconducting nanostructures such as the W-C nanohelix shown in Figure 3a), with anomalous magnetotransport properties [4]. Moreover,  $\text{Ga}^+$ -FIB irradiation of Palladium Acetate thin films gives rise to conductive Pd-enriched structures [5], such as those shown in Figure 3b).

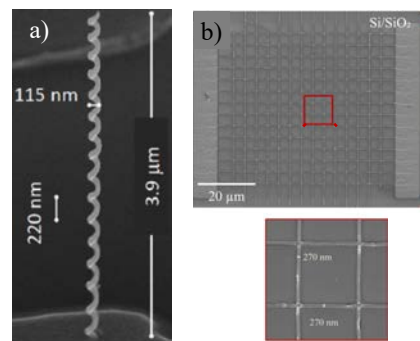


Fig. 3. a) W-C superconducting nanohelix, b) Pd-enriched structure to provide electrical conduction.

**Keywords:** nanofabrication, focused ion beam, focused electron beam induced deposition, lithography

## References

- [1] Nanofabrication, book edited by J. M. De Teresa, IOP (2020), <https://iopscience.iop.org/book/edit/978-0-7503-2608-7>
- [2] K. Höflich et al., Appl. Phys. Rev. **10**, 041311 (2023).
- [3] A. T. Escalante-Quiceno et al., Low Temp. Phys. **50**, 825 (2004).
- [4] R. Córdoba et al., Nano Letters. **19**, 8597 (2019).
- [5] A. Salvador-Porroche et al, ACS Appl. Mater. & Inter. **14**, 28211 (2022).

# Šaltųjų atomų valdymas šviesos pluoštais

## Optical control of ultracold atoms

Gediminas Juzeliūnas<sup>1</sup>, Domantas Burba<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Fizikos Fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio g. 3, LT-10257 Vilnius  
gediminas.juzeliunas@tfai.vu.lt

Labai šalti atomai yra perspektyvūs kvantinėms simuliacijoms, įgalinančioms giliau suprasti atitinkamas kondensuotų medžiagų savybes [1,2], taip pat taikymams tikslių matavimų srityje [3]. Didelė pažanga simuliuojant kondensuotų medžiagų reiškinius buvo pasiekta šaltuosius atomus paveikiant tinkamai parinktais šviesos pluoštais. Tačiau šaltieji atomai yra elektriškai neutralūs ir magnetiniame lauke jų neveikia Lorencio jėga. Todėl iškyla problema kaip šaltaisiais atomais simuliuoti kondensuotoms sistemoms būdingus magnetinius reiškinius, tokius kaip kvantinis Holo efektas. Panaudojant šviesa sukeltus šuolius tarp atomo kvantinių būsenų, buvo pasiūlyta ir ištirta keletas būdų kaip sukurti šaltuosius atomus veikiantį dirbtinį magnetinį lauką [4,5]. Daugeliu šių metodų galima suformuoti tik santykinai nestiprų dirbtinį magnetinį lauką, o magnetiniams reiškiniams tokiems kaip kvantinis Holo efektas reikalingas stiprus magnetinis laukas. Neseniai buvo pasiūlytas ir ištirtas naujas būdas kaip šviesos pluoštais galima sukurti stiprų ir pakankamai vienalytį magnetinį lauką, reikalingą simuliuoti kvantinį Holo efektą [6].

Kita vertus, charakteringi atstumai, kuriais keičiasi optinių gardelių potencialai, yra apriboti difrakcijos, todėl negali būti mažesni nei pusė optinio bangos ilgio. Tai riboja atomų judėjimo greitį gardelėje ir sąveikos tarp atomų stiprumą. Neseniai pasirodė keletas pasiūlymų ir atlikti atitinkami eksperimentai kaip sukurti optines gardelės, kurių periodas yra mažesnis negu leidžia difrakcija [7-13]. Šios gardelės remiasi koherentiniais lazerio spinduliuotės sukeltais šuoliais tarp atomų vidinių būsenų ir todėl nėra apribotos difrakcijos. Mažesnio negu leidžia difrakcija periodo gardelės yra ypač įdomios realizuojant stipriai sąveikaujančias daugelio atomų sistemas, nes atominės sąveikos stiprumas didėja mažinant atstumus tarp gardelės mazgų.

Pranešime bus pirmiausiai apžvelgiami šaltieji atomai ir jų savybės, dirbtinio magnetinio lauko sukūrimo šaltiesiems atomams būdai, optinės gardelės ir difrakcijos sukelti apribojimai. Paskui bus kalbama apie mūsų atliekamus tyrimus simuliuojant šaltiesiems atomams dirbtinį magnetinį lauką [6] bei tiriant mažesnio negu bangos ilgis periodo optinių gardelių savybes [13]. Tyrimai aktualūs atomtronikai bei emuliuojant kondensuotųjų sistemų efektus, o konkrečiai – sveikąjį bei trupmeninį kvantinius Holo efektus.

*Reikšminiai žodžiai: šaltieji atomai, optinės gardelės, dirbtinis magnetinis laukas.*

### Literatūra

- [1] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. 80, 885 (2008).
- [2] C. Gross and I. Bloch, Science 357, 995 (2017).
- [3] L. Pezze, A. Smerzi, M. K. Oberthaler, R. Schmied, and P. Treutlein, Rev. Mod. Phys. 90, 035005 (2018).
- [4] N. Goldman, G. Juzeliūnas, P. Öhberg and I. B. Spielman, Rep. Prog. Phys. 77, 126401 (2014).
- [5] V. Galitski, G. Juzeliūnas and I. B. Spielman, Physics Today 72(1), 38 (2019).
- [6] D. Burba and G. Juzeliūnas, arXiv:2506.17096 (2025).
- [7] Y. Wang et al, Phys. Rev. Lett. 120, 083601 (2018).
- [8] T.-C. Tsui et al, Phys. Rev. A 101, 041603 (2020).
- [9] R. P. Anderson et al., Phys. Rev. Research 2, 013149 (2020).
- [10] E. Gvozdiavas, P. Račkauskas and G. Juzeliūnas, SciPost Phys. 11, 100 (2021).
- [11] P. Kubala, J. Zakrzewski and M. Łącki, Phys. Rev. A 104, 053312 (2021).
- [12] D. Burba, M. Račiūnas, I. B. Spielman and G. Juzeliūnas, Phys. Rev. A 107, 023309 (2023).
- [13] D. Burba, G. Juzeliūnas, I. B. Spielman & L. Barbiero, Communications Physics 8, 141 (2025).

# Ekstremalioji šviesa: generavimo principai, eksperimentinis įgyvendinimas ir taikymai

## Extreme light: basic principles, experimental implementation and applications

Arūnas Varanavičius

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-2040 Vilnius  
[arunas.varanavicius@ff.vu.lt](mailto:arunas.varanavicius@ff.vu.lt)

Ekstremalioji šviesa - tai palyginti neseniai pradėtas naudoti terminas apibūdinantis lazeriais generuojamus išskirtinių parametų šviesos darinius. Šia terminas dažniausiai vartojamas kai kalbama apie ypač didelės energijos ar galios impulsus, itin trumpus taip vadinamus kelių optinių ciklų šviesos banginius paketus, koherentinę spinduliuotę vakuuminio ultravioleto ar Rentgeno diapazonuose. Ekstremalios šviesos technologijų kūrimas bei tobulinimas yra viena ryškiausių dabartinių fizikinių tyrimų kryptų. Lazeriniai šviesos šaltiniai spinduliuojantys tokių išskirtinių parametų šviesą tampa ypatingos svarbos eksperimentine įranga reikalinga įvairiausiems proveržio tyrimams fizikoje, chemijoje, medžiagų moksle, biomedicinoje ir kt. Neatsitiktinai per pastaruosius 7 metus net dvi Nobelio premijos buvo skirtos už ekstremaliosios šviesos šaltinių kūrimą ir jų taikymus atosekundžių moksle.

Šiame pranešime apžvelgsiu Lietuvos mokslininkų darbus pelniusius platų tarptautinį pripažinimą kuriant ekstremaliosios šviesos šaltinius. Dar 1992 Vilniaus universiteto mokslininkai vadovaujami prof. A. Piskarsko pasiūlė ir pademonstravo originalų optinio čirpuotų impulsų parametrinio stiprinimo metodą, kuris dabar įvardijamas kaip OPCPA (angl. optical parametric chirped pulses amplification) ir kuris ilgainiui tapo daugumos galingų itin trumpų impulsų lazerinių sistemų architektūros pagrindu. Šio metodo esmė – itin plataus spektro užkrato signalas yra išplečiamas laike, pastiprinamas parametriniuose stiprintuvuose pasižyminčiuose labai plačia spektrine stiprinimo juosta ir po to spaudžiamas tūkstančius kartu iki ribinių signalo spektrą atitinkančių trukmių. Tačiau pilną metodo potencialą pavyko atskleisti tik panaudojus naujausius lazerių fizikos ir netiesinės optikos pasiekimus. Apie 2006 m. Vilniaus universiteto Lazerinių tyrimų centre prasidėjo darbai kuriant OPCPA sistemas generuojančią teravatų smailinės galios kelių optinių ciklų impulsus.

Atlikdami tyrimus mes išbandėme ir pritaikėme naujas OPCPA sistemų architektūrų koncepcijas bei eksperimentines inovacijas. Savo darbuose tyrėme įvairias plataus spektro impulsų formavimo schemas paremtas šviesos kontinuumo generacija, išnagrinėjome jų tinkamumą užkrato formavimui fazės stabilumo, spektrinių bei energinių charakteristikų aspektais.

Kurdami OPCPA sistemas mes iškėlėme idėją ir pademonstravome pakopinį parametrinį plataus spektro signalo stiprinimą kaupinimui naudojant tiek femtosekundinius, tiek ir pikosekundinius lazerius. Toks sprendimas leidžia kombinuoti stiprinimo skirtingų trukmių impulsais privalumus ir pasiekti dideles

išvadinių impulsų energijas bei aukštą jų kontrastą. Be to, siekiant išplėsti parametrinių stiprintuvų spektrinę juostą bei padidinti jų išvadinę energiją buvo ištirtos įvairios pakopinių nekolonearaus parametrinio stiprinimo konfigūracijos, pademonstruotos novatoriškos daugiakristalinės schemas.

Kelių optinių ciklų šviesos šaltiniuose tampa svarbus patikimas impulsų gaubtinės fazės stabilizavimas bei parametriškai sustiprintų impulsų spūda iki spektru ribotos trukmės. Mes pademonstravome, kad šie reikalavimai gali būti išpildyti panaudojus pasyvų gaubtinės fazės stabilizavimo būdą bei precizinį impulsų fazės valdymą programuojamais akusto-optiniais modulatoriais.

OPCPA sistemų išvadinę galią nemaža dalimi lemia kaupinimo parametrai. Todėl Lietuvos mokslininkų darbai tobulinant kaupinimui naudojamų iterbio ir neodimio lazerių architektūrą, realizuojant jų optinį sinchronizavimą, optimizuojant kaupinimo spinduliuotės parametrus bei jų stabilumą svariai prisidėjo prie pasiekimų kuriant išskirtinių parametų OPCPA sistemas.

Kalbant apie ekstremaliosios šviesos šaltinių kūrimą Lietuvoje būtina paminėti ypač glaudų VU Lazerinių tyrimų centro ir lazerių įmonių Light Conversion bei EKSPILA mokslininkų bendradarbiavimą atliekant mokslinius tyrimus bei vykdant jungtinius projektus. Darbai neapsiribojo vien akademiniiais tyrimais, bet buvo nukreipti ir į pilną apimtį veikiančių eksperimentinių sistemų sukūrimą. VU LTC laboratorijose buvo sukurti OPCPA sistemų prototipai, kuriose buvo atlikti OPCPA sistemų architektūros optimizavimo darbai bei išbandytos atskirų sistemų komponentų veikos. Tarptautinį Lietuvos lazerininkų kompetencijos ir technologinio lygio pripažinimą svariai iliustruoja net kelių OPCPA sistemų įdiegimas Europos lazerių centre ELI (angl. Extreme Light Infrastructure), kuriame veikia šiuo metu pažangiausias didelio intensyvumo lazerių sistemos. Impulsų generuojamų šiomis Lietuvoje sukurtais OPCPA sistemomis smailinė galia viršija 10 TW, o jų trukmė atitinka 3-4 optinius ciklus.

Pranešime taip pat apžvelgsiu ekstremaliosios šviesos šaltinių vystymo perspektyvas bei ryškiausius jų taikymo pavyzdžius: atosekundinių impulsų formavimą Rentgeno diapazone naudojant aukštųjų harmonikų generaciją, elektrinių dalelių greitimą didelio intensyvumo šviesos laukuose ir jų taikymą.

*Reikšminiai žodžiai: optiniai parametriniai stiprintuvai, itin trumpi šviesos impulsai.*

# Looking Inside Stars: Asteroseismology of Solar-Type Stars

Hans Kjeldsen<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Stellar Astrophysics Centre, Department of Physics and Astronomy, Aarhus University, DK-8000 Aarhus C, Denmark

<sup>2</sup>Aarhus Space Centre (SpaCe), Aarhus University, DK-8000 Aarhus C, Denmark

[hans@phys.au.dk](mailto:hans@phys.au.dk)

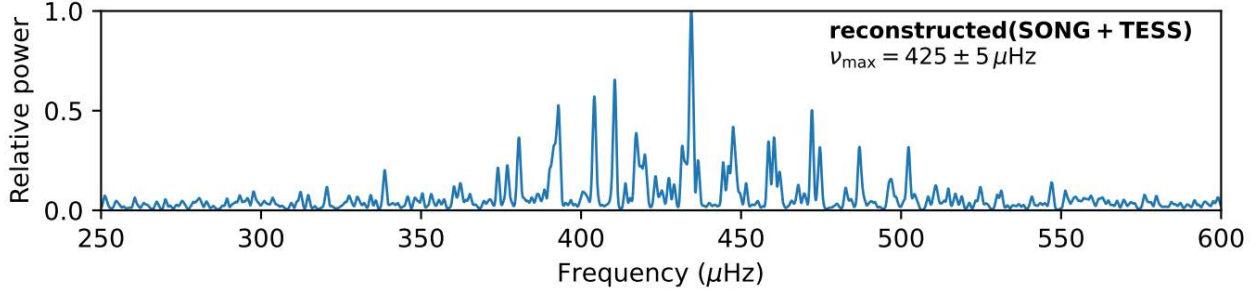


Fig. 1. Power spectrum of  $\beta$  Aql showing solar-like oscillations. The plot shows the reconstructed power spectrum from the combined SONG and TESS data, smoothed to a resolution of 1  $\mu\text{Hz}$

Asteroseismology is the study of oscillations in stars. Because stars are gaseous, they can sustain standing waves, analogous to acoustic modes in musical instruments but in three dimensions. These oscillations are sustained by different excitation mechanisms. The  $\kappa$ -mechanism, acting in ionization zones, converts thermal energy into mechanical oscillations. By contrast, solar-like oscillations are stochastically excited and damped by turbulent convection in the outer layers, giving rise to a broad spectrum of oscillation modes.

Observationally, oscillations manifest as small variations in stellar brightness and radial velocity, producing characteristic patterns of peaks in Fourier spectra. The oscillation frequencies are highly sensitive to the internal sound speed, density, and temperature profiles of the star, as well as to rotation and magnetic fields. Asteroseismology therefore has broad astrophysical importance: it enables detailed tests of stellar structure and evolution models, constrains transport processes and energy generation under extreme conditions, and serves as a cornerstone for galactic archaeology by providing accurate stellar ages.

In this talk, I will present new and highly precise measurements of the G8 subgiant  $\beta$  Aql that was published recently [1]. The study is based on time-series radial velocities from SONG-Tenerife and, for the first time, SONG-Australia, combined with overlapping TESS photometry. The power spectrum reveals clear solar-like oscillations centred at 430  $\mu\text{Hz}$ , with the TESS data showing lower signal-to-noise due to granulation. These simultaneous velocity and photometric observations are the best obtained for any star other than the Sun.

We measured the ratio of bolometric photometric to velocity amplitudes and found it to be consistent with solar values, after accounting for temperature differences. Both  $\beta$  Aql and the Sun show a frequency-dependent photometry-to-velocity ratio. The measured phase shift between SONG and TESS oscillations agrees

with solar results and with 3-D simulations of similar stars.

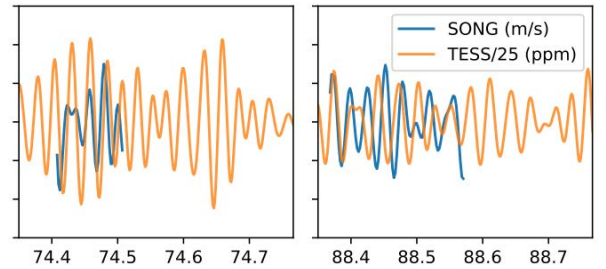


Fig. 2. Observations of  $\beta$  Aql with overlap between SONG and TESS

Frequencies of 22 oscillation modes were extracted and modelled, yielding accurate estimates of  $\beta$  Aql's mass and age, and placing strong constraints on the mixing-length parameter. We determined a mass of  $1.24 \pm 0.02 M(\text{sun})$ , and our asteroseismic analysis gives an age consistent with classical estimates but with significantly higher precision.

I will also present new extended time-series observations of another solar-type subgiant,  $\mu$  Herculis, which we have monitored for 12 years. These data constitute the most precise asteroseismic series ever obtained for any star other than the Sun. I will discuss what can be learned from such long-term observations, and which new questions future asteroseismic studies will be able to address when we also obtain large additional datasets from the ESA PLATO mission, scheduled for launch in December 2026.

*Keywords: stars, astrophysics, asteroseismology*

## References

- [1] Kjeldsen, Bedding, Li et al., 2025, *Astronomy & Astrophysics*, Volume 700, id.A39, 15 pp

# CNO – kertiniai cheminiai elementai žvaigždžių ir galaktikų evoliucijos tyrimuose

## CNO as key chemical elements in stellar and galactic evolution

Gražina Tautvaišienė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilnius University, Faculty of Physics, Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Sauletekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

[grazina.tautvaisiene@tfai.vu.lt](mailto:grazina.tautvaisiene@tfai.vu.lt)

Carbon, nitrogen and oxygen comprise in stars most of the mass of elements heavier than helium; are among the first elements to form in the nucleosynthesis chain; play important roles in stellar interiors as sources of opacity and energy production through the CNO cycle, and thus affect the star's lifetime and its heavy-element yields; provide information on mixing processes in stars; C/N ratios start serving as stellar age indicators; C/O ratios in planet-hosting stars control the amount of carbides and silicates that can be formed in exoplanets.

In this presentation, several recent studies of CNO elements, accomplished by the Vilnius University Astrospectroscopy and Exoplanets Research Group [1, 2] will be presented.

Low- and intermediate-mass giants undergo a complex chemical evolution that has yet to be observationally probed. The influence of core helium-flash on the chemical composition of stellar atmospheres is an open question since its theoretical prediction 60 years ago. Based on high-resolution spectral observations of 44 open star clusters [1] in the Gaia-ESO survey, our aim was to perform the first large-scale homogeneous investigation into the carbon and nitrogen photospheric content of low- and intermediate-mass giant stars in different phases of evolution.

We revealed differences in C/N abundance ratios between pre- and post-core-He-flash stars. The lower C/N ratios in the core He-burning red clump stars are mainly due to the enhancement of nitrogen abundances. We found that the C/N abundance ratios in the investigated first-ascent giant stars are affected by the first dredge-up slightly less than predicted by the theoretical models, and the rotation-induced extra-mixing is not as efficient as predicted by the models. The core helium flash may trigger additional alterations in carbon and nitrogen abundances that are not yet theoretically modelled. We found that the evolutionary stage of stars must be taken into account when using [C/N] as an age indicator and provided the corresponding relations (Fig. 1).

Based on high-resolution spectra observed at the Moletai Astronomical Observatory of Vilnius University for 1250 bright stars in the area centered on the northern TESS continuous viewing zone, we uniformly determined the main atmospheric parameters and precise abundances of up to 24 chemical species to search for chemical differences in planet-hosting stars [2]. We found that the dwarf stars hosting high-mass planets are more metal rich than those with low-mass planets. We found slightly negative C/O and Mg/Si

slopes toward the stars with high-mass planets. All the low-mass planet hosts in our sample show positive  $\Delta[\text{El}/\text{Fe}]$  versus condensation temperature slopes. The high-mass planet hosts have a diversity of slopes, but in more metal-rich, older, and cooler stars, the positive elemental abundance slopes are more common.

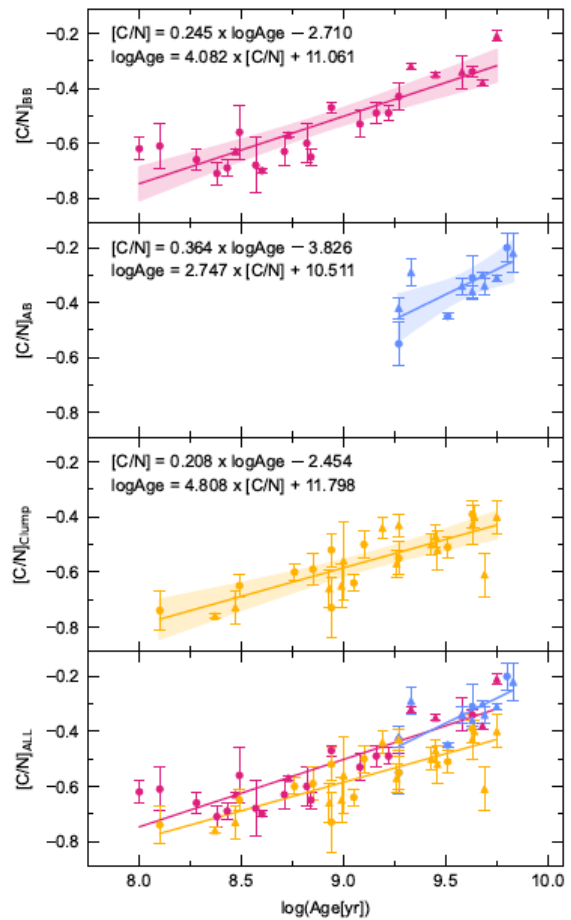


Fig. 1. Relations of [C/N] with age for OC stars in different evolutionary stages (BB – lower and AB – higher RGB stars, and Clump stars. The clusters with galactocentric distances smaller and larger than 9.5 kpc are marked by triangles and circles, respectfully.

*Key words:* stellar chemical composition, age determination, characterisation of planet-hosting stars.

### References

- [1] G. Tautvaišienė et al., *Astronomy and Astrophysics*, (2025, in press).
- [2] G. Tautvaišienė et al., *Astrophysical Journal Suppl.* **259**, 45, (2022).

# Antrosios eilės Relėjaus ir Šrėdingerio trikdymų teorija reliatyvistinių konfigūracijų superpozicijos metodu

## Second-order Rayleigh-Schrödinger perturbation theory for the relativistic configuration interaction method

Gediminas Gaigalas

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

Darbas yra atliktas Jucio mokykloje, kuri garsėja tarptautinėje atomo teorijos bendruomenėje savo sukurtais novatoriškais metodais. Šis naujas mokslinis tyrimas skirtas Jucio mokyklos sukurtų metodų [1–6] pritaikymui reliatyvistinei antros eilės Relėjaus ir Šrėdingerio trikdymų teorijai [7]. Tai veda prie tolesnio atomų teorijos plėtojimo.

Vienas iš pagrindinių uždavinių atomo struktūros skaičiavimuose yra tikslus elektronų koreliacijų įskaitymas. Yra keletas gerai išvystytų metodų, kurie plačiai naudojami šių dienų teoriniuose skaičiavimuose. Jie leidžia gauti labai tikslas teorines įvairių atominių dydžių vertes. Vieni iš tokių, bene plačiausiai paplitusių, yra konfigūracijų superpozicijos (RCI) ir daugiakonfigūracinis (Dirako), Hartrio ir Foko metodai (MCDHF). Jie yra įdiegti GRASP programiniame pakete [8]. Norint atlikti tikslus skaičiavimus šiais metodais, būtina atsižvelgti į įvairių tipų elektronų koreliacijas, o tai dažnai lemia didelę konfigūracinių būsenų funkcijų (KBF) erdvę. Tai labai apsunkina skaičiavimų procesą ir mažina teorinių rezultatų tikslumą. Šiame darbe siūloma problemą spręsti taikant stacionariąją antrosios eilės Relėjaus ir Šrėdingerio daugelio kūnų trikdymų teoriją [7] neredukuotinėje tensorinėje formoje (RSMBPT) [9–13]. Darbe pateiktos Feynmano diagramos, atitinkančias kamieno–valentines (KV), kamieno (K), kamieno–kamieno (KK) ir valentines–valentines (VV) koreliacijas, yra neredukuotinėje tensorinėje formoje ir  $jj$ - ryšyje. Toks darbe siūlomas trikdymų teorijos išvystymas leidžia apjungti RCI ir RSMBPT metodus [9–13] ir tuo pačiu leidžia be jokių pakeitimų naudotis sukinine–kampine programine biblioteka „rangular“ [14]. Tai leidžia lengvai realizuoti šios teorijos įdiegimą GRASP kompiuteriniame pakete [8], nors iki šiol, naudojant ankstesnę Relėjaus ir Šrėdingerio daugelio kūnų trikdymų teorijos formuotę [7], tai buvo neįmanoma. RCI ir RSMBPT metodų apjungimas atliekamas: i) naudojantis RSMBPT įvertinama kiekvienos KBF koreliacinė įtaka nagrinėjamiems atominiams dydžiams, ii) sudaromas KBF rinkinys, kuriuo atliekami tolimesni MCDHF ar/ir RCI skaičiavimai. Visa tai leidžia vietoj didelės apimties MCDHF ar/ir RCI skaičiavimų supaprastintai įtraukti KV, K, KK ir VV koreliacijas atomams ar jonams su bet koku valentinių elektronų skaičiumi pasluoksnyje ir/ar su bet koku atvirų pasluoksnių skaičiumi. Ši metodika puikiai tinka energijos ir šuolių parametrų apskaičiavimui. Sukurtas metodas pranašesnis už įprastą

RCI ir MCDHF metodą, nes vietoj visų KBF leidžia atrinkti tik pačias svarbiausias KV, K, KK ir VV koreliacijas ir tuo būdu gerokai sumažina KBF erdvę. Darbe, kaip metodo taikymo pavyzdžiai, pateikiami Cl III, Fe XV, Se III energijos struktūros ir Fe XV E1 šuolių skaičiavimai. Iš gautų energijos struktūros skaičiavimų matyti, kad sukurtas metodas leidžia tiksliau įtraukti koreliacinius efektus, o tai labai svarbu siekiant didesnio rezultatų tikslumo. Įvertinus šiame darbe gautų Fe XV E1 šuolio charakteristikų tikslumą kokybinių ir kiekybinių paklaidų įvertinimo (QQE) metodu [15], matome, kad rezultatai, gauti naudojant šiame darbe sukurtą metodiką, priklauso tai pačiai tikslumo klasei, kaip ir tuo atveju, kai į skaičiavimus įtraukiamos beveik visos koreliacijos, o tai visiškai neįmanoma sudėtingiems atomams. Tai dar vienas sukurtos metodo privalumas lyginant su tradiciniais RCI ir MCDHF metodais.

*Reikšminiai žodžiai:* koreliaciniai efektai, daugiakonfigūracinis (Dirako), Hartrio ir Foko lygtys, konfigūracijų maišymasis, trikdymų teorija, tenzorinė algebra, sukininis–kampinis integravimas.

### Literatūra

- [1] A.P. Yutsis, J.B. Levinson, and V.V. Vanagas, *Mathematical Apparatus of the Theory of Angular Momentum*, (Israel Program for Scientific Translations Ltd, 1962).
- [2] A.P. Yucys and A.A. Bandzaitis, *Theory of Angular Momentum in Quantum Mechanics*, (Mokslas, Vilnius, 1977). [in Russian]
- [3] Z.B. Rudzikas and J.M. Kaniauskas, *Quasispin and Isospin in the Theory of Atom* (Mokslas, Vilnius, 1984). [in Russian]
- [4] Z.B. Rudzikas, *Theoretical Atomic Spectroscopy*, (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1997).
- [5] G. Gaigalas, J. G. Kaniauskas, and Z. Rudzikas, *Liet. Fiz. Rink.* (English transl. - Sov. Phys. Coll.) **25**, 3 (1985). [in Russian]
- [6] G. Gaigalas, Z. Rudzikas, and C. Froese Fischer, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30**, 3747 (1997).
- [7] I. Lindgren, J. Morrison, *Atomic Many-Body Theory*, (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, New York, 1982).
- [8] C. Froese Fischer, G. Gaigalas, P. Jönsson, and J. Bieroń, *Comput. Phys. Commun.* **237**, 184 (2019).
- [9] G. Gaigalas, P. Rynkun, and L. Kitovienė, *Lith. J. Phys.* **64**, 20 (2024).
- [10] G. Gaigalas, P. Rynkun, and L. Kitovienė, *Lith. J. Phys.* **64**, 73 (2024).
- [11] G. Gaigalas, P. Rynkun, and L. Kitovienė, *Lith. J. Phys.* **64**, 139 (2024).
- [12] G. Gaigalas, P. Rynkun, and L. Kitovienė, *Lith. J. Phys.* **65**, 32 (2025).
- [13] G. Gaigalas, P. Rynkun, and L. Kitovienė, *Lith. J. Phys.* (in print).
- [14] G. Gaigalas, *Atoms* **10**, 129 (2022).
- [15] L. Kitovienė, G. Gaigalas, P. Rynkun, M. Tanaka, and D. Kato, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **53**, 033101 (2024).

# Šiuolaikinių medžiagų plačiajuosčiai dažniniai matavimai

## Broad band frequency measurements of advanced materials

Jūras Banys<sup>1</sup>, Mantas Šimėnas<sup>1</sup>, Jan Macutkevič<sup>1</sup>, Šarūnas Svirskas<sup>1</sup>, Sergejus Balčiūnas<sup>1</sup>, Vidmantas Kalendra<sup>1</sup>,  
Robertas Grigalaitis<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilnius University, Vilnius, Lithuania

juras.banys@ff.vu.lt

The dielectric response of materials provides fundamental insights into how matter interacts with electromagnetic fields. Specifically, it reflects two key processes: the orientational adjustment of dipoles and the translational movement of mobile charges in a dielectric medium under the influence of an applied electric field. By probing these processes, dielectric spectroscopy serves as a powerful tool for understanding both microscopic and macroscopic material properties.

In the microwave and terahertz frequency ranges, dielectric spectroscopy of ferroelectrics and related functional materials offers particular advantages. It allows for the independent determination of dielectric permittivity and dielectric loss within the dispersion region, while also providing access to the parameters of soft vibrational modes that govern structural phase transitions. This makes the technique highly valuable not only for studying fundamental physics but also for guiding the development of advanced applications.

From a technological perspective, microwave dielectric measurements are becoming increasingly important in modern telecommunications and information technologies. Their applications span a wide spectrum, including high-resolution imaging radars, navigation and guidance systems, advanced surveillance technologies, and secure communication networks. In these contexts, accurate knowledge of dielectric behavior is essential for the design and optimization of microwave circuit components and functional devices. Moreover, the magnetic properties of materials are equally critical, since the combined dielectric and magnetic parameters completely define how electromagnetic waves propagate within a medium.

Despite their importance, reliable characterization of dielectric and magnetic responses across wide frequency and temperature ranges presents significant experimental challenges. These challenges have driven the development of a diverse set of direct and indirect measurement methods. At microwave frequencies, earlier single-frequency direct techniques have been complemented in recent decades by more versatile broadband approaches, including frequency-domain dielectric spectroscopy (FDDS), time-domain spectroscopy (TDS), and Fourier-transform spectroscopy (FTS). Together, these methods provide comprehensive coverage across the spectrum, from the radio frequency domain up to the infrared.

The introduction of computer-controlled spectrometers has transformed the field, enabling unprecedented flexibility in both experimental design and data analysis. Modern spectrometers not only automate measurements but also allow the numerical simulation of electromagnetic fields in complex sample geometries. This integration of computation with experiment has become one of the most fruitful directions in contemporary microwave dielectric spectroscopy.

Nevertheless, a major challenge remains: achieving rigorous mathematical solutions that accurately describe the interaction of microwave radiation with materials of varied shapes and geometries. Current methodologies—whether based on coaxial, waveguide, resonator, or free-space techniques—are still specialized and often treated separately, even though together they now cover the entire frequency spectrum relevant to dielectric and magnetic studies.

Finally, the true value of these methods is demonstrated in their application to a wide class of materials. Ferroelectrics, relaxor ferroelectrics, dipolar glasses, and other complex dielectric systems serve as prime examples where microwave and terahertz dielectric spectroscopy has yielded critical insights. The results not only advance our fundamental understanding of phase transitions, polarization dynamics, and charge transport, but also pave the way for the rational design of next-generation electronic, photonic, and telecommunication devices.

*Keywords: Dielectric spectroscopy, perovskites, phase transitions, dipolar dynamics, broadband measurements.*

## Ar lazeriai padės reinkarnuoti Lietuvos puslaidininkų pramonę?

### Will lasers help reincarnate the Lithuanian semiconductor industry?

Gediminas Račiukaitis

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

[gediminas.raciukaitis@ftmc.lt](mailto:gediminas.raciukaitis@ftmc.lt)

Lietuva gerai žinoma pasaulyje kaip lazerių šalis, turinti stiprią ekosistemą, apimančią plačią vertės grandinę nuo fundamentalaus ir pritaikomo mokslo, optinių elementų, geriausių pasaulyje ultratrumpų impulsų lazerių ir technologijų, įprasminančių jų panaudojimą pramonės procesuose, medicinoje, ar gynybai.

„Lazerių“ kilimas prasidėjo, kai studijavau puslaidininkų fiziką. Tuo metu ne tik puslaidininkų mokslas bet ir pramonė klestėjo su Venta ir Nuklonu, gaminančiais pažangias tam metui mikroschemas. Tačiau viskas užgeso, nes išlikti priekyje reikia labai didelių investicijų į naujas technologijas. Tai ne tik Lietuvos problema, bet visos Europos. ES Lustų aktas atrodo ašara lyginant tik su vienos TSMC investicijomis.

Žodžio „puslaidininkiai“ prasmė gerokai pakito, dabar tai ne tik silicis ar  $A_3B_5$  medžiagos, bet ir lustai, jų dizainas, pakavimas ir integravimas į sistemas. Puslaidininkų ir elektronikos sektorius pasaulyje sparčiai auga, didėja jo svarba visam technologijų progresui, ypač kilus dirbtinio intelekto bumui. Ši pramonė pasidarė kaip niekada svarbi ir valstybių nepriklausomumui.

Šiomet FTMC, VU, VGTU ir KTU pradėjo vykdyti EK finansuojamą projektą „Lietuvos lustų kompetencijos centras“ ChipsC<sup>2</sup>-LT. Centro tikslas – skatinti puslaidininkų pramonės augimą, padėti Lietuvos įmonėms ir mokslo institucijoms diegti pažangias puslaidininkų technologijas, panaudoti jas naujų produktų sukūrimui. Tai turi padėti įsiliesti į Europos puslaidininkų vertės grandines, kurti aukštos vertės darbo vietas ir pritraukti investicijų.

Projektas apjungia partnerių infrastruktūrą ir kompetencijas, kad galėtume verslui pasiūlyti išskirtines paslaugas ir kompetencijas vienoje vietoje. Labai svarbi veikla yra specialistų rengimas ir perkvalifikavimas, suteikiant žinių apie naujausias puslaidininkų pramonės technologijas.

Ne mažiau svarbu yra mokslo institucijose sukaupytų kompetencijų ir žinių pritaikymas ir perdavimas. Turime potencialo specializuotose srityse – lustų dizaino, fotoninėse integrinėse grandinėse, galios elektronikos ir terahercų technologijose, pažangiuose heterogeninės integracijos sprendimuose. Centras padės įmonėms surasti prieigą prie didelių Europos pilotinių linijų ir dizaino platformos, tuo pasinaudojant visos Europos Sąjungos pažangiausiomis technologijomis.

Lustų kompetencijos centro partneriai aktyviai dirba su verslu. FTMC bendradarbiauja su Lietuvos lazerių ir fotonikos ekosistemos įmonėmis, vystomi ryšiai su Pietų Korėjos, Taivano ir JAV kompanijomis puslaidininkų medžiagų apdorojimo ir pažangaus heterogeninio lustų integravimo srityse. Šios partnerystės bus svarbios, plečiant centro tarptautines partnerystes, nes vis daugiau lazerių naudojama puslaidininkų ir elektronikos pramonėje. Mes kuriame lazerines technologijas, kurios pritaikomos lustų gamybai ir pažangiam pakavimui visame pasaulyje, tikimės šias technologijas įdiegti ir Lietuvoje. Pažangus pakavimas jau pasidarė ne mažiau svarbus kaip lustų gamyba [1].

Kompetencijų centro steigimas yra svarbus žingsnis, įtraukiant Lietuvą į Europos lustų ekosistemą. Vilčių mums teikia Teltonikos planai, nes svarbu turėti partnerį, diegiantį mūsų kuriamas technologijas šalia.

Ko mums reikia, kad vėl Lietuva garsėtų puslaidininkiais? Svarbiausia – sukurti tvarią ekosistemą, kuri galėtų augti ir plėtotis puslaidininkų ir elektronikos sferoje dirbančioms įmonėms, pritraukiant talentų ir investicijų iš viso pasaulio. Tikiuosi, Lietuvos lazerių ekosistemos pavyzdys ir patirtis dirbant joje padės atgimti naujos kartos puslaidininkų pramonei.

*Reikšminiai žodžiai: puslaidininkiai, lustai, lazeriai, ekosistema.*

#### Literatūra

- [1] <https://www.trendforce.com/news/2025/09/12/news-foplp-trial-yields-reportedly-reach-90-at-powertech-as-tsmc-advances-copos-development/>

## Organiniai puslaidininkiai optoelektronikos prietaisams bei optiniams jutikliams

### Organic semiconductors for the devices of optoelectronics and for optical sensors

Juozas Vidas Gražulevičius,

<sup>1</sup>Kauno technologijos universitetas, Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas  
[juozas.grazulevicius@ktu.lt](mailto:juozas.grazulevicius@ktu.lt)

Organiniai puslaidininkiai – organiniai junginiai sudaryti iš mažų ar stambių molekulių (makromolekulių), turinčių konjuguotų elektronų sistemas. Organiniai puslaidininkiai sudaryti daugiausia iš anglies ir vandenilio atomų, tačiau organinių puslaidininkių sudėtyje gali būti ir kitų atomų, tokių kaip azotas, deguonis, siera, fosforas, silicis ir kiti. Organiniai puslaidininkiai naudojami komerciniuose organiniuose šviesos dioduose bei organiniuose ir hibridiniuose fotovoltiniuose elementuose. Jie taip pat tyrinėjami kaip plonasluoksnių tranzistorių bei įvairių jutiklių komponentai. Organiniai puslaidininkiai gali būti kristaliniai ir amorfiniai. Organiniuose šviesos dioduose (OLED) bei perovskitiniuose fotovoltiniuose elementuose daugiausia naudojami efektyvia emisija ir/arba efektyvia krūvininkų pernaša pasižymintys molekuliniai stiklai. Tai yra kietoje amorfinėje (stikliškoje) būsenoje galintys egzistuoti mažamolekuliai junginiai.

Šiame pranešime bus apžvelgti pastaraisiais metais autoriaus vadovaujamoje mokslinėje grupėje susintetinti, ištirti ir kaip optoelektronikos prietaisų ir/arba optinių jutiklių komponentai išbandyti organiniai puslaidininkiai.

Susintetinti ir ištirti junginiai sudaryti iš donrinių tridfenilamino ar fenilkarbazolo donorinių fragmentų ir primdino karbonitrilo akceptorinių fragmentų [1]. Naudojant šiuos junginius kaip spinduolius, sukonstruoti mėlyna ir žalsva elektroliuminescencija pasižymintys OLED, kurių išorinis kvantinis efektyvumas (EQE) sekia atitinkamai 7% ir 6%. Naudojant šiuos junginius kaip OLED emisinių sliuoksnių matricas, sukonstruoti prietaisai, kurių EQE viršija 20% o eksploatacijos laikas viršija 20000 val.

Akridono ir fenoksazino darinių fotofizikinėms savybėms bei OLED sukonstruotų juos naudojant kaip spinduolius, charakteristikoms didelį poveikį daro jų terminis apdorojimas [2]. Pakaitinus šių juginių amorfinius sluoksnius jų krtalizacijos temperatūroje, nustatytas 50 nm hipsochrominis poslinkis bei akivaizdus termiškai aktyvinamos uždelstosios fluorescencijos suintensyvėjimas. OLED sukonstroto naudojant vieno iš šių junginių ir tris(4-karbazolil-9-ilfenil)amino molekulinio mišio sluoksnį kaip emisinį sluoksnį, EQE pakaitinus padidėja nuo 8,6 iki 20,7 %

Konformacinių kitimų suintensyvinama fosforescencija kambario temperatūroje pasižymintis triazatrukseno ir fentiazino darinys pasirodė esąs labai eferktyvus zondas deguonies jutikliams [3]. Šio junginio kietojo tirpalo inertiniame standžiagrandžiam polimere žalios fosforescencijos, fiksuojamos vakuume, intensyvumas yra 19 kartų didesnis už mėlynos fluorescencijos intensyvumą, fiksuojamą oro aplinkoje.

Dibenzotiofeno dariniai su metoksifenil-, trimetoksifenil- bei karbazolilfragmetais susintetinti kaip skyliniai puslaidininkiai perovskitiniams fotovoltiniams elementams [4]. Prietaiso su vieno iš šių junginių skyles pernešančiu sluoksniu galios konversijos efektyvumas siekė 20.9%.

Indolokarbazolo dariniai taip pat pasirodė esą efektyvūs skyliniai puslaidininkiai [5]. Nenaudojant laidumą didinančių priedų, sukonstruoti perovskitiniai fotovoltiniai elementai pagal savo efektyvumą prilygo analogiškiems prietaisams suformuotiems naudojant komercinį skylinį puslaidininkį spirofluoreno darinį, o pagal stabilumą gerokai pranoko juos.

*Reikšminiai žodžiai: organinis puslaidininkis, organinis šviesos diodas, deguonies jutiklis, perovskitinis fotovoltinis elementas.*

#### Literatūra

- [1] U. Tsiko, D. Volyniuk, V. Andruleviciene, K. Leitonas, G. Sych, O. Bezvikonnyi, V. Jasinskas, V. Gulbinas, P. Stakhira, J.V. Gražulevičius, J.V. Mater. Today Chem. 2022, **25**, 100955 (2022).
- [2] M. Guzauskas, D. Volyniuk, I. Kulszewicz-Bajer, M. Mahmoudi, A. Lazauskas, V. Jasinskas, V. Gulbinas, A. Pron, J. V. Gražulevičius, Adv. Opt. Mater. **11**, 2301059 (2023)
- [3] E. Skuodis, K. Leitonas, A. Panchenko, L. Volyniuk, R. Keruckiene, D. Volyniuk, B.F. Minaev, J.V.; Gražulevičius J.V. Sens. Actuators B Chem., **373**, 132727 (2022).
- [4] R. Durgaryan, J. Simokaitiene, D. Volyniuk, O. Bezvikonnyi, Y. Danyliv, B.J., Kim, K.L. Woon, G. Sini, G. Boschloo, J.V. Gražulevičius, Sol. RRL, **6**, 2200128 (2022)
- [5] Y. Kim, B.W. Yang, B.W.; Suo, E.; Jautaitiene, J. Simokaitiene, R. Durgaryan, D. Volyniuk, A. Hagfeldt, G.; Sini, J.V. Gražulevičius, Nano Energy, **101**, 107618 (2022).

## **Kviestiniai pranešimai**

# X-ray Computed Tomography for Materials Science: From Batteries to Biomaterials

Arturas Vailionis<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Stanford Nano Shared Facilities, Stanford, CA 94305, U.S.A.

<sup>2</sup>Department of Physics, Kaunas University of Technology, 51368 Kaunas, Lithuania  
[arturas.vailionis@stanford.edu](mailto:arturas.vailionis@stanford.edu)

Understanding the internal structure of materials is essential for linking microstructure to physical properties and overall performance. X-ray computed tomography (XCT) captures internal features of materials in three dimensions without altering or damaging the sample. By harnessing the penetrating power of X-rays, XCT reconstructs the internal geometry of an object from a series of transmission images acquired at incremental angular positions. The resulting 3D datasets can be analyzed as rendered volumes or cross-sectional slices, revealing complex internal features and allowing precise measurements of structural parameters.

This presentation introduces the principles of laboratory-based micro-computed tomography ( $\mu$ XCT), which enables high-resolution imaging of solid samples at the submicron scale. Compared to conventional clinical CT, modern  $\mu$ XCT systems offer significantly higher spatial resolution – down to 300-500 nm in advanced instruments. We will explore a wide range of applications relevant to materials science and applied chemistry, including imaging of energy materials (e.g. batteries), semiconductors (e.g. printed circuit boards), porous materials (e.g. aerogels), and biomaterials. XCT is increasingly used not only for qualitative visualization but also for quantitative assessment of voids, interfaces, cracks, and inclusions – features that critically influence material behavior and performance.

As an example of biological material analysis, we imaged *Bombyx mori* silk fibers using a ZEISS Versa 520 X-ray microscope at a voxel resolution of 3.15  $\mu$ m. This experiment demonstrates how  $\mu$ XCT can be applied to investigate the internal morphology of natural fibers and biological polymers in 3D, without the need for destructive sectioning [1]. Recent work in cardiovascular pathology also highlights the power of  $\mu$ XCT in simultaneously assessing calcification, extracellular matrix remodeling, and adipocyte degeneration in diseased human aortic valves [2].

A featured case study focuses on the three-dimensional, non-destructive visualization of enamel microcracks (EMCs) in human teeth [3-5]. Routine dental examinations often reveal EMCs, but traditional evaluations, based on 2D assessments of number, direction, location, and size, are inadequate for fully characterizing the structural implications. Here, we present a novel  $\mu$ XCT-based workflow for analyzing EMCs, enabling volumetric imaging of tooth structure at resolutions down to 0.5  $\mu$ m. To facilitate quantitative analysis, we developed a universal segmentation pipeline using the Dragonfly software deep learning toolbox, allowing accurate volumetric separation and characterization of enamel, dentin, and microcracks.

The ability to visualize and quantify EMCs in 3D opens new opportunities in dental research and clinical diagnostics. Microcracks, previously regarded as incidental, may in fact play a key role in the biomechanics and aging of enamel. Integrating  $\mu$ XCT with AI-driven deep-learning segmentation and feature extraction provides a reproducible and scalable method for large group studies and comparative analyses across species or treatment conditions. This approach may also aid in evaluating the effectiveness of restorative procedures and protective coatings aimed at limiting crack propagation.

Looking ahead, continued advancements in laboratory XCT instrumentation, including brighter sources and faster detectors, along with progress in computational reconstruction and machine learning analytics, will further extend the capabilities of this technique. From detecting defects in advanced composites to modeling pore networks in catalysts,  $\mu$ XCT is becoming an essential tool for multi-scale, multi-modal characterization in both academic research and industrial applications.

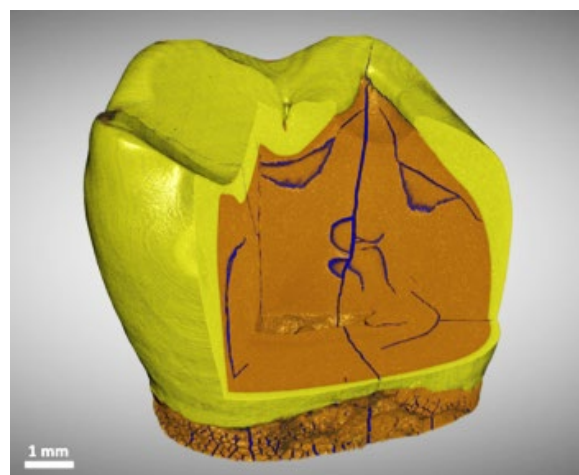


Fig. 1. 3D virtual cut through segmented tooth

*Keywords: X-ray computed tomography, 3D imaging, deep learning segmentation, enamel microcracks.*

## References

- [1] M. Ryu, *et al.*, Beilstein J. Nanotechnol. **10**, 922 (2019).
- [2] M. El Zeini, *et al.*, J. Am. Heart Assoc., (under review).
- [3] I. Dumbryte, *et al.*, Bioengineering **10**, 1354 (2023).
- [4] I. Dumbryte, *et al.*, Sci. Rep. **12**, 22489 (2022).
- [5] I. Dumbryte, *et al.*, Sci. Rep. **11**, 14810 (2021).

# The advances of University of Latvia in quantum sensor development for magnetometry

Arturs Mozers

University of Latvia, Faculty of Science and Technology, Laser Centre, Jelgavas str. 3, LV1004 Riga, Latvia

[arturs.mozers@lu.lv](mailto:arturs.mozers@lu.lv)

Building on the experience gained from previous fundamental research, in recent years researchers from the Laser Centre (University of Latvia FST) have turned their attention to more applications-based research. For many years atom-light or in general matter-light interactions have been studied throughout the world and also in the University of Latvia [1], in particular studies on how these interactions change when subjected to external fields such as electric or magnetic fields. From the early days of this type of research the development of new devices for field sensing have been proposed. By exploiting these types of processes that can be precisely described by quantum mechanics unprecedented field sensitivities can be achieved. Such devices are called quantum sensors and for each application prototype-tailoring is required.

The magnetic field quantum sensors that are currently being developed in the Laser Centre can be split into two groups based on the sensing medium. The sensing medium of the first group is diamond with lattice defects called Nitrogen-Vacancy centres. The other group of magnetic quantum sensors is based on gas of atoms.

In this presentation some results of the development of such magnetic field quantum sensor prototype-devices from recent and ongoing projects will be presented. Some potential applications include magnetic field imaging, geomagnetic field mapping and navigation, bio-magnetic field sensing.

*Keywords: atom-light interaction, quantum sensors, magnetometry, field sensing applications*

## References

- [1] M. Auzinsh, D. Budker, and S. Rochester, *Optically Polarized Atoms: Understanding Light-atom Interactions* (OUP Oxford, 2010)

## Branduolinė energetika šiandien ir rytoj: mažieji moduliniai reaktoriai, jų tyrimų iššūkiai

### Nuclear Energy Today and Tomorrow: Small Modular Reactors, Their Research Challenges

Tadas Kaliatka<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Lietuvos energetikos institutas, branduolinių įrenginių saugos laboratorija, Breslaujos g. 3, LT-44403 Kaunas

Branduolinė energetika užima svarbią vietą Europos energetikos sistemoje. Visoje Europos Sąjungoje veikia 104 reaktoriai, vis dar veikia keli pramonės padaliniai kuro gamybai, taip pat yra branduolinio kuro perdirbimo (Prancūzija, Vokietija, Nyderlandai) įmonių kurios taip pat įsodrina uraną naudojamą branduolinėse jėgainėse [1]. Europos branduolinėse jėgainėse yra generuojama 27% elektros energijos [2]. Branduolinėje pramonėje visoje Europos Sąjungoje dirba daugiau nei 1,1 mln. žmonių (tarp jų, daugiau nei pusė milijono aukštos kvalifikacijos specialistai, ir 15 000 mokslininkų).

Europos sąjunga 2050 m yra numachiusi pasiekti klimato neutralumą. Europos dekarbonizacijos tikslams, siekiant sumažinti šiltnamio efektą sukeliančių dujų išmetimus ir pereiti prie klimatui neutralios ekonomikos, pasiekti gali pasitarnauti branduolinė energetika. Ilgalais esamų branduolinių elektrinių eksploatavimas ir naujų III+ kartos reaktorių statyba atlieka svarbų vaidmenį siekiant klimato neutralumo. Inovatyvūs mažieji moduliniai reaktoriai (MMR) gali dar labiau prisidėti prie dekarbonizacijos tikslų. MMR siūlo kelią dekarbonizacijai, užtikrindami mažai anglies dioksido į aplinką išskiriantį, patikimą ir lankstų energijos šaltinį.

Lietuvos energetikos institutas (LEI) dalyvauja Europos MMR pramonės aljanso veikloje. Šio aljanso pagrindinis tikslas palengvinti ir paspartinti pirmųjų MMR projektų kūrimą, demonstravimą ir diegimą Europoje 2030 m. pradžioje. Lietuvos nacionalinėje energetikos strategijoje taip pat siūloma statyti tokius reaktorius. Tačiau, MMR projektų kūrėjai dar turi neišspręstų uždavinių:

- **Neutronų fizika.** Neutronų balansas ir dauginimosi koeficientas ( $k_{eff}$ ), reikia tiksliai apskaičiuoti, kaip efektyviai reaktorius palaiko grandininę reakciją mažesniame tūryje. Maža aktyvioji zona taip pat kelia klausimų dėl neutronų sugėrimo sąlygų ir reikalauja tikslaus dizaino. Pažangiuose MMR planuojama naudoti avarijoms atsparų kurą, todėl reikia ištyti kokia to įtaka neutroninėms charakteristikoms. Dėl mažesnių gabaritų kai kurios medžiagos gali būti labiau veikiamos neutronų, todėl tampa stipriau radioaktyvios.

- **Šilumos perdavimas ir termohidraulika.** Daugelyje MMR technologijų būtinas efektyvus šilumos nuvedimas mažame tūryje. Būtina atsižvelgti į termines inercijas, nes daugelis MMR projektuojami kaip lanksčius prisitaikančius prie energijos poreikiu įrenginius. Tai reiškia, kad reaktorius greičiau reaguoja į galios pokyčius, o tai pasunkina ir aušinimo sistemų darbą. Dauguma MMR projektuojamos su pasyviomis apsaugos sistemomis, todėl reikia užtikrinti jų fizikinių principų veikimą realiomis eksploatavimo sąlygomis.

Šiame pristatyme detaliau aptarta viena pagrindinių MMR savybių – pasyvios, natūralia šilumnešio cirkuliacija paremtos, šilumos nuvedimo sistemos. Natūrali cirkuliacija nereikalauja jokių mechaninių įrenginių šilumnešio srautui palaikyti ir tokia cirkuliacija nesustos praradus išorinį energijos tiekimą. Vis tik natūrali šilumnešio cirkuliacija nėra taip detalai ištirta kaip priverstinė. Natūrali cirkuliacija pasižymi mažiais slėgio (varomosios jėgos) gradientais, mažais greičiais. Šilumos perdavimą vandenyje smarkiai įtakoja nesikondensuojančios dujos, kurių neįmanoma išvengti atvirose vandens baseinuose. Modeliuojant natūralios cirkuliacijos sistemas skaitiniais metodais susiduriame su kompiuterinių programų, skirtų šilumos mainų ir termohidraulikos procesų modeliavimui branduoliniuose įrenginiuose validacijos problema. Šios kompiuterinės programos, sukurtos ir patikrintos modeliuoti priverstinei šilumnešio cirkuliacijai, esant palyginti aukštiems slėgiams. Todėl natūralios šilumnešio cirkuliacijos tyrimas ir modeliavimas kompiuterinėmis programomis, bei jų valiavimas labai svarbus.

LEI mokslininkai jau atliko keleto eksperimentų (tokie eksperimentiniai įrenginiai kaip FASSIP [3] ir PMK-2 [4]) modeliavimą. Dirbo ir šiuo metu dirbama Europos Sąjungos inicijuotuose projektuose tokiose kaip: CESAM, ELSMOR, SASPAM-SA ir EASI-SMR. Pastarieji du projektai šiuo metu vykdomi ir pagrindinis dėmesys skiriamas į postuluojamų sunkiųjų avarių modeliavimą ir MMR pasyvių saugos sistemų atsaką į šias avarijas. Pagrindinis projektų tikslas palengvinti MMR licencijavimą ir diegimą ES, ekspertų parama reguliavimo institucijoms, bei sustiprinti pasitikėjimą naujomis saugos technologijomis.

*Reikšminiai žodžiai: mažieji moduliniai reaktoriai, natūrali cirkuliacija, saugos sistemos, modeliavimas.*

#### Literatūra

- [1] Global nuclear energy - statistics & facts. <https://www.statista.com/topics/1087/nuclear-power/>
- [2] World Nuclear Association (WNA). <https://www.world-nuclear.org>
- [3] Antariksan, A.R., et al., Simulation of operational conditions of FASSIP-02 natural circulation cooling system experimental loop, Indonesian Journal of Nuclear Science and Technology 19 1 (2018) 41–54.
- [4] Ézsöl, G., Perneczky, L., Szabados, L., & Tóth, I. (2012). PMK-2, the First Integral Thermal-Hydraulics Tests for the Safety Evaluation of VVER-440/213 Nuclear Power Plants. Science and Technology of Nuclear Installations, 2012, Article ID 780472

## Subnanosekundiniai parametriniai šviesos šaltiniai: iššūkiai ir vystymo perspektyvos

## Subnanosecond optical parametric sources: challenges and development perspectives

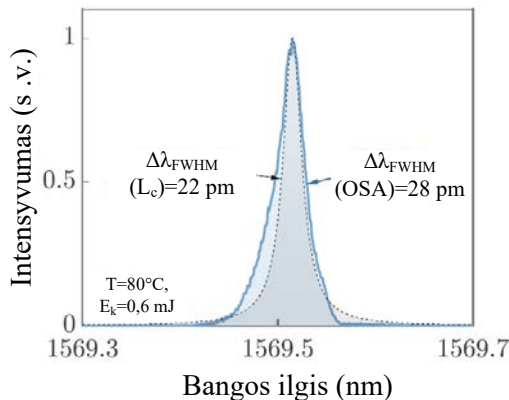
Jonas Banys, Vygandas Jarutis, Julius Vengelis

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

[julius.vengelis@ff.vu.lt](mailto:julius.vengelis@ff.vu.lt)

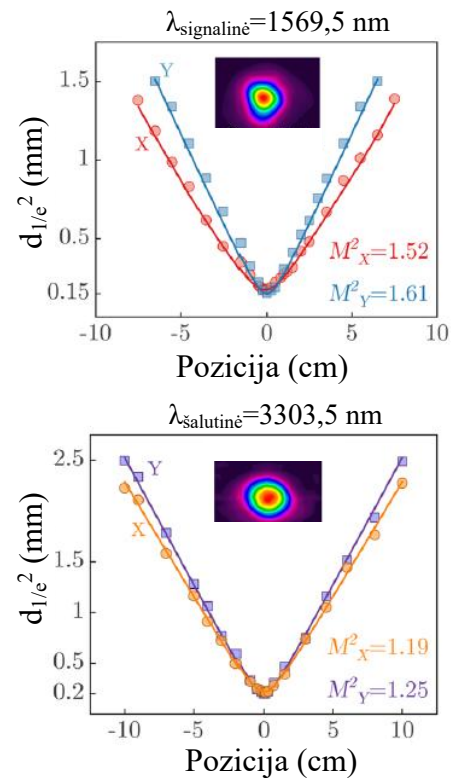
Kompaktiški ir pigūs subnanosekundiniai (300 ps - 1 ns) parametriniai šviesos generatoriai (PŠG) ir stiprintuvai (PŠS) išskirtini tuo, jog gali būti naudojami srityse, kuriose nebūtina aukšta laikinė skyra, pasiekama naudojant sudėtingas ir brangias ultratrumpųjų (<10 ps) impulsų lazerines sistemas, tačiau nanosekundinių (>1 ns) lazerinės spinduliuotės šaltinių laikinės skyros jau nebepakanka, pavyzdžiui, spektroskopija, LIDAR, LIPS ir t.t. [1, 2] Nepaisant spartaus moduluotos kokybės veikos mikrolazerių, naudojamų subnanosekundinių PŠG/PŠS kaupinimui, technologijų tobulinimo bei augančios tokių PŠG/PŠS paklausos, jų vystymas iki našių, geras spektrines ir erdvinės išsivadinės spinduliuotės charakteristikas turinčių prietaisų yra komplikuotas. Tai daugiausia susiję su faktu, jog subnanosekundinių kaupinimo impulsų atveju parametrinės generacijos slenkstis daugelyje populiarių netiesinių terpių yra aukštesnis nei lazeriu indukuotos pažaidos slenkstis [3].

Šiame pranešime aptariami bendri parametrinių šviesos šaltinių veikimo principai, subnanosekundinių PŠG/PŠS vystymo ypatumai bei apžvelgiami Vilniaus universiteto Lazerinių tyrimų centre vykdomi šios tematikos tyrimai: nuo PŠG periodiškai poliuotose netiesinėse terpėse, tokiose kaip ličio niobatas (PPLN), iki PŠS, naudojančių įvairius užkrato šaltinius, tokius kaip fotoninių kristalų šviesolaidyje generuotas kontinuumas ar siauro spektro lazerinio diodo spinduliuotė. Taip pat pristatomi inovatyvūs subnanosekundiniai atgalinės bangos parametriniai šviesos osciliatoriai (angl. k. *backward wave optical parametric oscillator* - BWOP), kuriuose signalinė ar šalutinė banga sklinda priešinga kryptimi nei kaupinimo banga [4].



1 pav. BWOP signalinės bangos spektras įvertintas išmatavus koherentiškumo ilgį  $L_c$  (juoda punktyrinė linija) bei išmatuotas optiniu spektro analizatoriumi OSA (melsva linija).

Juose fazinio synchronizmo sąlygos leidžia realizuoti aukštos spektrinės (1 pav.) bei erdvinės kokybės (2 pav.) išsivadinę spinduliuotę bei pasiekti didelį keitimo efektyvumą, kuris gali viršyti 50% [5].



2 pav. BWOP signalinės bei šalutinės bangų pluoštų kaustikos bei išmatuotos  $M^2$  parametro vertės. Intarpai iliustracijose vaizduoja pluošto profilius artimajame lauke.

**Reikšminiai žodžiai:** subnanosekundiniai impulsai, moduluotos kokybės mikrolazeriai, parametrinis šviesos generatorius, parametrinis šviesos stiprintuvas, atgalinės bangos parametrinis šviesos osciliatorius.

### Literatūra

- [1] 7B. Lang, et al., Rev. Sci. Instrum. **84**, 073107 (2013).
- [2] 10P. Geiser, et al., Appl. Phys. B **83**, 175–179 (2006).
- [3] J. Banys, et al., Opt. Express **30**(13), 459826 (2022).
- [4] C. Canalias and V. Pasiskevicius, Nat. Photonics **1**, 459–462 (2007).
- [5] J. Banys, et al., APL Photonics **10**(3), 036123 (2025).

# Towards Controlling Excited State Reactivity in Organic and Organometallic Systems: A Perspective Through Ultrafast Multidimensional Spectroscopies

Ricardo J. Fernández-Terán<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Physical Chemistry, University of Geneva. 30 Quai Ernest Ansermet, CH-1205, Geneva, Switzerland.

[Ricardo.FernandezTeran@unige.ch](mailto:Ricardo.FernandezTeran@unige.ch)

Controlling excited-state reactivity through bond-specific IR excitation is a fundamental research focus.[1]

Our work explores excited-state dynamics in organic and organometallic chromophores, including electron/charge transfer, excited-state symmetry breaking (ES-SB), and proton transfer. We studied donor–acceptor–donor (D–A–D) chromophores exhibiting ES-SB,[2,3] and donor–acceptor (D–A) chromophores with electron or charge transfer. We aim to probe in these molecules how selective IR excitation of C≡C stretches influences their excited-state behaviour with the aim of influencing their photodynamics. Modifications introducing rotational asymmetry revealed intriguing differences, and further investigations examined the role of redox states in ES-SB dynamics.

Parallel studies on symmetric Pt(II) *bis*-acetylide complexes assessed how ligand arrangement (*cis* vs *trans* geometry), conjugation length, and substituents affect the observed photodynamics and potential for ES-SB.[4]

Another system involved proton transfer (PT) in a symmetric molecule with two PT sites, where ultrafast single-sided PT and isomerisation occur. Multipulse experiments tracked ground-state back-PT and explored triggering a second PT.

Using time-resolved spectroscopy (including tr2DIR, 2D-VE), we analysed relaxation dynamics, vibronic couplings, and solvation effects, focusing on C≡C stretches (1950–2250 cm<sup>-1</sup>) involved in charge transfer. Together with calculations and spectroelectrochemistry, these methods provide unique insights not available otherwise.

ES-SB dynamics in D–A–D systems showed strong solvent dependence, but permanent control over photoexcitation outcomes remains elusive. Ongoing studies on other systems aim to generalize this approach and further guide molecular design.

*Keywords: excited-state dynamics, vibrational control, IR excitation, multidimensional spectroscopy.*

## References

- [1] Delor, M., Weinstein, J. A., et al. *Science* **346**,1492-1495 (2014).
- [2] Dereka, B., Vauthey, E., et al. *Nat. Commun.* **11**, 1–11 (2020).
- [3] Dereka, B., Rosspeintner, A., Li, Z., Liska, R. & Vauthey, E. *J. Am. Chem. Soc.* **138**, 4643–4649 (2016).
- [4] J. C. López-López, Y. H. Nguyen, C. Jiang and T. S. Teets, *Inorg. Chem.* **62**, 17843–17850 (2023).

# Optinių sužadinių dinamika molekulių kompleksuose

## Dynamics of optical excitations in molecular complexes

Darius Abramavičius<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3 Vilnius  
[darius.abramavicius@ff.vu.lt](mailto:darius.abramavicius@ff.vu.lt)

Organiniai fotojautrūs sluoksniai vis plačiau naudojami vietoj tradicinių kristalinių puslaidininkių. Tačiau viena iš kertinių organinių molekulių savybių kol kas nėra išnaudojama. Tai yra jų polinkis tirpaluose formuoti įvairius kompleksus, agregatus, klasterius, kurių optinės savybės smarkiai skiriasi nuo atskirų molekulių savybių.

Optinės molekulių agregatų savybės yra unikalios dėl stiprių tarpmolekulinio sąveikų, kurios pernормuoja sužadimo energijas ir pakeičia sąveikas su molekulių virpesiais. To pasekoje elektronės sužadintos būsenos yra dalinai delokalizautos, dėl virpesių molekulės poliarizuotos ir visa sužadinta sistema yra sunkiai nusakomoje termalizuotoje būsenoje. To pasekoje yra gana sudėtinga prognozuoti – modeliuoti tokių kompleksų fotosužadinius, jų dinamines savybes ir iš to sekančius kompleksų spektrus.

Pastaruosius 10 metų tokio tipo sužadinių dinamikos modeliavimui išvystėme kvantinius nuo laiko priklausomus variacinius metodus [1]. Pagal šį metodą startuojant nuo įvairių sudėtinės banginės funkcijos formų gaunamos banginių funkcijų parametrus aprašančios judėjimo lygtys. Pradedant juo nestacionarių pradinių sąlygų, atitinkančių optinį fotosužadimą, gauname sužadimo evoliuciją. Šis metodas leidžia aprašyti fokius fizikinius reiškinius, kaip fotosužadimo dinaminę lokalizaciją dėl sąveikos su fononais, sužadimo pernaša, lokalus aplinkos kaitimas dėl termalizacijos [2], ir leidžia modeliuoti tiesinius ir netiesinius molekulių kompleksų spektrus.

Tačiau norint padidinti modeliavimo tikslumą būtina postuliuoti sudėtingą banginės funkcijos formą, ko pasekoje judėjimo lygtys tampa labai sudėtingos.

Vienas iš patobulinimų, kurį panaudojome pastaruoju metu yra hamiltoniamo poliaroninė transformacija. Jos pasekoje sistema iš anksto perorganizuojama į termalizuotą būseną ir uždavinys sprendžiamas būtent termalizuotame hamiltoniane. Buvo gautos poliaroninės variacinės lygtys. Iš esmės tai yra dviejų tipų lygčių sistema:

$$i\dot{\varphi}_n - \sum_k \tilde{J}_{nk} \varphi_k = \sum_k \xi_{nk}^{(x)}(\alpha) \varphi_k - \xi_n^{(d)}(\alpha) \varphi_n,$$
$$i\dot{\alpha}_i - \omega_i \alpha_i = \zeta_i^{(x)}(\varphi, \alpha) - \zeta_i^{(d)}(\varphi).$$

Čia  $\varphi$  yra elektroninės sužadimo amplitudės,  $\alpha$  yra virpesinio sužadimo poslinkiai,  $\tilde{J}$  yra transformuoto poliaroninio hamiltoniano tarpmolekulinės sąveikos ir sužadimo energijos,  $\omega$  yra virpesiniai dažniai. Dešinėje lygčių pusėje yra fluktuojančios gražinančios jėgos, susiejančios bendrą elektroninę ir virpesinę

sistemas. Tokių lygčių sprendimas greičiau veda sistemą į pusiausvirą būseną su mažiau skaičiavimo resursų.

Antras žingsnis, kuris patodulintų modeliavimo metodą yra taikyti ne variacinį metodą, o taikyti daugiafononinio atvaizdavimo Heizenbergo lygtį. To pasekoje gaunama baigtinė lygčių sistema su iš anksto nustatyto pageidaujamo tikslumu.

Šios lygtys buvo gautos ir jų bendra forma susiveda į vieną bendrą lygtį aprašančią visą sistemos hierarchiją. Šiuo metu vyksta modeliavimo darbai, ir lygčių testavimas.

*Reikšminiai žodžiai: eksitonai, poliaronai, molekulių kompleksai.*

### Literatūra

- [1] D. Abramavičius, V. Chorošajev and L. Valkunas, Phys. Chem. Chem. Phys. **20**, 21225 (2018).
- [2] M. Jakučionis, D. Abramavičius. Phys. Rev. A **107**, 062205 (2023).

## Europio savaiminė redukcija fosfatinėse matricose

### Europium self-reduction in phosphate-based matrices

Aleksej Žarkov<sup>1</sup>, Simona Bendžiūtė<sup>1</sup>, Jonas Stadulis<sup>1</sup>, Paulina Pažerauskaitė<sup>1</sup>, Arturas Katelnikovas<sup>1</sup>,  
Andris Antuzevics<sup>2</sup>, Guna Doke<sup>1,2</sup>, Guna Kriekė<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Chemistry, Vilnius University, Naugarduko 24, LT-03225 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Institute of Solid State Physics, University of Latvia, Kengaraga 8, LV-1063 Riga, Latvia

[aleksej.zarkov@chf.vu.lt](mailto:aleksej.zarkov@chf.vu.lt)

The design of visible broadband emission phosphors is crucial for developing next-generation phosphor-converted white-light-emitting diodes (pc-WLEDs), which are considered efficient, green, and energy-saving light sources. Recent efforts are focused on designing single-activator phosphors to overcome the disadvantages of combining phosphors with distinct emission colors. As one of the most common and highly efficient activators, the  $\text{Eu}^{2+}$  ion possesses broadband absorption in the UV to blue regions and multicolor emission. The optical properties of  $\text{Eu}^{2+}$ -doped phosphors strongly depend on the local environment of  $\text{Eu}^{2+}$  ions. Consequently, the emission of  $\text{Eu}^{2+}$ -doped materials can be tuned by the site occupancy engineering, resulting in the emission maximum from blue to infrared, while the multiple-site occupancy of  $\text{Eu}^{2+}$  ions in a single host favors broadband emission. For this reason, the structural engineering strategy is often employed to develop single broadband white-emitting phosphors. Recently, the broadband  $\text{Eu}^{2+}$  emission was achieved in various inorganic matrices such as  $\text{Ba}_3\text{ScB}_3\text{O}_9$ ,  $\text{Ca}_3\text{Sc}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$ ,  $\text{Ba}_3\text{GeO}_4\text{Br}_2$ ,  $\text{K}_2\text{BaSr}(\text{PO}_4)_{2-x}(\text{BO}_3)_x$ , etc.

Different phosphate-based matrices, including the calcium phosphates family, are widely employed to prepare lanthanide-activated phosphors. Recent works on  $\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ -type ( $\beta\text{-TCP}$ ) materials demonstrated the feasibility of the design of  $\text{Eu}^{2+}$ -based broadband phosphors. For instance, a broadband visible emission in  $\text{Eu}^{2+}$ -activated  $\beta\text{-TCP}$  can be achieved by employing chemical pressure. The occupation of  $\text{Eu}^{2+}$  ions in the crystal lattice and resulting emission can be tuned through the co-substitution of  $\text{Ca}^{2+}$  by  $\text{Y}^{3+}$  and  $\text{Mg}^{2+}$ . Full-spectrum white light emission from  $\text{Eu}^{2+}$  ions occupying 3 inequivalent crystallographic sites was demonstrated for  $\text{Ca}_{9-y}\text{Mg}_y\text{NaGd}_{0.667}(\text{PO}_4)_7\text{:Eu}^{2+}$  phosphor. Ultra-broadband emission reaching a FWHM of 330 nm was realized in  $\text{Ca}_9\text{LiMg}_{1-x}\text{Al}_{2x/3}(\text{PO}_4)_7\text{:Eu}^{2+}$ ; in this case, the  $\text{Eu}^{2+}$  ions occupied 4 different sites.  $\beta\text{-TCP}$  is a low-temperature polymorph with 5 inequivalent Ca sites, allowing multisite doping. The crystal structure of the high-temperature  $\alpha\text{-TCP}$  polymorph is more complicated, containing 18 Ca sites. This structural feature makes the  $\alpha\text{-TCP}$  matrix highly attractive for developing broadband phosphors.

Most commonly,  $\text{Eu}^{2+}$ -doped materials are synthesized in a reducing atmosphere; nevertheless, some specific inorganic matrices allow the stabilization of the  $\text{Eu}^{2+}$  oxidation state in the air. Self-reduction phenomenon is typically observed in materials such as

borates, silicates, and phosphates. In this light, Ca or Sr phosphates can also be considered suitable hosts for observing the self-reduction phenomenon.

In this work, the examples of Eu self-reduction in phosphate-based matrices are reported. The first case is the synthesis of  $\text{Eu}^{2+}$ -doped  $\alpha$ -tricalcium phosphate ( $\alpha\text{-TCP}$ ,  $\alpha\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ ) via a phase transformation of  $\text{Eu}^{3+}$ -doped  $\text{CaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . The phase conversion accompanied by a reduction of  $\text{Eu}^{3+}$  to  $\text{Eu}^{2+}$  occurred during the annealing of the starting material in a vacuum. The optical properties of the obtained  $\alpha\text{-TCP}\text{:Eu}^{2+}$  were investigated by photoluminescence (PL), thermally stimulated luminescence, and persistent luminescence decay measurements. The obtained material exhibited tunable broadband PL with FWHM values ranging from 87 to 142 nm at room temperature. The PL can be tuned in terms of emission maximum and FWHM by varying the excitation wavelength. The broadband emission was achieved due to the multi-site occurrence of  $\text{Eu}^{2+}$  ions in the complex  $\alpha\text{-TCP}$  matrix. Three types of traps were determined with activation energy values of 0.80, 0.75, and 0.68 eV. After irradiation with X-rays, an afterglow characterizable by a  $\text{Eu}^{2+}$  broadband spectrum with a maximum at around 480 nm can be detected for at least 10 h.

Another example is  $\text{Eu}^{2+}$ -doped  $\text{Sr}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$  powders with various Eu content synthesized by molten salt method in air atmosphere using  $\text{Eu}^{3+}$ -doped strontium phosphate ( $\text{Sr}_3(\text{PO}_4)_2$ ) as a starting material. The optimization of synthesis parameters was performed in terms of temperature, time, precursor-to-flux ratio and Eu content. The self-reduction of  $\text{Eu}^{3+}$  to  $\text{Eu}^{2+}$  occurred during the phase transformation from  $\text{Sr}_3(\text{PO}_4)_2$  to  $\text{Sr}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ . The presence of  $\text{Eu}^{2+}$  ions was clearly visible from the optical properties of the synthesized materials. Luminescent properties were investigated by means of photoluminescence measurements. Excitation spectra, emission spectra, and decay curves of the samples were studied. Temperature-dependent PL measurements were performed as well.

#### Acknowledgements

This project has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No. S-MIP-23-85.

# Reaktyvaus atkaitinimo įtaka spindulinei rekombinacijai stibio selenido plonuose sluoksniuose

## The influence of reactive annealing for radiative recombination in antimony selenide thin films

Rokas Kondrotas<sup>1</sup>, Arnas Naujokaitis<sup>1</sup>, Martynas Talaikis<sup>1</sup>, Vidas Pakštas<sup>1</sup>, Trong Tien<sup>2</sup>, Sussane Siebentritt<sup>2</sup>, Nathalie Valle<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup>Physics and Materials Science Research Unit, University of Luxembourg, 44 Rue du Brill, 4422 Belvaux, Luxembourg

<sup>3</sup>Luxembourg Institute of Science and Technology, 41 Rue du Brill, 4422 Belvaux, Luxembourg

[rokas.kondrotas@ftmc.lt](mailto:rokas.kondrotas@ftmc.lt)

Antimony selenide ( $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ ) is an emerging photovoltaic material that has drawn significant attention because of earth abundant and low toxicity chemical composition, thermodynamically stable phase and favourable optoelectronic properties for thin film solar cell application. Despite fast initial development of  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  solar cells since 2012, the progress has stagnated during the past 4–5 years, raising the question whether fundamental or technological limitations are impeding further development.

By analysing the solar cell parameters of the state-of-the-art  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  photovoltaic devices, one can notice that the most deficient parameter is the open-circuit voltage ( $V_{\text{OC}}$ ). Even for record efficiency  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  solar cells, the  $V_{\text{OC}}$  comprises only about 50% of theoretically achievable value [1]. High  $V_{\text{OC}}$  deficit is commonly attributed to a significant nonradiative recombination via deep defects either at interfaces or in the bulk of the absorber. Consequently, understanding the recombination pathways in  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  thin films and more importantly reducing the nonradiative recombination is key to mitigate the high  $V_{\text{OC}}$ -deficit.

In this work, we addressed the issue of  $V_{\text{OC}}$  deficit by applying post-treatment under reactive atmosphere. Various experimental conditions were tested to find optimal post-treatment parameters (fig. 1). Photoluminescence spectroscopy was used as a main tool to study the post-treatment effect on the radiative recombination properties of  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  thin films. Selected samples were studied using absolute photoluminescence measurements providing the information about the quasi-Fermi level splitting and upper limit of  $V_{\text{OC}}$ .

We found that post-treatment under sulphur-rich atmosphere resulted in significant reduction of nonradiative recombination. Samples that were annealed under optimal conditions and doped with chlorine (Cl) showed almost 20-fold increase in quantum yield. The calculated quasi-Fermi level splitting reached 560 meV representing the upper limit for  $V_{\text{OC}}$ . This value is the highest  $V_{\text{OC}}$  reported for  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  solar cell technology demonstrating the promising strategy for reduction of nonradiative recombination in  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  material.

While the precise mechanism in reduction of nonradiative recombination is not well understood, the reactive annealing under sulphur-rich atmosphere could be responsible for reduction of detrimental deep defects.

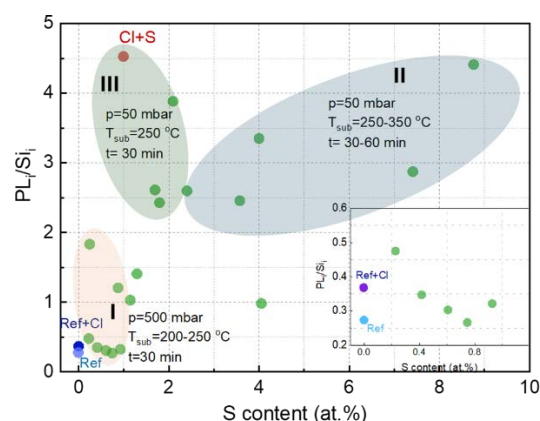


Fig.1 Normalized photoluminescence intensity as a function of sulphur incorporation in  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  thin films.

Recent theoretical study highlighted that selenium vacancy defects ( $V_{\text{Se}}$ ) are the most efficient recombination centres due to large carrier capture cross-sections [2]. Therefore, authors stressed that reducing concentration of  $V_{\text{Se}}$  is paramount for increasing  $V_{\text{OC}}$ . When  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  thin films are exposed to sulphur-rich atmosphere, the formation of point defects where sulphur occupies selenium position is highly promoted. According to calculations [3], sulphur substitutional defects introduce shallow defects with neutral charge state, thus neutralising deep  $V_{\text{Se}}$  defects. Reactive annealing under sulphur-containing atmosphere therefore provides means of reducing density of  $V_{\text{Se}}$  and increasing radiative recombination and in turn the performance of  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  solar cells.

**Keywords:** thin films,  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ , open-circuit voltage, photoluminescence, sulphurisation

### Reference

- [1] Z. Duan, X. Liang, Y. Feng, H. Ma, B. Liang, Y. Wang, S. Luo, S. Wang, R. Schropp, Y. Mai, Z. Li, Adv. Mat., **34**, 2202969 (2022).
- [2] X. Wang, S. R. Kavanagh, D. O. Scanlon, A. Walsh, Joule, **8**, 2105-2122 (2024).
- [3] Z. Cai, B. Che, Y. Gu, P. Xiao, L. Wu, W. Liang, C. Zhu, T. Chen, Adv. Mat., **36**, 2404826 (2024).

**Žodinė sesija 1A**  
**(Elementariųjų dalelių, atomų ir branduolių fizika,  
materijos sandara; Statistinė fizika)**

# CERN LHCb eksperimentas ir su juo susijusios veiklos Lietuvoje

## LHCb experiment at CERN and related activities in Lithuania

Mindaugas Šarpis<sup>1</sup>, Rūta Racz

<sup>1</sup> Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Vilnius, Lietuva

El. paštas: mindaugas.sarpis@cern.ch

LHCb (Large Hadron Collider beauty) eksperimentas, vykdomas CERN Didžiajame hadronų greitintuve, yra vienas iš keturių pagrindinių LHC detektorių, skirtas kvarkų ir gluonų sąveikoms tirti, tiksliai matuoti CP simetrijos pažeidimus bei ieškoti naujų dalelių ir fizikos reiškinių už Standartinio modelio ribų [2]. LHCb pasižymi unikaliu asimetriniu detektoriaus dizainu, optimizuotu b kvarkų ir c kvarkų turinčių hadronų registracijai, leidžiančiu ištirti retus skilimus ir jautriai testuoti kvantinės chromodinamikos (QCD) prognozes. Nuo 2010 m. surinkti duomenys sudaro keliasdešimt petabaitų, o naujoji Run 3 fazė suteikia dar didesnę tikslumą ir galimybę atrasti naujus fizikos reiškinius.

Viena reikšmingiausių LHCb tyrimų kryptių – egzotinių hadronų paieška ir jų struktūros analizė. Dar 2015 m. LHCb atrado pirmuosius pentakvarkų kandidatus, kurie ženkliai pakeitė mūsų supratimą apie kvarkų jungimosi mechanizmus ir stipriąją sąveiką [1]. Šie atradimai sukėlė proveržį hadroninės spektroskopijos srityje, atverdami kelią sudėtingesniems teoriniams modeliams, analizuojantiems penkių kvarkų būsenų sandarą bei jų sąveikų dinamiką. Dabartiniai tyrimai remiasi naujausiais Run 2 ir Run 3 duomenimis, leidžiančiais tikrinti hipotezes apie molekulinis pentakvarkus, di-kvarkų klasterizaciją bei kitus jungimosi scenarijus.

Lietuvoje šie tyrimai vykdomi Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto „LHCb Vilnius“ grupėje, kurią sudaro jauni tyrėjai, doktorantai ir studentai. Grupė specializuojasi  $\Lambda_b$  barionų skilimų analizių srityje, taikydama pažangius statistinius metodus ir duomenų analizės technologijas, kad aptiktų naujus pentakvarkų kandidatus bei nustatytų jų savybes. Atliekamos analizės reikalauja apdoroti itin didelius duomenų kiekius CERN skaičiavimo infrastruktūroje, taikant decentralizuotas „grid“ sistemas bei optimizuotus įrankius, tokius kaip DaVinci, Gaudi ir ROOT RDataFrame.

Svarbus „LHCb Vilnius“ grupės indėlis – tarptautinis bendradarbiavimas. Grupė glaudžiai dirba su garsiausiais pasaulio universitetais - MIT, Mančesterio, Heidelbergo bei kitomis LHCb institucijomis Europoje ir už jos ribų.

Ne mažiau svarbus aspektas – analizės atkuriamumas (analysis reproducibility) ir žinių perdavimas (knowledge transfer). Šiuolaikinėje didelio masto eksperimentų aplinkoje, kur analizuojami kelių petabaitų duomenų rinkiniai, būtina užtikrinti, kad gauti rezultatai būtų patikimi ir at-

eityje lengvai atkuriami. „LHCb Vilnius“ grupė aktyviai diegia pažangias skaičiavimo darbo eigų (workflow) sistemas, pagrįstas „Snakemake“ ir konteinerizuotomis analizės aplinkomis, kurios leidžia efektyviai dokumentuoti, dalintis ir atkurti analizės žingsnius. Tokie sprendimai užtikrina ne tik skaidrumą, bet ir sklandų naujų tyrėjų įtraukimą į sudėtingas analizes.

Atvirosios prieigos (Open Science) principai yra svarbi Lietuvos veiklos LHCb dalis. Grupės nariai aktyviai prisidėjo prie LHCb Run 1 atvirųjų duomenų publikavimo CERN portale, rengdami duomenų rinkinius, demonstracines analizes ir mokymo priemones, skirtas tiek studentams, tiek tyrėjams. Ši veikla padidina LHCb duomenų panaudojimo galimybes visame pasaulyje, stiprina žinių sklaidą ir leidžia kurti naujus mokymo metodus. Be to, organizuojami kursai, vasaros mokyklos ir praktinės dirbtuvės, skirtos studentams bei jauniems mokslininkams, taip skatinant Lietuvos dalelių fizikos bendruomenės augimą.

Apibendrinant, „LHCb Vilnius“ grupė ne tik prisideda prie reikšmingų atradimų, tokių kaip pentakvarkų paieška ir retų barionų skilimų analizė, bet ir aktyviai diegia naujus analizės metodus, stiprina duomenų atvirumą, kuria pažangias mokymo priemones ir palaiko žinių perdavimą tarp kartų bei institucijų. Tokia veikla ne tik didina Lietuvos matomumą tarptautinėje fundamentaliųjų tyrimų bendruomenėje, bet ir prisideda prie naujos kartos mokslininkų ugdymo, gebančių spręsti sudėtingiausias šiuolaikinės dalelių fizikos problemas.

*Reikšminiai žodžiai: CERN, LHCb, dalelių fizika, hadroninė spektroskopija, pentakvarkai, detektoriai*

## Literatūra

- [1] R. Aaij et al. Observation of  $J/\psi p$  resonances consistent with pentaquark states in  $\Lambda_b^0 \rightarrow J/\psi p K^-$  decays. *Phys. Rev. Lett.*, 115:072001, 2015.
- [2] A. A. Alves Jr. et al. The LHCb detector at the LHC. *JINST*, 3(LHCb-DP-2008-001):S08005, 2008.

# Far-Field Measurements of a Subwavelength Size Resonator in the Terahertz Range

## Tolimojo lauko matavimai sub-banginių matmenų dydžio vieno rezonatoriaus terahercų diapazone

Surya Revanth Ayyagari<sup>1</sup>, Simonas Indrišūnas<sup>2</sup>, Guillaume Ducournau<sup>3</sup> and Irmantas Kašalynas<sup>1</sup>

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

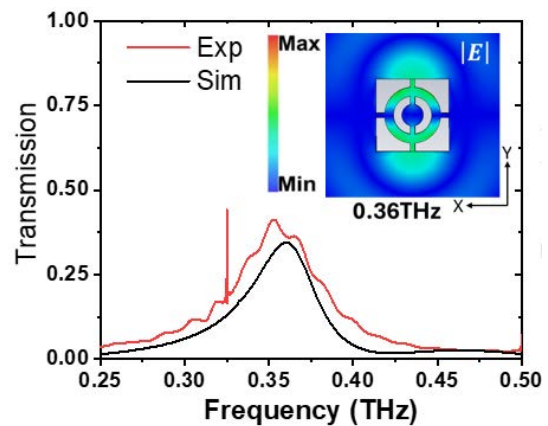
<sup>2</sup>Laser Microfabrication Laboratory, Center for Physical Sciences and Technology (FTMC), Savanoriu ave. 231, LT-02300 Vilnius, Lithuania

<sup>3</sup>Institut d'Electronique de Microélectronique et de Nanotechnologie (IEMN), UMR CNRS 8520, Université de Lille 1, 59652, Villeneuve d'Ascq CEDEX, France  
[surya.revanth@ftmc.lt](mailto:surya.revanth@ftmc.lt)

Typically, a subwavelength resonator, is designed to interact with incident electromagnetic (EM) waves in a controlled manner by scattering, absorbing, or redirecting light based on its geometry, arrangement, and material composition [1]. The cumulative effect of many such interactions of resonators with EM waves determines the overall response of a photonic device. Therefore, understanding of the EM response of a single resonator is essential for engineering and achieving desired macroscopic functionalities such as cloaking via anapole state, anomalous reflection, perfect absorption, and wavefront shaping [2]. Crucially, the EM response of a single resonator encapsulates the resonant modes supported by such as electric and magnetic dipoles, quadrupoles, or even higher-order multipoles [3]. Although the resonant characteristics of a resonator are primarily determined by its shape and inherent geometry [4], a surrounding photonic environment such as embedding apertures or nearby structural features influence significantly the overall resonance behavior [3].

In this work we developed a concentric disk- and ring-shaped planar sub-wavelength size resonator with inter-bridges surrounded with square and circular apertures of a free-standing thin metal film. The resonator was designed to exhibit a transparency at the resonant frequency of about 0.35 THz. The samples were fabricated of stainless-steel film by using a mask-less direct laser ablation (DLA) technology which allowed for precise control of dimensions on thin metal films. A VNA system from Rodhe & Schwarz with several frequency extenders controlled by a ZVA 24 VNA, the first in the range 220–325 GHz and the second from 325 to 500 GHz, was used to measure transmission spectra of a single resonator. Measured transmission spectra revealed that the resonance peak of a resonator was at the frequency of 0.35 THz possessing the linewidth at fullwidth-half maxima (FWHM) of about 40 GHz. Change in the transmission amplitude and the resonance peak position were found for the resonator embedded either in a square or in a circular aperture of free-standing metal film. Transmission spectra of the sub-wavelength resonator was measured in a far-field by introduction of a new approach which allowed to mitigate the diffraction

induced artifacts of the sample, the size of which was substantially smaller than the wavelength.



**Figure 1.** Transmission spectrum of a single resonator obtained by numerical simulations (black) and experimental measurements (red). Insets demonstrate the E-field distribution for incident beam polarized along X-axis of a single resonator embedded in a square aperture of metal frame at the resonance frequency of 0.36 THz.

### Acknowledgment

This work was supported by the EU H2020 ITN-MCS project TERAOPTICS under the grant agreement No. 956857 and EU Next Generation Grant under Measure No.#10-038-T-0186. The work also received support CPER WAVETECH @HdF project and Haut de-France Regional council, IEMN UHD flagship and PCMP-CHOP and RF Net platform.

### References:

- [1] S. B. Glybovski, S. A. Tretyakov, P. A. Belov, Y. S. Kivshar, and C. R. Simovski, “Metasurfaces: From microwaves to visible,” *Phys. Rep.*, vol. 634, pp. 1–72, May 2016, doi: 10.1016/j.physrep.2016.04.004.
- [2] I. A. Otoo *et al.*, “Broadband transparency in terahertz free-standing anapole metasurface,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 125, no. 26, Dec. 2024, doi: 10.1063/5.0246993.
- [3] S. R. Ayyagari *et al.*, “Experimental observation of mutual coupling in resonator array on thin-metal-film,” *J. Appl. Phys.*, vol. 137, no. 1, Jan. 2025, doi: 10.1063/5.0245081.
- [4] B. Liu, K. Song, and J. Xiao, “Two-Dimensional Optical Metasurfaces: From Plasmons to Dielectrics,” *Adv. Condens. Matter Phys.*, vol. 2019, pp. 1–15, Jan. 2019, doi: 10.1155/2019/2329168.

# Aplinkos su laike kintančiu difuzijos koeficientu aprašymas taikant statistinės fizikos metodus

## Description of an environment with a time-dependent diffusion coefficient using statistical physics methods

Rytis Kazakevičius<sup>1</sup>, Kristupas Kalvaitis<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius

[rytis.kazakevicius@tfai.vu.lt](mailto:rytis.kazakevicius@tfai.vu.lt)

Anomali difuzija (AD) apibrėžiama kaip netiesinis vidutinio kvadratinio nuokrypio augimas laikui bėgant. Dažnai AD aprašymui modifikuojama Fokkerio–Planko lygtis, įvedant trupmenines išvestines [1]. Šių modelių trūkumas yra tas, kad trupmeninių išvestinių ar kitų modifikacijų taikymas dažnai nėra siejamas su aiškiais fizikiniais mechanizmais.

Dėl to pastaruoju metu didėja susidomėjimas modeliais, kuriuose AD atsiranda natūraliai – pavyzdžiui, dėl difuzijos koeficiento priklausomybės nuo temperatūros. Vienas iš tokių modelių yra heterogeninės difuzijos procesas (HDP), aprašantis difuziją nehomogeninėje aplinkoje. Parodyta, kad dalelių judėjimas perslopintoje terpėje gali būti sėkmingai aprašytas HDP modeliu ir pasižymi anomalia difuzija [2].

Išsamūs HDP tyrimai, taip pat jų teorinės ir eksperimentinės taikymo galimybės kompleksinėse bei biologinėse sistemose, vykdomi Ralfo Metzlerio tyrimų grupėje Potsdamo universitete. Ši grupė aktyviai bendradarbiauja su kitais tarptautiniais partneriais [3]. Dalelių judėjimas perslopintoje aplinkoje taip pat gali būti modeliuojamas kaip Ornšteino–Ulenbeko procesas O–U(t), kurio parametrai kinta laike [4,5]. Šis modelis buvo taikytas analizuojant temperatūros ir trinties fluktuacijas harmoninio potencialo viduje [4], o rezultatai atskleidė specifinius laipsninius dėsnius, tokius kaip  $1/f$  triukšmas ir stacionarus laipsninis skirstinys [2,5].

Straipsnyje [4] buvo parodyta, kad dalelės judėjimą, veikiant harmoniniam potencialui,  $V(x) = k x^2$ , galima aprašyti stochastinių lygčių sistema.

$$\begin{aligned} dx_t &= \frac{1}{\tau_{hp}} (x - \bar{x}) dt + \sqrt{2D_t} dW_t^{(1)}, \\ dD_t &= \frac{1}{\tau_D} (D - \bar{D}) dt + \sigma \sqrt{2D} dW_t^{(2)}. \end{aligned} \quad (1)$$

Čia  $\bar{x}$  yra dalelės vidutinis nuokrypis nuo potencialo minimumo, o  $x - \bar{x}$  – dalelės fluktuacijos apie tą vidutinį nuokrypį.  $\tau_p = \gamma / k$  yra dalelės pozicijos koreliacijos trukmė, kur  $\gamma$  – trinties koeficientas, o  $k$  – kaip ir anksčiau, potencialo stiprumas.  $W(t) = d\zeta/dt$  – tai Vynerio procesas, kur  $\zeta(t)$  yra baltasis triukšmas, t. y. atsitiktinis skaičius, pasiskirstęs pagal Gauso (normalųjį) skirstinį  $N(0,1)$ .  $D(t)$  – laike atsitiktinai kintantis difuzijos koeficientas, kurio kitimas aprašomas apatine lygčių sistemos stochastine diferencialine lygtimi.  $\bar{D}$  – vidutinė difuzijos koeficiento vertė,  $\tau_D$  – difuzijos fluktuacijų koreliacijos trukmė, o  $\sigma$  – difuzijos koeficiento fluktuacijų amplitudė.

Tam tikru atveju, kai dalelė nėra veikiamą išorinio potencialo, jos judėjimas aprašomas stochastinių diferencialinių lygčių sistema:

$$\begin{aligned} dx_t &= \frac{1}{\tau_x} (x - \bar{x}) D_t dt + \sqrt{2D_t} dW_t^{(1)}, \\ dD_t &= \frac{1}{\tau_D} (D - \bar{D}) dt + \sigma \sqrt{2D} dW_t^{(2)}. \end{aligned} \quad (2)$$

Svarbu atkreipti dėmesį, kad (2) lygčių sistemos viršutinėje lygtyje dreifo narys papildomai priklauso nuo difuzijos koeficiento, o pozicijos koreliacijos trukmė priklauso tik nuo aplinkos klampos ( $\tau_x = 1/\gamma$ ).

Difuzijos koeficiento stochastiniam kitimui aprašyti dažniausiai naudojamas Ornšteino–Ulenbeko proceso modulio kvadratas. Tam tikslui taip pat taikomas CIR (Cox–Ingersoll–Ross) procesas [4]. Mes parodėme, kad šie modeliai yra ekvivalentūs. Skaitmeninio modeliavimo rezultatai rodo, kad modelis, aprašytas (1) lygčių sistema, gali relaksuoti tiek į Gauso, tiek į Laplaso tikimybės tankio skirstinį [4]. Atlikdami analitines aproksimacijas patvirtinome, kad tai iš tiesų vyksta, ir nustatėme tikslias sąlygas, kada susidaro Gauso, o kada – Laplaso skirstiniai.

Modeliui, aprašytam (1) lygčių sistema, momentai buvo tiksliai apskaičiuoti analitiškai. Tuo tarpu kitam modeliui, aprašytam (2) lygčių sistema, buvo nustatytos tik stacionarios momentų vertės [1]. Taikydami alternatyvų metodą [2,3], nustatėme tiksliai šių momentų priklausomybę nuo laiko.

Tikimės, kad gauti rezultatai prisidės prie gilesnio difuzijos procesų nehomogeninėje aplinkoje supratimo.

*Reikšminiai žodžiai: harmoninis potencialas, laike kintantis difuzijos koeficientas, statistinė fizika, Fokkerio ir Planko lygtis, stacionarus tikimybės tankio skirstinys*

### Literatūra

- [1] R. Metzler, J. Klafter, *Phys. Rep.* **339**, 1 (2000).
- [2] R. Kazakevičius, J. Ruseckas, *J. Stat. Mech.* **2015**, 02021 (2015).
- [3] Y. Xu, X. Liu, Y. Li, R. Metzler, *Phys. Rev. E* **102**, 062106 (2020).
- [4] Y. Lanoiselée, A. Stanislavsky, D. Calebiro, A. Weron, *Phys. Rev. E* **106**, 064127 (2022).
- [5] R. Kazakevičius, B. Kaulakys and J. Ruseckas, IEEE Conferences: Noise and Fluctuations (ICNF), 2013 22th International Conference on Noise and Fluctuations (Montpellier, France), p. 1-4 (2013).

**Žodinė sesija 1B**  
**(Lazerių fizika ir šviesos technologijos)**

## Metagrating-Integrated VCSELs for Compact Biophotonic Platforms

Mindaugas Juodėnas<sup>1,2</sup>, Erik Strandberg<sup>2</sup>, Hana Šípová-Jungová<sup>2</sup>, Mikael Käll<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>Chalmers University of Technology, Department of Physics, Kemigården 1, 412 96 Gothenburg, Sweden

[mindaugas.juodenas@ktu.lt](mailto:mindaugas.juodenas@ktu.lt)

Optical metasurfaces are poised to transform biophotonics by replacing bulky conventional components with compact, on-chip solutions [1]. However, realizing fully integrated devices requires the direct, monolithic integration of metasurfaces with optoelectronic components, a process often hampered by fabrication challenges. This is particularly true for applications like high-contrast microscopy and surface plasmon resonance (SPR) sensing, which demand efficient, high-angle beam steering that is difficult to achieve with standard designs.

We present a versatile platform based on monolithically integrated GaAs metagratings on bottom-emitting, oxide-confined vertical-cavity surface-emitting lasers (VCSELs) lasing at  $\lambda = 984$  nm [2]. To achieve the required high-angle deflection, we developed an unconventional metagrating design where a key constraint was to keep all etched trenches of equal width. This approach completely circumvents aspect-ratio dependent etching (ARDE) issues, a notorious problem in monolithic fabrication that deteriorates performance, thereby enabling high-fidelity structures with exceptional efficiency. By arranging these gratings into a novel, offset-axicon-based configuration, the inherently divergent Gaussian emission from the VCSEL is transformed into a quasi-collimated, fan-shaped beam—collimated out-of-plane while maintaining Gaussian divergence in-plane.

This on-chip illumination source was first applied to high-contrast microscopy. We demonstrated off-axis emission centered at  $63^\circ$  in glass with over 70% relative deflection efficiency, enabling on-chip Total Internal Reflection (TIR) and Dark-Field (DF) illumination without conventional high-NA objectives. The generated illumination area is long and narrow, making it suitable for targeted observation within microfluidic channels. By integrating an array of VCSELs with distinct metagrating designs on a single chip, we demonstrated rapid, electronic switching between DF and TIR imaging modes for observing Au nanoparticles and live human endothelial cells.

Second, we adapted this technology to create an essentially flat surface plasmon resonance (SPR) biosensor for label-free biomolecular analysis in the well-known Kretschmann configuration [3]. The metalaser is bonded to a glass slide, and its fan-shaped emission is directed towards a 50 nm thick gold film that interfaces with a sample delivered via polydimethylsiloxane (PDMS) microfluidic channels. The reflected light, carrying the SPR signature, is

internally reflected to the top of the chip where a periodic array of gold lines acts as a discrete outcoupler, allowing the spatial intensity profile to be captured by a standard camera. This architecture generates the required fan of light for angle-resolved measurements directly on-chip, completely eliminating the need for bulky prisms and external coupling optics.

The SPR system demonstrated a bulk sensitivity of  $90.45^\circ/\text{RIU}$  and achieved a refractive index resolution of  $4.9 \cdot 10^{-6}$  RIU after filtering noise from the fluidic pump. As a proof-of-concept for diagnostics, the sensor performed multiplexed detection of microRNA-122 (miR-122), a known circulating biomarker for drug-induced liver injury. The assay achieved a limit of detection (LoD) of 0.1 nM via direct hybridization of the target to surface-immobilized DNA probes and an enhanced LoD of 0.02 nM using a signal amplification step with antibodies selective for RNA-DNA duplexes.

In conclusion, our work establishes a robust and scalable platform that integrates coherent light sources with advanced beam-shaping metasurfaces. By demonstrating high performance in both advanced microscopy and sensitive biosensing, this technology paves the way for fully integrated, low-cost, and portable biophotonic systems suitable for lab-on-a-chip diagnostics and point-of-care applications.

**Keywords:** VCSEL, metagrating, nanofabrication, metasurface, microscopy, biosensing, biophotonics.

### References

- [1] Y. Yang, J. Seong, M. Choi, J. Park, G. Kim, H. Kim, J. Jeong, C. Jung, J. Kim, G. Jeon, K. Lee, D. H. Yoon, and J. Rho, *Light: Science & Applications* **12**, 152 (2023).
- [2] M. Juodėnas, E. Strandberg, A. Grabowski, J. Gustavsson, H. Šípová-Jungová, A. Larsson, and M. Käll, *Light: Science & Applications* **12**, 251 (2023).
- [3] E. Strandberg, M. Juodėnas, H. Šípová-Jungová, and M. Käll, *ACS Sensors* *under review* (2025).

# Netiesinių X-bangų įtaka atbulinės bangos šviesos parametriniam osciliatoriui kaupinamam subnanosekundiniais lazeriniais impulsais

## Influence of nonlinear X-waves on backward-wave optical parametric oscillator pumped by subnanosecond laser pulses

Viktorija Tamulienė, Tomas Latvys, Jonas Banys, Vygandas Jarutis, Julius Vengelis

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

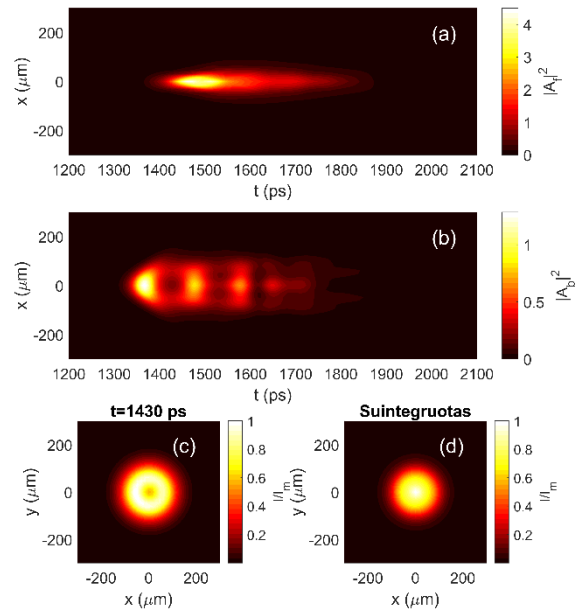
[viktorija.tamulienė@ff.vu.lt](mailto:viktorija.tamulienė@ff.vu.lt)

Subnanosekundiniai (300 ps – 1 ns trukmės) šviesos impulsai generuojami kompaktiškų mikrolazerių taikomi įvairiose srityse, nereikalaujančiose didelės laikinės (tokios kaip femtosekundinių lazerių) ir dažninės (tokios kaip nanosekundinių impulsų) skyros. Šviesos parametrinė generacija leidžia keisti tokių impulsų bangos ilgį, tačiau šiam procesui startuojant nuo kvantinių triukšmų [1], generuojamų pluoštų ir impulsų kokybė būna prasta. Atbulinės bangos šviesos parametrinis osciliatorius (ABŠPO), pirmą kartą pademonstruotas [2] darbe pikosekundiniams impulsams, o [3] darbe subnanosekundiniams impulsams, leidžia ženkliai pagerinti generuojamų šviesos impulsinių pluoštų kokybę. Šiame darbe mes teoriškai modeliuojame subnanosekundinį ABŠPO ir parodome, kad jame formuojasi netiesinės X-bangos [4].

Netiesinės X-bangos natūraliai formuojasi vykstant šviesos parametrinei sąveikai. Jos paklūsta dispersiniam sąryšiui, reiškiančiam, kad kiekvieno bangų sudarančio bangos vektoriaus išilginis komponentas sklinda tuo pačiu greičiu – X-bangos greičiu. X-bangos greitis gali viršyti šviesos greitį, o taip pat būti neigiamas. Šiame darbe nagrinėjome du mikrolazerio kaupinimo atvejus: pagrindinės harmonikos ( $\lambda=1064$  nm) ir antrosios harmonikos ( $\lambda=532$  nm). Impulsų trukmės atitinkamai buvo 520 ps ir 450 ps. Parodome, kad abiem atvejais X-bangos sklinda greičiais mažesniais už šviesos greitį, tačiau jų ženklai skiriasi: kaupinant pagrindinę harmoniką periodiškai poliutą netiesinį PPKTP kristalą (periodas  $\Lambda=427$  nm), X-bangos greitis neigiamas.

Ankstesniuose darbuose taip pat buvo modeliuojama ABŠPO generuojamų priekinės ir atbulinės bangų dinamika, tačiau jie nagrinėjo vienmatį modelį, įskaitantį tik laikinį kitimą. Tuo tarpu šiame darbe modelis praplečiamas į trimatę erdvę, įskaitančią šviesos pluošto skirstinį erdvėje. Skaitmeninis modeliavimas leidžia taip pat „pažiūrėti“, kaip bangos kinta kristalo viduje. Modeliavimais buvo patvirtinta teorinė išvada, kad kaupinimo pagrindinė harmonika atveju X-bangos greitis neigiamas, tai yra stebimas judėjimas priešinga faziniam greičiui kryptimi. Taip pat buvo suskaičiuoti sugeneruotų priekinės ir atbulinės bangų erdviniai-laikiniai skirstiniai, 1a ir 1b pav. Dėl netiesinių X-bangų formavimosi pluošto sandara tam tikrais laiko momentais būna kūginė, 1c pav., nors, suintegravus pagal laiką (taip pat matuojant eksperimente) kūginės sandaros nesimato, 1d pav. Kūginių bangų susidarymas lemia tai, kad sugeneruotų bangų smailinis intensyvumas viršija pradinį kaupinimo

intensyvumą, o tai gali lemti kristalo lazerio indukuoto pažeidimo slenksčio sumažėjimą.



1 pav. Sumodeliuoti priekinės (a) ir atbulinės (b) bangų erdviniai-laikiniai skirstiniai. Atbulinės bangos erdvinis skirstinys laiko momentu  $t=1460$  ps (c) ir suintegruotas pagal laiką pluoštas (d). AH kaupinimas, kaupinimo energija  $E=0,1$  mJ.

*Reikšminiai žodžiai:* atbulinės bangos šviesos parametrinis osciliatorius, subnanosekundiniai lazerio impulsai, netiesinės X-bangos.

### Literatūra

- [1] V. Tamulienė, G. Stanionytė, T. Latvys, J. Vengelis, Heliyon, **10**, e37513 (2024).
- [2] C. Canalia, V. Pasiskevicius, Nat. Photon., **1**, 459 (2007).
- [3] J. Banys, J. Jakutis Neto, A. Zukauskas, V. Pasiskevicius, V. Jarutis, J. Vengelis, APL Photonics, **10**, 036123 (2025).
- [4] T. Latvys, J. Banys, V. Jarutis, J. Vengelis, V. Tamulienė, Phys. Rev. A, **111**, 063517 (2025).

# Didelio pasikartojimo dažnio ir didelės vidutinės galios parametrinis šviesos stiprintuvas artimojoje infraraudonojoje spektro srityje

## High repetition rate and high average power optical parametric amplifier in the near-infrared spectral range

Jokūbas Pimpė<sup>1,2</sup>, Simona Armalytė<sup>1</sup>, Audrius Dubietis<sup>1</sup>, Julius Vengelis<sup>1</sup>

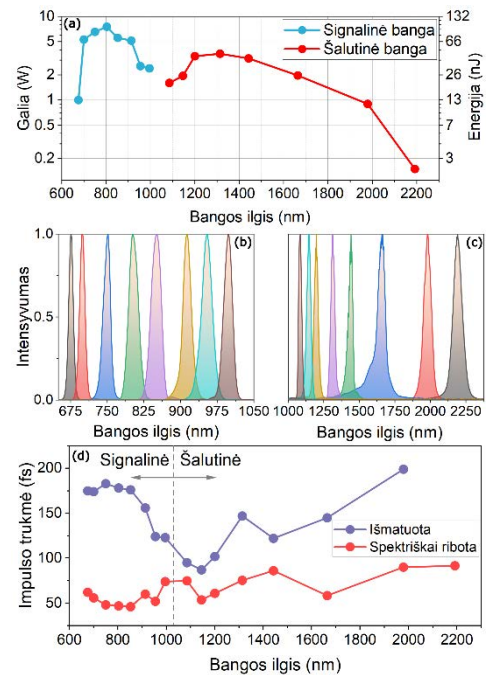
<sup>1</sup>Vilniaus Universitetas, Lazerinių Tyrimų Centras, Saulėtekio a. 10, LT-10223 Vilnius

<sup>2</sup>Light Conversion Ltd., Keramikų g. 2b, LT-10233 Vilnius

[jokubas.pimpe@ff.vu.lt](mailto:jokubas.pimpe@ff.vu.lt)

Didelio impulsų pasikartojimo dažnio (40–100 MHz) parametriniai šviesos stiprintuvai (PŠS) leidžia reikšmingai pagerinti signalo ir triukšmo santykį bei padidinti duomenų surinkimo greitį [1]. Tai yra ypač aktualu taikymams, apimantiems ultrasparčiąją laiko skynos spektroskopiją, didelės spartos daugiaspektrinę vaizdinimą bei netiesinę mikroskopiją [2,3]. Vis dėlto praktikoje tokių optinių šviesos stiprintuvų, kaupinamų femtosekundiniais Yb osciliatoriais, realizavimas susiduria su esminiu ribojimu – itin žema osciliatoriaus impulsų energija, apribota dideliu impulsų pasikartojimo dažniu bei žema vidutine galia. Visgi, pastaraisiais metais sukurti didelės vidutinės galios ir didelio pasikartojimo dažnio femtosekundiniai lazeriniai stiprintuvai, pagrįsti čirpuotų impulsų stiprinimu Yb jonais legiruotuose strypo tipo fotoninių kristalų šviesolaidžiuose, leidžia padidinti impulso išvadinę galią daugiau nei 10 kartų ir išlaikyti osciliatoriaus pasikartojimo dažnį [4]. Naujos kartos didelės galios ir didelio pasikartojimo dažnio femtosekundinės sistemos atveria naujas galimybes kuriant derinamo dažnio parametrinius šviesos stiprintuvus.

Šiame darbe pristatome didelio pasikartojimo dažnio (76 MHz), didelės vidutinės galios femtosekundinę parametrinę šviesos stiprintuvo sistemą, kaupinamą femtosekundinę lazerinę sistemą, pagrįstą hibridinio stiprinimo metodu Yb legiruotame strypo tipo šviesolaidiniame stiprintuve. PŠS sudarytas iš dviejų stiprinimo pakopų ličio triborato (LBO) kristaluose, kaupinamuose 30 W antrosios harmonikos impulsais. Superkontinuumo užkrato signalas generuojamas tūriniam nelegiruotame kalio gadolinio volframat (KGW) kristale ir dengia spektrinę sritį nuo 670 nm iki 1,2  $\mu$ m. Sukurta sistema pasižymi plačiu bangos ilgio derinimo diapazonu – nuo 675 nm iki 2,2  $\mu$ m; suspaudus impulsus, signalinės bangos trukmė yra trumpesnė nei 70 fs, o šalutinės bangos – trumpesnė nei 100 fs. Sistemos išvadinė galia viršija 11 W, kas yra didžiausia iki šiol užfiksuota vertė tarp femtosekundinių PŠS, veikiančių itin dideliu – 76 MHz – pasikartojimo dažniu. Sistema taip pat pasižymi puikiu galios stabilumu – apie ~1 % RMS tiek signalinei, tiek šalutinei bangoms, bei itin mažu santykiniu intensyvumo triukšmu (RIN) visame 300 Hz – 40 MHz dažnių diapazone.



1 pav. (a) 76 MHz LBO PŠS signalinės (mėlynas) ir šalutinės (raudona) bangų vidutinės galios priklausomybė nuo bangos ilgio. Signalinės (b) ir šalutinės (c) bangų spektrinės charakteristikos visame derinimo ruože. (d) Išmatuotos sustiprintų impulsų (mėlynas) ir teoriškai apskaičiuotos atitinkamai spektriškai ribotų (raudona) impulsų trukmės.

*Reikšminiai žodžiai: parametrinis šviesos stiprinimas, superkontinuumo generacija, šviesolaidinis lazerinis stiprintuvas.*

### Literatūra

- [1] Piland, G., and Grumstrup, E. M., High-repetition rate broadband pump-probe microscopy, *J. Phys. Chem. A* **123**, 40 8709-8716 (2019).
- [2] G.M. Greetham, D. Sole, I. P. Clark, A. W. Parker, M. R. Pollard and M. Towrie, Time-resolved multiple probe spectroscopy, *Rev. Sci. Instrum.* **83**, 103107 (2012).
- [3] K. Suhling, P. M. W French, and D. Phillips, Time-resolved fluorescence microscopy, *Photochem. Photobiol. Sci.* **4**, 13-22 (2005).
- [4] K. Suhling, P. M. W French, and D. Phillips, Time-resolved fluorescence microscopy, *Photochem. Photobiol. Sci.* **4**, 13-22 (2005).
- [4] J. Pimpe, J. Banys, S. Armalyte, J. Jakutis Neto, V. Jarutis, A. Dubietis, J. Vengelis, Highly Stable, 72 W Average Power, 76 MHz Repetition Rate Femtosecond Hybrid PCMA-FCPA Yb-Fiber Amplifier, *Opt. Laser Technol.* **190** (2025) 113261.

# Vienalytė aukštos energijos impulsų antrinė spūda stiklo plokštelėje iki 1,5 optinio ciklo

## Homogeneous high energy pulse post-compression in a single thin plate to 1.5 optical cycles

Gaudenis Jansonas<sup>1</sup>, Dominykas Karvelis<sup>1</sup>, Pija Gadonaitė<sup>1</sup>, Arūnas Varanavičius<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10222, Vilnius  
[gaudenisjansonas@yahoo.com](mailto:gaudenisjansonas@yahoo.com)

Impulsų antrinė spūda šiuo metu yra labai populiarus ir naudingas įrankis padedantis apeiti optinių stiprintuvų spektrinės juostos ribojimus [1]. Metodas susideda iš netiesinės spektro pločio plėtos dėl fazės moduliavimosi ir pakartotinės tiesinės dispersijos nulemtos impulso spūdos. Šiose tezėse mes pranešame apie savo naujausius bandymus pasinaudoti antrine impulso spūda peržengiant optinio parametrinio faziškai moduluotų impulsų stiprinimo [2] sistemos ribas. Pradinė sistema 200 Hz pasikartojimo dažniu generuoja 5 mJ energijos ir 7,7 fs trukmės impulsus su vienalyčiu energijos tankio skirstiniu. Erdvėje vienoda netiesinė spektro plėtra buvo pasiekta atvaizduojant paskutinėje stiprinimo pakopoje suformuotą plokščios viršūnės pluoštą į 1 mm storio lydyto kvarco plokštelę vakuume (pagrindinės detalės iliustruotos 1 pav.).

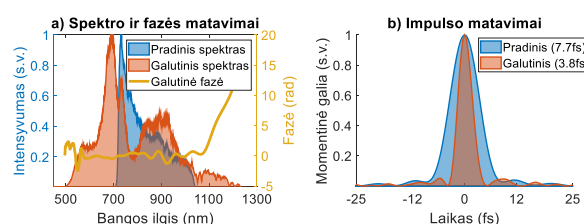


1 pav. Principinė netiesinės spektro plėtos iliustracija.

Impulso spūdai vakuume buvo naudotos pleišto formos prizmių ir dispersiją kompensuojančių veidrodžių poros. Charakterizavome galutinio bangų paketo erdvinę spektrinę skirstinį, optimizavome pluošto fokusavimo kokybę su deformuojamu veidrodžiu, pastatytu prieš stiklo plokštelę, ir pritaikėme paprastą skaitinį netiesinio sklaidimo modelį siekiant atkartoti išmatuotas spektrines savybes.

Keičiant plokštelės poziciją sąsmaukos atžvilgiu stebėjome kintančią spektro plėtrą, kuri siekė 2,75 karto. Išmatuoti spektrai buvo gerai atkartoti modelio. Pagrindiniai impulso spūdos rezultatai pateikti 2 pav. Buvo pasiektas dviejų kartų impulso sutrumpėjimas iki 3,8 fs, o tai atitinka 1,5 elektrinio lauko susvyravimo. Santykinė smailinė galia spektru riboto impulso atžvilgiu sumažėjo nuo 100 % iki 64 %. Finalinis impulsas buvo gerai numatytas skaitinio modelio. Buvo pasiektas geras erdvinis-spektrinis vienalytiškumas, kuris dėl šviesos saviveikos sumažėjo nuo 99,5 % iki 97,1 %. Deformuojamo veidrodžio pagalba buvo pasiektas 0,88 Štrelio santykis nepaisant bangos fronto iškraipymus kuriančios netiesinės sąveikos. Antrinės spūdos sistemos išėjime buvo pamatuota 2,09 mJ impulso energija ir 47 % schemos pralaidumas. Pastarasis buvo ribotas aplinkybinių tiesinių nuostolių ir galėtų būti pakeltas iki

70 %-85 % naudojant skaidrinančias dangas, dielektrinius spindulio lankstymo veidrodžius ir perprojektuojant optinę schemą su mažiau elementų. Visi aprašyti rezultatai yra detaliau aptarti išankstinėje publikacijos versijoje [3].



2 pav. Pagrindiniai eksperimentiniai rezultatai prieš ir po impulso antrinės spūdos. a) - išmatuoti spektrai ir galutinė spektrinė fazė. b) – išmatuoti impulsai su skliausteliuose pažymėta impulso trukme pusės smailinės galios aukštyje.

Apibendrinant, buvo parodytas 2 kartų impulso sutrumpinimas iki 3,8 fs trukmės, atitinkančios 1,5 optinio ciklo. Toks trumpas impulsas yra labai naudingas stipraus lauko fizikos taikyme efektyviai generuojant izoliuotus atosekundinius impulsus [4]. Mūsų žiniomis, impulsų antrinę spūdą vienoje plonoje stiklo plokštelėje iki mažiau nei 4 fs trukmės pademonstravome pirmą kartą 5 mJ energijos lygio plokščios viršūnės pluošto formos režime. Buvo parodyta sėkminga deformuojamo veidrodžio fokusavimo kokybės korekcija net stipraus netiesinio proceso aplinkoje. Paprastas netiesinio sklaidimo skaitinis modelis gerai atkartojė eksperimentų rezultatus. Naudota laisvos erdvės architektūra suteikia patogų sistemos dydžio proporcingumą augant smailinei galiai. Tai implikuoja galimybę pritaikyti aprašytų eksperimentų rezultatus kuriant džaulių energijos lygio kelių optinių ciklų lazerines sistemas.

*Reikšminiai žodžiai: netiesinė optika, kelių optinių ciklų impulsai, optinis parametrinis faziškai moduluotų impulsų stiprinimas.*

### Literatūra

- [1] T. Nagy, P. Simon, and L. Veisz, Adv. Phys. X **6**, 1845795 (2021).
- [2] A. Dubietis, G. Jonušauskas, and A. Piskarskas, Opt. Commun. **88**, 437 (1992).
- [3] G. Jansonas, A. Varanavičius, D. Karvelis, P. Gadonaitė, Optica Open, High Energy Few-Cycle Pulse Post-Compression in a Single Thin-Plate with a Spatially-Uniform Beam Profile, Preprint (2025).
- [4] F. Ferrari, F. Calegari, M. Lucchini, C. Vozzi, S. Stagira, G. Sansone, and M. Nisoli, Nat. Photonics **4**, 875 (2010).

# **Žodinė sesija 1C**

## **(Cheminė fizika)**

# BODIPY molekulinį jutiklį kūrimas naudojant skaičiuojamosios chemijos modelius

## Design of BODIPY molecular sensors by means of computational models

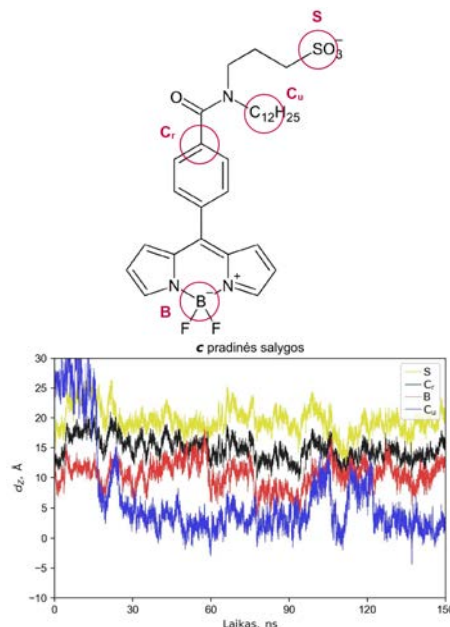
Stepas Toliautas<sup>1</sup>, Domantas Narkevičius<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 9-III, LT-10222 Vilnius  
[stepas.toliautas@ff.vu.lt](mailto:stepas.toliautas@ff.vu.lt)

Boro dipirometeno (BODIPY) dariniai yra šviesai jautrios molekulės, tyrinėjamos siekiant panaudoti jas kaip mikroskopinius cheminės ar biologinės terpės parametrų (klampos, temperatūros ar poliškumo) jutiklius. Dėl galimų darinių ir matuojamos terpės įvairovės, eksperimentinis molekulių sintezės ir matavimo ciklas nėra efektyvus atrenkant darinius su geriausiomis savybėmis. Jungiant matavimus su molekulės optinį sužadinimą aprašančiu kvantinės chemijos modeliu [1], tampa įmanoma prognozuoti ir sintetinti jutiklius su pageidaujamomis savybėmis, pvz., plačiu jautrumo klampa diapazonu, biologiniams taikymams tinkamu fluorescencijos bangos ilgiu ar papildomu jautrumu temperatūrai [2].

Visgi norint nagrinėti BODIPY darinių vyksmus po optinio sužadinimo kitose terpėse, pvz., poliniuose tirpikliuose ar ląstelės membranoje [3], reikia sudėtingesnių teorinių modelių, tiesiogiai įskaitančių ir pačios terpės molekulinę struktūrą. Kombinuoti molekulių dinamikos ir kvantinės mechanikos modeliai suteikia galimybę tinkamai įvertinti tiriamo jutiklio jautrumą poliškumui [4] ar jo tendenciją selektyviai kauptis ląstelės membranoje [5]. Šiuo atveju vienu iš pagrindinių iššūkių tampa skaičiavimų resursai, reikalingi modeliuoti pakankamą kiekį tirpiklį sudarančių molekulių ir jų atomų terpėje aplink molekulinį jutiklį.

Pristatomi tyrimai iš dalies finansuoti Lietuvos mokslo tarybos (S-MIP-23-48). Skaičiavimams buvo naudotas Vilniaus universiteto aukšto našumo superkompiuteris „VU HPC“ Fizikos fakulteto dalyje.



1 pav. BODIPY-PM jutiklio (viršuje) įsitvirtinimo lipidinėje membranoje simuliacijos naudojant molekulių dinamiką rezultatai [5]

*Reikšminiai žodžiai: BODIPY jutikliai, elektroninės energijos būsenos, molekulinės terpės modeliai, tankio funkcionalo teorija, molekulių dinamika.*

### Literatūra

- [1] S. Toliautas, J. Dodonova, A. Žvirblis, I. Čiplys, A. Polita, A. Devižis, S. Tumkevičius, J. Šulskus, and A. Vyšniauskas, *Chem. Eur. J.* **25**, 10342 (2019).
- [2] K. Maleckaitė, D. Narkevičius, R. Žilėnaitė, J. Dodonova, S. Toliautas, S. Tumkevičius, and A. Vyšniauskas, *Molecules* **27**, 23 (2022).
- [3] A. Polita, M. Stancikaitė, R. Žvirblis, K. Maleckaitė, J. Dodonova-Vaitkūnienė, S. Tumkevičius, A.P. Shivabalan, G. Valinčius, *RSC Adv.* **13**, 19257 (2023).
- [4] D. Narkevičius and S. Toliautas, *Lith. J. Phys.* **64**, 11 (2024).
- [5] D. Narkevičius, magistro studijų baigiamasis darbas, Vilniaus universitetas (2024).

# Cholino lizinato ir vandens mišinių tarpmolekulinės struktūros tyrimas BMR ir molekulių dinamikos / kvantinės mechanikos metodais

## Intermolecular organization in aqueous mixtures of choline lysinate studied by NMR and molecular dynamics / quantum mechanics

Einaras Sipavičius<sup>1</sup>, Lukas Mikalauskas<sup>1</sup>, Vytautas Klimavičius<sup>1</sup>, Kęstutis Aidas<sup>1</sup>

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

[einaras.sipavicius@ff.vu.lt](mailto:einaras.sipavicius@ff.vu.lt)

Trečiosios kartos joniniai skysčiai (JS) yra žemesnėje nei 100 °C temperatūroje besilydančios, iš jonų sudarytos, biosuderinamos ir biologiškai skaidžios medžiagos. Iš cholino katijono ir aminorūgščių anijono sudarytos druskos (ChoAA) yra tarp labiausiai tyrinėjamų trečiosios kartos JS. Jų pridėjimas į vandeninę terpę smarkiai padidina kai kurių vaistų (pavyzdžiui, glibenklamido [1]) ir makromolekulių (pavyzdžiui, biomasėje esančio lignino [2]) tirpumą vandenyje. Tirpinimo mechanizmas glaudžiai susijęs su tarpmolekuline struktūra, kuri ChoAA ir vandens mišiniuose yra sudėtinga, pasižyminti nanosegregacija (skirtingo poliškumo nanodomenų atsiskyrimu) [3]. Sistemų morfologiją apsprendžia katijono ir anijono funkcinės grupės bei jų tarpusavio sąveikos.

Cholino lizinato (ChoLys) ir vandens mišinių struktūros aprašymui kitos mokslinės grupės yra taikiusios neutronų ir Rentgeno spindulių difrakcijos eksperimentus, derinamus su molekulinės dinamikos simuliacijomis [2, 4], bet gaunami prieštaringi rezultatai. Mūsų tyrimo [5] strategija sudaryta iš trijų dedamųjų: 1) molekulinės dinamikos (MD) simuliacijų, kurios suteikia struktūrinę ir dinaminę informaciją apie mišinį; 2) kvantinės mechanikos / molekulinės mechanikos (KM/MM) skaičiavimų, kurie atliekami naudojant MD simuliacijų konfigūracijas, kvantinės mechanikos lygtimis traktuojant tik artimiausią aplinką aplink pasirinktą centrinę dalelę – tokiu būdu gaunamos branduolių ekranavimo konstantos; 3) branduolių magnetinio rezonanso (BMR) spektroskopijos matavimų, kurie leidžia validuoti MD simuliacijomis gaunamus difuzijos koeficientus ir KM/MM skaičiavimais gaunamas ekranavimo konstantas.

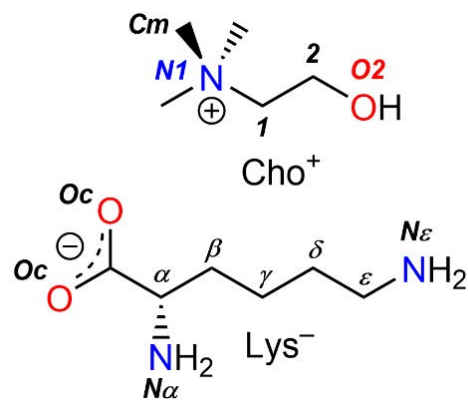
Atlikę MD simuliacijas šešioms skirtingoms sudėties ChoLys:vanduo sistemoms (nuo joninio skysčio molinės dalies  $\chi_{JS} = 2,5 \cdot 10^{-4}$  iki  $\chi_{JS} = 0,50$ ) apskaičiavome radialinio pasiskirstymo funkcijos tarp cholino N1, O2, Cm, lizinato Oc, N $\alpha$ , N $\epsilon$  ir vandens deguonies atomo Ow porų (1 pav.). Visos funkcinės grupės dalyvauja vandenilinių ryšių tinkle, kuriame dominuoja Ow atomai labiau praskiestose sistemose ir Oc – daugiau JS praturtintose sistemose, o cholino teigiamai įkrautos NMe $_3^+$  tokiose sistemose keičia vandenilinius ryšius į elektrostatinio ir dispersinio tipo sąveikas.

Agregacijos analizės būdu, t.y. skaičiuodami tikimybių  $P(n)$  skirstinius, kad vanduo, polinės jonų dalys ir nepolines jonų dalys sudarys klasterius iš  $n$  dalelių, įsitikinome, jog esant  $\chi_{JS} \geq 0,30$  vyrauja jonų

tinklas su mažais vandens klasteriais, kuris pereina į vandens molekulių tinklą su jonų nanodomenais ties  $\chi_{JS} = 0,10$ . Apskaičiuoti difuzijos koeficientai (kokybiškai gerai derantys su  $^1H$  BMR matavimų rezultatais) perėjimo tarp dviejų mezoskopinių režimų ribą patikslino iki maždaug  $\chi_{JS} = 0,11$ .

Galiausiai, atlikę 100 KM/MM skaičiavimų serijas ir atskirų konfigūracijų rezultatus suvidurkinę, apskaičiavome  $^1H$  BMR ekranavimo konstantas H1, H2, H $\alpha$ , H $\epsilon$  ir vandens Hw protonams. H $\alpha$  ir Hw ekranavimo konstantos kokybiškai ir kiekybiškai gerai atitiko eksperimentinius spektrus, įrodant, jog Hw protonai dalyvauja greitoje protonų apykaitoje su cholino –OH ir lizinato –NH $_2$  grupėmis. Taip pat kokybiškai tikslūs rezultatus gavome H1 ir H2 protonams. Šie atitikimai validavo atliktas simuliacijas ir gautus struktūrinius sistemų rezultatus.

Padėkas išreiškiame „HPC Saulėtekis“ už suteiktus skaičiavimo resursus ir Lietuvos mokslo tarybai už suteiktą finansavimą (projekto nr. S-MIP-22-74).



1 pav. Cholino lizinato joninio skysčio cheminė struktūra ir svarbiausi atomų žymenys.

*Reikšminiai žodžiai: joniniai skysčiai, branduolių magnetinis rezonansas, molekulių dinamika, kvantinė mechanika.*

### Literatūra

- [1] Ž. Murnikova, V. Klimavičius, F. Mocchi, A. Laaksonen, K. Aidas, J. Mol. Liq. **422**, 127153 (2025).
- [2] H. J. Jiang, S. Miao, S. Imberti, A. B. Simmons, R. Atkin, G. G. Warr, Green Chem. **23**, 856 (2021).
- [3] R. Hayes, G. G. Warr, R. Atkin, Chem. Rev. **115**, 6357 (2015).
- [4] L. Gontrani, Biophys. Rev. **10**, 873 (2018).
- [5] E. Sipavičius, L. Mikalauskas, V. Klimavičius, K. Aidas, Phys. Chem. Chem. Phys. **27**, 14790 (2025).

# Ar fluorescencijos slopinimo kinetika yra veiksminga priemonė analizuoti fluorescencijos gesinimo kilmę ir van der Valso sąveikos pasireiškimą?

## Is fluorescence decay kinetics an effective tool to analyze the origin of fluorescence quenching and the manifestation of van der Waals interaction?

Ivan Halimski<sup>1</sup>, Paulius Rindzevičius<sup>1,2</sup>, Jelizaveta Fedotova<sup>1,2</sup>, Simona Streckaitė<sup>1</sup>, Martynas Talaikis<sup>1</sup>, Andrej Dementjev<sup>1</sup>, Andrius Gelzinis<sup>1,3</sup>, Bruno Robert<sup>4</sup>, Patrizia Lamberti<sup>5</sup>, Darius Abramavicius<sup>3</sup>, Leonas Valkunas<sup>1</sup>, Maksim Shundalau<sup>5,6</sup>, Renata Karpicz<sup>1</sup>, Jevgenij Chmeliov<sup>1,3</sup>

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

<sup>2</sup>Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius, Lithuania

<sup>3</sup>Institute of Chemical Physics, Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

<sup>4</sup>Institute of Integrative Biology of the Cell, Paris-Saclay University, 1 Av. de la Terrasse Bâtiment 21, 91190 Gif-sur-Yvette, France

<sup>5</sup>Department of Information and Electrical Engineering and Applied Mathematics, University of Salerno, via Giovanni Paolo II 132, 84084 Fisciano, Italy

<sup>6</sup>Faculty of Physics, University of Warsaw, ul. Pasteura 5, 02-093 Warsaw, Poland

[ivan.halimski@ftmc.lt](mailto:ivan.halimski@ftmc.lt)

Fluorescence (FL) concentration quenching (CQ) is a phenomenon when FL quantum yield (QY) decreases upon increase of molecular concentration of fluorophore. In principle, CQ can be attributed to any phenomenon leading to QY decrease [1]. However, most often CQ occurs either due to energy transfer from fluorophore to some kind of excitation trap [2], where excitation is lost, or due to changes in the sample's morphology with the increase of concentration [3]. CQ results in the loss of energy, and that is why for practical purposes it has to be controlled and limited.

Van der Waals (vdW) interaction nowadays plays a crucial role in optoelectronic and photonic applications, when two compounds in a vdW heterostructure exhibit modified properties. For example, FL properties of *trans*-stilbene and porphyrin are modified upon vdW interaction with two-dimensional hexagonal boron nitride [4,5].

Therefore, it is important to understand what experimental techniques in what cases would be the most effective tool to study particular system. Steady-state FL spectroscopy is the most popular technique, however in some cases FL decay kinetics can provide even more useful information.

In this work we provide deep analysis of FL decay kinetics applied to study CQ in high concentrated solutions of free-base and zinc-phthalocyanine (TTBPc and ZnTTBPc), CQ in spin-coated *trans*-stilbene films, manifestation of vdW interaction between *trans*-stilbene (TS) and 2D hexagonal boron nitride (hBN), *trans*-resveratrol (RSV) and hBN and, finally, we analyze both manifestation of vdW interaction and CQ in free-base *meso*-tetraphenylporphyrin (TPP) and hBN complex.

CQ in phthalocyanines is well-described with FL decay kinetics, while there are no visible changes in FL spectrum. Low-concentrated samples exhibit mono-exponential FL decay, while two and even more exponents are required to approximate kinetics for high concentrations. To explain this time-resolved behavior,

we applied a model of single donor, surrounded by infinite number of acceptors, and described CQ picture in terms of Förster resonant energy transfer (FRET) from molecular monomers to H-aggregates.

CQ in TS thin films can be well-described with both FL spectra and kinetics. It occurs due to morphology changes from pure monomeric to aggregated, where aggregates, in contrast to phthalocyanines case, are the only FL species. To analyze this smooth transition, we applied global analysis via non-negative matrix factorization and showed, that each particular FL decay can be presented as weighting sum of contributions of TS aggregates and crystals.

The manifestation of vdW interaction between RSV and hBN cannot be described with FL decay kinetics due to very weak interaction, while only subtle changes are observed in a stronger complex of TS and hBN. Most likely, these changes occur due to changes in TS crystal morphology when it interacts with hBN.

In case of TPP/hBN vdW complex, FL kinetics is one of the most effective tools to study complex. On the one hand, FL decay demonstrates reduced CQ with respect to pure TPP, on the other hand, it is possible to observe FRET from TPP monomers to J-aggregates.

**Acknowledgments.** This work was supported by the Horizon Europe FLORIN project (No. 101086142) and the Research Council of Lithuania (Grant No. S-MIP-23-70).

**Keywords:** fluorescence, kinetics, hexagonal boron nitride, porphyrin, *trans*-stilbene, phthalocyanine.

### Literature

- [1] J.R. Lakowicz, *Principles of fluorescence spectroscopy*, 3<sup>rd</sup> edition (New York, 2006).
- [2] J. Tamošiūnaitė, et.al., Chem. Phys. **572** (May), 111949 (2023).
- [3] I. Halimski, et.al., Phys. Chem. Chem. Phys. **26**, 23692 (2024).
- [4] I. Halimski, et.al., Langmuir **41**, 7364 (2025).
- [5] V.V. Korolkov, et.al., ACS Nano **9**(10) 10347 (2015).

# Deimantinių adatų su metalinėmis nanostruktūromis KARS mikrospektroskopija

## CARS microspectroscopy of diamond needles with metal nanostructures

Paulius Rindzevičius<sup>1,2</sup>, Mariam Quarshie<sup>3</sup>, Sergei Malykhin<sup>3</sup>, Polina Kuzhir<sup>3</sup>, Renata Karpicz<sup>2</sup>, Andrej Dementjev<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva

<sup>3</sup>Rytų Suomijos universitetas, Yliopistokatu 2, FI-80100 Joensuu, Suomija

[paulius.rindzevicius@ftmc.lt](mailto:paulius.rindzevicius@ftmc.lt)

Koherentinė anti-Stokso Ramano sklaida (KARS) yra keturbangio maišymo procesas, kuris gali būti panaudojamas virpesinių spektrų matavimams ir sparčiam chemiškai specifiniam įvairių bandinių vaizdinimui. Tačiau norint pasiekti pakankamą jautrumą reikalingi dideli lazerio intensyvumai, kurie gali pažeisti tiriamus bandinius [1]. Todėl reikalingi tyrimai siekiant padidinti KARS metodo jautrumą. Vienas iš tokių metodų galėtų būti šalia metalinių nanodalelių pasireiškiantis Ramano sklaidos stiprinimas dėl elektromagnetinio arba cheminio stiprinimo mechanizmų, plačiai pritaikomas paviršiaus sustiprintos Ramano sklaidos (SERS) spektroskopijoje [2]. Deimantas yra medžiaga, neturinti KARS būdingo nerezonansinio fono, o KARS metodo privalumus tiriant deimantines mikrostruktūras struktūras rodo neseniai atlikti tyrimai [3], todėl šiam tyrimui buvo pasirinktas deimantas. Šio darbo tikslas yra ištirti deimantinių mikroadatų bandinius su įvairių metalų nanostruktūromis KARS mikroskopijos ir spektroskopijos metodais.

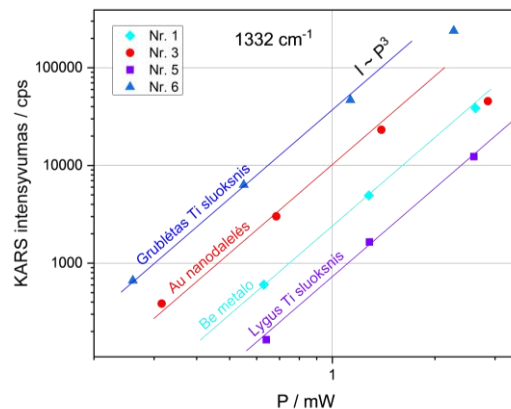
Deimantinių mikroadatų bandiniai pagaminti ant Si substratų naudojant cheminio garų nusodinimo (CVD) metodą. Metalinės nanostruktūros ant deimanto paviršiaus suformuotos naudojant fizinių garų nusodinimą (PVD), kuomet pagaminami lygūs 5 nm storio metalo sluoksniai ir vėliau kaitinant bandinius oro atmosferoje, kuomet suformuojamos metalinės nanostruktūros. Tokiu būdu buvo pagaminti bandiniai su Au, Ag, Cu, Ti ir Ni nanostruktūromis bei lygiomis plėvelėmis, o bandinys, nepadengtas metalu, naudotas rezultatų palyginimui.

Bandinio be metalo KARS nuotraukos ir spektrai atskleidžia, kad stebima medžiaga yra deimantas. Stebima juosta ties  $1332\text{ cm}^{-1}$ , o KARS signalo intensyvumo priklausomybė nuo lazerio spinduliuotės galios yra kubinė, kas patvirtina vykstantį trečios eilės netiesinį procesą (KARS). Bandinio su deimanto paviršiumi, padengtu Au nanodalelėmis, esančiomis nanoduobėse ant deimanto paviršiaus, KARS spektruose stebimas signalo stiprinimas, o KARS signalas gali būti aptiktas naudojant dvigubai mažesnę lazerio galią. Siūlomas stiprinimo mechanizmas šiuo atveju yra plazmoninis. Kuomet Au nanodalelės yra ant lygaus deimanto paviršiaus, signalo stiprinimas nėra stebimas. Nors nanodalelių dydis ir forma šiuo atveju panašūs, skirtingus rezultatus galima paaiškinti remiantis skirtinga bandinių struktūra, kurią atskleidžia SEM nuotraukos. Lygus deimanto paviršius nulemia tai, kad tikimybė aptikti deimantą šalia Au nanodalelių didžiausio elektromagnetinio lauko stiprinimo faktorių vietose yra

labai maža palyginus su bandiniu, kuomet nanodalelės yra nanoduobėse ant deimanto paviršiaus. Au nanodalelės, esančios nanoduobėse, taip pat pasižymi didesniu atsparumu lazerio spinduliuotei dėl didesnio sąlyčio ploto tarp metalo ir deimanto. Grublėtas Ti paviršius gali sustiprinti deimanto KARS signalą maždaug viena eile. Ti bandinys pasižymi atsparumu didelės galios lazerio spinduliuotei. Norint išsiaiškinti stebimo stiprinimo prigimtį Ti atveju reikalingi tolimesni tyrimai. Bandiniai su kitų metalų (Ag, Cu, Ni) struktūromis degraduoja dėl didelio lazerio intensyvumo bei nepasižymi KARS signalo stiprinimo savybėmis.

Tyrimo metu nustatyta, kad Au ir Ti nanostruktūros gali sustiprinti deimanto KARS signalą bei leidžia stebėti rezonansinį KARS signalą naudojant dvigubai mažesnę lazerio galią palyginus su deimantinių mikroadatų bandiniu be metalinių struktūrų (1 pav.).

*Padėka.* Tyrimai dalinai finansuoti Lietuvos mokslo tarybos (Nr. S-QUANTERA-24-1) ir Horizon Europe MSCA FLORIN (Nr. 101086142).



1 pav. Tirtų bandinių deimanto KARS juostos (ties  $1332\text{ cm}^{-1}$ ) intensyvumo priklausomybė nuo lazerio galios

*Reikšminiai žodžiai:* deimantas, nanostruktūros, KARS, koherentinė anti-Stokso Ramano sklaida.

### Literatūra

- [1] G. I. Petrov, R. Arora, V. V. Yakovlev et al. PNAS. **104**, 7776–7779 (2007)
- [2] C. Steuve, C. Kaminski, C. F. Baumberg et al. Nano lett. **11**, 5339–5343 (2011)
- [3] A. Dementjev, R. Karpicz, B. Xu et al. Appl. Phys. Lett. **124**, 211903 (2024)

**Žodinė sesija 2A**  
**(Teorinė ir skaičiuojamoji fizika)**

# Matricų funkcijų skaičiavimas apibendrintoje spektrinėje bazėje

## Computation of matrix functions using generalised spectral basis

Artūras Acus<sup>1</sup>, Adolfas Dargys<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio 3, 10222 Vilnius

<sup>2</sup>Puslaidininkų fizikos institutas, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio 3, 10222 Vilnius  
arturas.acus@tfai.vu.lt

Teorinėje fizikoje dažnai tenka skaičiuoti funkcijas nuo simbolinių matricių, ar matricių, kurių elementai yra tikslūs skaičiai. Tai nėra paprasta užduotis, ypač kai matrica yra defektinė (nediagonalizuojama). Taikant įprastus metodus praktikoje susiduriama su didžiulėmis išraiškomis. Užduotis tampa dar sunkesnė, jei matricos minimalusis polinomas (mažiausio laipsnio polinomas, kurio kintamuosius pakeitę matrica gauname nulį) yra aukšto laipsnio neredukuotinis polinomas. Tokiu atveju standartiniai metodai taiko polinomų redukcijos algoritmą tam tikroms racionalioms funkcijoms (kurių vardiklis yra paminėtas neredukuotinis polinomas) skaitiklio ir vardiklio šaknims suprastinti. Operacija būtina norint išvengti dalymo iš nulio. Deja, polinomų redukcijos algoritmas yra sudėtinga ir laikui imli procedūra, galinti trukti valandas ar dienas net ir mažos dimensijos, pavyzdžiui  $16 \times 16$ , matricoms.

Mes suradome būdą kaip apskaičiuoti funkcijas nuo matricių, kuriame ši polinomų redukcija nereikalinga. Maža to, sudėtingais atvejais, pasiūlytas būdas duoda daug mažesnės apimtys atsakymus per nepalyginamai trumpesnę laiką.

Metodas yra paremtas efektyviu apibendrintos spektrinės bazės [1] suradimu. Ši bazė yra rinkinys matricos polinomų  $p_j(a)$ ,  $q_k^t(a)$ , pasižyminčių savybėmis

$$p_1 + \dots + p_r = 1, \quad p_i p_j = \delta_{ij} p_i, \quad q_k p_k = q_k \quad (1)$$

$$q_k^{m_k-1} \neq 0, \quad \text{tačiau} \quad q_k^{m_k} = 0.$$

Polinomų  $\{p_j, q_k^t, 1 \leq j \leq r, h+1 \leq k \leq r, 1 \leq t < m_k\}$  sandauga skaičiuojama moduli minimalaus polinomo  $\mu(a, \lambda)$ , kur sveikųjų skaičių rinkinys  $\{m_1, \dots, m_r\}$  žymi šio polinomo (turinčio  $r$  skirtingų šaknų) kartotinumus ( $h = 0$  charakterizuoja šaknį be pasikartojimo). Apibendrintoje spektrinėje bazėje funkcija nuo matricos  $a$  apskaičiuojama labai paprastai:

$$f(a) = \sum_j f(\lambda_j + q_j) p_j, \quad \text{kur } f(\lambda_j + q_j) \text{ žymi}$$

$$f(\lambda_j) + f'(\lambda_j) q_j + \dots + \frac{f^{(m_j-1)}(\lambda_j)}{(m_j-1)!} q_j^{(m_j-1)} \quad (2)$$

Darbe [2] mes užrašėme paprastas rekursines formules spektrinės bazės polinomams  $p_j(a)$ ,  $q_k^t(a)$  apskaičiuoti:

$$q_i^{m_i-1}(a) = \frac{S^{(0)}(a, \lambda)}{\mu^{(m_i)}(\lambda)}$$

$$q_i^{m_i-2}(a) = \frac{S^{(1)}(a, \lambda) - q_i^{m_i-1}(a) \mu^{(m_i+1)}(\lambda)}{\mu^{(m_i)}(\lambda)} \quad (3)$$

$$\vdots$$

$$p_i = q_i^0(a) = \dots \dots \dots$$

Čia  $\mu^{(k)}(\lambda)$  žymi  $k$ -ąją svorinę minimalaus polinomo išvestinę  $\mu^{(k)}(\lambda) = \frac{1}{k!} \frac{d^k \mu(\lambda)}{d\lambda^k}$ . Polinomai  $S(a, \lambda) = S^{(0)}(a, \lambda)$  ir jų  $k$ -osios svorinės išvestinės  $S^{(k)}(a, \lambda)$  yra apskaičiuojamas pagal nesudėtingas formules

$$S(a, \lambda) = S^{(0)}(a, \lambda) = \sum_{k=0}^{r-1} \left( \sum_{s=0}^{r-k-1} \lambda^s C_{(r-s-k-1)}(a) \right) a^k,$$

$$S^{(k)}(a, \lambda) = \frac{1}{k!} \frac{d^k S(a, \lambda)}{d\lambda^k}. \quad (4)$$

Nors (3), (4), formules užrašėme kaip priklausančias nuo matricos  $a$ , visus tarpinius skaičiavimus galima atlikti naudojant paprastą kintamąjį, o šio kintamojo laipsnius pakeisti atitinkamais matricių laipsniais tik galutiniame žingsnyje.

Aprašytą algoritmą realizavome kompiuterinėje algebros sistemoje *Mathematica* ir publikavome atviros prieigos "Wolfram Function Repository" portale [3]. Jo pranašumas prieš Jordan dekompozicijos metodą netrivialiais atvejais (kai naudojama tiksli aritmetika) yra neabejotinas. Pavyzdžiui, apskaičiuodama eksponentę nuo specialiai parinktos  $8 \times 8$  matricos *Mathematica* 14.1 komanda **MatrixFunction[ ]** užtruko 64 sekundes. Mūsų metodas eksponentę apskaičiavo vos per pusę sekundės. Be to ir atsakymų sudėtingumas esmingai skyrėsi. *Mathematica* atsakymas turėjo  $2.5 \times 10^9$  lapus, kai tuo tarpu mūsų algoritmas davė išraišką su mažiau nei  $10^6$  lapų. Vien atsakymų skaitinis palyginimas 100 ženklų tikslumu personaliniame kompiuteryje užtruko 780 sekundes (mūsų atsakymo skaitinė vertė buvo gauta vos per 1/10 sekundės).

Kaip rodo formulės (3) ir (4) metodas reikalauja apskaičiuoti visus matricos laipsnius iki jos dimensijos  $N$ . Tai reiškia, kad algoritmo skaičiavimo laikas auga kaip matricos dimensijos ketvirtasis laipsnis, todėl yra per lėtas taikyti didelėms matricoms.

**Reikšminiai žodžiai:** Apibendrinta spektrinė bazė, matricių funkcijos

### Literatūra

- [1] Sobczyk G. The Generalized Spectral Decomposition of a Linear Operator, *The College Mathematics Journal*. 1997;28(1):27–38.
- [2] A. Acus, A. Dargys Multivector (MV) Functions in Clifford Algebras of Arbitrary Dimension: Defective MV Case, *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 2025; 48:11025–11036
- [3] A. Acus, <https://resources.wolframcloud.com/FunctionRepository/resources/ComputeMatrixFunction/>

# Kvarkų maišymosi matricos pernормavimas ir $W$ bozono skilimas į kvarkus

## Renormalization of the quark mixing matrix and $W$ boson decay into quarks

Simonas Draukšas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astrofizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius  
[simonas.drauksas@ff.vu.lt](mailto:simonas.drauksas@ff.vu.lt)

Kvantinio lauko teorijoje formuluojamas Standartinis dalelių fizikos modelis yra kol kas sėkmingiausias fizikos modelis atlaikantis itin daug eksperimentinių patikrinimų. Apskritai teorijos ir eksperimento sąsaja nėra paprasta ir reikalauja pernормavimo metodų. Pernормavimo reikalingumas kyla iš fakto, jog modelio parametrai nėra duoti gamtos ar išskaičiuojami, todėl jie privalo būti išmatuoti. Neišmatavus parametrus, t. y. neatlikus nei vieno eksperimento, ir jų neįvedus į teorinį modelį, naudojantis tuo modeliu neįmanoma daryti prognozių. Kalbant paprastai, pernормavimas yra pradinių sąlygų įvedimas, tačiau kvantinio lauko teorijoje atsiranda dar vienas svarbus aspektas: naudojantis perturbacijų teorija ir skaičiuojant pataisas, gaunami rezultatai dažnai būna begaliniai (tai iš principo prieštarauja baigtiniams eksperimentų rezultatams), todėl pernормavimas privalo užtikrinti ir teorinių prognozių baigtinumą. Pavyzdžiui, Standartinio modelio dalelių masės ir sąveikos konstantos reikalauja pernормavimo, kai skaičiuojamos pataisos.

Pernормavimas kvantinio lauko teorijos modeliuose nėra naujiena, tad daugeliu atveju yra gerai supastas ir gan išsamiai pristatomas vadovėliuose, tačiau maišymosi kampų ir matricų pernормavimas dar kelia klausimų. Pats dalelių maišymasis, tai galimybė dalelėms įvairiuose procesuose pavirsti to paties tipo, tačiau kitos kartos dalelėmis, pavyzdžiui, kylantysis kvarkas gali virsti žaviuoju kavrku, miuoninis neutrinasis gali virsti elektroniniu neutrinu ir t.t. Dalelių maišymasis dažniausiai parametrizuojamas maišymosi matricomis, tad tai yra tam tikras teorijos parametras, kurį įprastai norima pernормuoti. Ko gero pirmasis bandymas pernормuoti maišymosi matricą atliktas dar 1990 metais, kai buvo pernормuojama Cabibbo-Kobayashi-Maskawa (CKM) kvarkų maišymosi matrica Standartiniame modelyje [1].

CKM matricos pernормavimas iš esmės pavyko – jis užtikrino  $W$  bozono skilimo spartos baigtinumą Standartiniame modelyje –, tačiau kilo keletas kitų iššūkių. Iš tiesų, neturėdami kitos akivaizdžios fizikinės pernормavimo sąlygos, autoriai buvo priversti maišymosi matricą renormalizuoti per kvarkų laukų pernормavimo konstantas, nes tik tai užtikrino begalybių išsiprastinimą, tačiau pats CKM matricos atsvaros narys tapo priklausomu nuo kalibruotės. Nuo kalibruotės priklauso tik nefizikiniai dydžiai, o maišymosi matrica parametrizuoja eksperimente stebimus reiškinius, todėl CKM atsvaros nario priklausomybė nuo kalibruotės nėra pageidautinas bruožas. Per ateinančius daugiau nei 30 metų

sukonstruotos dar kelios maišymosi matricų pernормavimo schemos, kurios vienaip ar kitaip gauna nuo kalibruotės nepriklausomą maišymosi matricos atsvaros narį. Toks schemų konstravimas taip pat privedė ir prie tam tikrų reikalavimų, kuriuos maišymosi matricų pernормavimo schema turėtų tenkinti [2].

Straipsniuose [3,4] išreikštai sukonstravome pernормavimo schemą, kurioje maišymosi matricos atsvaros narys yra trivialus bei visi atitinkami reikalavimai taip pat tenkinami trivialiai. Trivialumas seka, nes visada galima pasirinkti bazę, kurioje maišymosi kampai ar matricos teoriniame aprašyme apskritai neegzistuoja, tad ir jų atsvaros nariai nėra reikalingi. Tiesa, tokia bazė nebūtinai yra patogi realiems skaičiavimams ir verta pereiti į bazę su maišymosi matricomis, tačiau pernормavimas turi būti atliktas tokiu būdu, kuris neįvestų atsvaros narių maišymosi matricoms. Mūsų schemoje maišymosi matricos atsvaros narį pakeičia ne-diagonalūs masės atsvaros nariai, kurie privalo egzistuoti bet kurioje bazėje. Kita vertus, literatūroje gan įprasta parinkti diagonalius masės atsvaros narius net ir modeliuose, kuriuose pasireiškia dalelių maišymasis.

Mūsų schemos įtvirtinimui literatūroje norime atlikti  $W$  bozono hadroninių skilimo spartų skaičiavimus su trivialiu CKM maišymosi matricos atsvaros nariu ir palyginti skaitmeninius rezultatus su kitomis schemomis. Be to, Standartiniame modelyje dar vienas maišymosi kampas egzistuoja ir kalibruotinių bozonų sektoriuje – tai labai gerai žinomas Weinberg'o kampas – tad pilnam maišymosi kampų pernормavimo principų įgyvendinimui ir šį kampą pernормuojame trivialiai. Pristatymo metu aptarsime padarytą progresą ir pateiksime preliminarinius skaitinius rezultatus.

*Reikšminiai žodžiai: pernормavimas, maišymosi matricos, Standartinis modelis*

### Literatūra

- [1] A. Denner and T. Sack, Nucl. Phys. B, **347**, 203-216 (1990)
- [2] A. Denner, S. Dittmaier, J.-N. Lang, J. High Energy Phys., **104**(11), 61 (2018).
- [3] S. Draukšas, Eur. Phys. J. Plus, **138**(7), 671 (2023)
- [4] S. Draukšas, Eur. Phys. J. C, **83**, 962 (2023)

# Nanodeimantų magnetinės savybės: priklausomybės nuo nanodalelių dydžio teorinis tyrimas

## Magnetic properties of nanodiamonds: Theoretical investigation on the dependence of the nanoparticles size

Šarūnas Masys<sup>1</sup>, Valdas Jonauskas<sup>1</sup>, Žilvinas Rinkevičius<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Karališkasis technologijos institutas, Chemijos, biotechnologijos ir sveikatos inžinerijos mokslų mokykla, Teknikringen 42, SE-11428, Stokholmas  
[sarunas.masys@tfai.vu.lt](mailto:sarunas.masys@tfai.vu.lt)

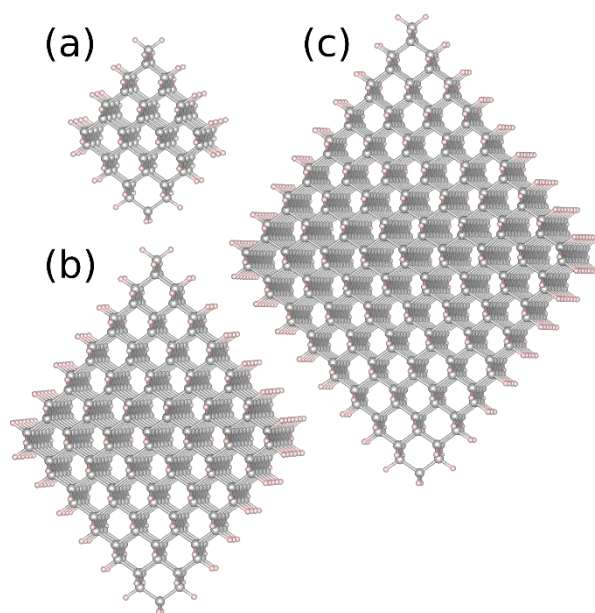
Šiuolaikiniai deimanto nanodalelių, arba tiesiog nanodeimantų, taikymai apima keliolika svarbių sričių, įskaitant kvantinius jutiklius, nanokompozitus, tribologiją bei nanomediciną [1]. Tačiau verta atkreipti dėmesį į tai, kad nuolat tobulėjant sintezės technologijoms daugėja galimybių užauginti itin mažus nanodeimantus, kurių tiek vidinė (apimanti taškinis defektus), tiek išorinė (apimanti paviršiaus funkcines grupes) struktūra būtų norimos kompozicijos. Kalbant apie taškinis defektus, jų įterpimas į nanodeimantus yra ypatingai aktualus fluorescencijos, taip pat ir magnetinio rezonanso pagrindo bioatvaizdavimui, tad labai svarbu atlikti tinkamą jų identifikavimą. Tuo labiau, kad pageidaujamos kompozicijos nanodeimantų sintezę įtakoja įvairiausi veiksniai, kurių poveikio įvertinimas savo ruožtu padėtų patobulinti pačią auginimo technologiją.

Kadangi daugelis taškinis defektų, įskaitant kai kuriuos populiarius spalvinius centrus, pasižymi nenuliniu elektronų sukiniu, jų struktūrą ir elementinę sudėtį galima nustatyti taikant paramagnetinio elektronų rezonanso spektroskopiją. Vienas iš svarbiausių šio spektroskopinio įrankio parametrų yra elektroninis g-tenzorius, leidžiantis detaliam išanalizuoti paramagnetinių defektų geometriją bei sukinių pasiskirstymą. Todėl pristatomo darbo tikslas – atlikti elektroninio g-tenzoriaus priklausomybės nuo nanodeimantų dydžio teorinį tyrimą, kuomet į nagrinėjamas deimanto nanodaleles yra įterpiami skirtingi taškiniai paramagnetiniai defektai.

Tyrimams pasirinkti vienos iš dažniausiai sutinkamų – oktaedrinės – formos nanodeimantai, kurių paviršius buvo pasyvuotas vandenilio atomais (žr. 1 pav.). Dydžio įtaka analizuota įtraukiant 6 nanodeimantų variantus:  $C_{84}H_{64}$  (~1.2 nm),  $C_{165}H_{100}$  (~1.5 nm),  $C_{286}H_{144}$  (~1.9 nm),  $C_{455}H_{196}$  (~2.2 nm),  $C_{680}H_{256}$  (~2.6 nm) bei  $C_{969}H_{324}$  (~3 nm). Tiek elektroninio g-tenzoriaus skaičiavimai, tiek geometrijos optimizavimai atlikti kvantinės chemijos paketu ORCA [2]. Atsižvelgiant į nagrinėjamų sistemų dydį, geometrijos optimizavimams panaudoti spartieji kompozitiniai Štefano Grimės mokslinės grupės pasiūlyti metodai – B97-3c [3], PBEh-3c [4] ir r<sup>2</sup>SCAN-3c [5].

Gauti rezultatai atskleidžia, jog kai kurių paramagnetinių defektų, pavyzdžiui, azoto-vakansijos ar pakaitinio azoto, izotropinių elektroninio g-tenzoriaus verčių pokytis kintant nanodeimantų dydžiui neviršija 150 milijoninių dalių (ppm), kas artima standartinei

eksperimentinių matavimų paklaidai. Tuo tarpu kitiems centrams, susijusiems, pavyzdžiui, su nikelio ar vario atomais, atitinkamas pokytis gali siekti 1000 ppm ir daugiau. Be to, daliai paramagnetinių defektų, kaip kad fosforo atomo padalytajai vakansijai, izotropinės elektroninio g-tenzoriaus vertės įsisotinimas nebuvo pasiektas net ir didžiausioje tirtoje  $C_{969}H_{324}$  sistemoje. Visa tai rodo, jog magnetinių savybių priklausomybė nuo deimanto nanodalelių dydžio egzistuoja ir ji skirtingiems taškiniams paramagnetiniams defektams pasireiškia individualiai.



1 pav. Kelių oktaedrinės formos bei (a)  $C_{84}H_{64}$ , (b)  $C_{455}H_{196}$  ir (c)  $C_{969}H_{324}$  dydžio nanodeimantų, pasyvuotų vandenilio atomais, vizualizacija. Pilki rutuliukai žymi anglies, o rožiniai vandenilio atomus.

*Reikšminiai žodžiai: nanodeimantai, elektroninis g-tenzorius, paramagnetiniai defektai, modeliavimas.*

### Literatūra

- [1] S. L. Y. Chang *et al.*, ACS Nano **16**, 8513 (2022).
- [2] F. Neese, WIREs Comput. Mol. Sci. **8**, e1606 (2022).
- [3] J. G. Brandenburg *et al.*, J. Chem. Phys. **148**, 064104 (2018).
- [4] S. Grimme *et al.*, J. Chem. Phys. **143**, 054107 (2015).
- [5] S. Grimme *et al.*, J. Chem. Phys. **154**, 064103 (2021).

# Karotinoidų kristalinių savybių modeliavimas: Ramano spektrai ir struktūra

## Modeling of Carotenoid Crystals: Raman spectra and Structural Insights

Mindaugas Mačernis<sup>1</sup>, Leonas Valkunas<sup>1,2</sup>, Bruno Robert<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, 10222 Vilnius

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10222 Vilnius

<sup>3</sup>Institute of integrative Biology of the Cell, CEA Saclay, 91191 Gif sur Yvette

[mindaugas.macernis@ff.vu.lt](mailto:mindaugas.macernis@ff.vu.lt)

Karotinoidai - tai pigmentai, aptinkami daugelyje raudonų vaisių ir daržovių, taip pat atlieka svarbų vaidmenį fotosintezėje. Jie sugeria mėlyno-žalio spektro srityse ir taip suteikia spalvą, kuri dalyvauja biologiniuose procesuose kaip signalizavimas ir fotonų surinkime. Karotinoidų skaičiuojama kaip tūkstantis rūšių, t. y. jie pasižymi didele struktūrine įvairove [1–3].

Karotinoidai pasižymi įvairiomis sužadintųjų būsenų savybėmis. Krūvio pernašos būsenų (ICT) pobūdis paaiškina spektrinius poslinkius, o žemiausios sužadintos vienietinės būsenos ( $S_1$ , formaliai žymimos  $1^1A_g^-$ ) DFT metodika nėra tinkama įvertinti. Visgi superkompiuteriniai resursai sudaro prielaidas gauti pasirinktų realesnių savybių apie karotinoidų savybes [1–3].

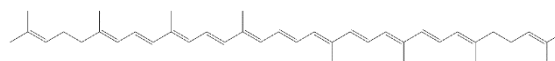
Anksčiau nagrinėjome nestabilias karotinoidų struktūras skirtingose lokalinėse aplinkose naudojant DFT ir *Car-Parrinello* molekulinę dinamiką [1]. Iširta ir sąveika su ciklodekstrinais – likopenui [2] ir  $\beta$ -karotenui [3] naudojant Ramano spektroskopijos eksperimentus ir teorinius skaičiavimus. Taip pat bazinių funkcijų supaprastinimo procedūros gali paveikti skaičiuojamas Ramano intensyvumo ir dažnio reikšmes [4].

DFT funkcionalų metodų tyrimas pasirodė, kad daugelis jų nepakankami atkuriant struktūrinius pokyčius net paprastu dviejų sąveikaujančių likopeno molekulių atveju. Tai rodo, kad reikia gerai įvertintų metodų, įtraukiančių aiškius tarpmolekulinius efektus kaip tolimesias sąveikas. Skaičiavimų analizė parodė, kad metilo grupių orientacijos yra kritinės deformacijų ir spektrinių poslinkių tarpininkės.

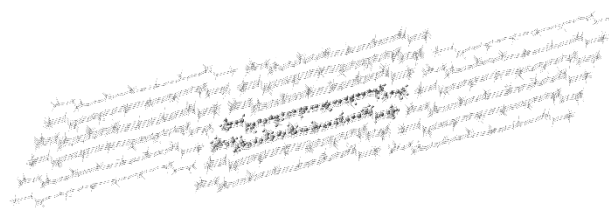
Modeliuojant likopeno kristalą (kristalo eksperimentiniai duomenys nepublikuoti), iš gardelės buvo išskirtos dvi molekulės deformacijų analizei. Simuliuojant skirtingus sluoksnius, pavyko stabilizuoti šiuos iškraipymus ir atkurti Ramano  $\nu_1$  poslinkius. Tai rodo, kad kristalinėje aplinkoje vykstanti relaksacija susijusi su smulkiosiomis struktūrinėmis deformacijomis, kurios likopeno molekulę struktūriškai labiau priartina prie simetriškai tvarkingo polyeno modelio.

Likopeno kristalo modeliavimas parodė, kad gardelės relaksacija lemia Ramano poslinkius, kurių standartiniai DFT metodai neatkuria. Metilo grupės yra svarbios deformacijų ir spektrinio atsako supratimui.

Išsamūs likopeno kristalo modeliavimo ir Ramano sužadintųjų būsenų spektrų rezultatai bus pristatyti konferencijoje.



1 pav. Tipinis karotinoidas: likopeno cheminė struktūra



2 pav. Likopeno dimeras kristalinėje struktūroje

*Reikšminiai žodžiai: karotinoidai, DFT, molekulių dinamika.*

### Padėka

*Tyrimą finansavo Lietuvos mokslo taryba (projekto Nr. S-MIP-23-48). Skaičiavimai atlikti naudojant Vilniaus universiteto „VU HPC“ Saulėtekio superkompiuterio išteklius Fizikos fakultete.*

### Literatūra

- [1] M. Macernis, S. Streckaite, R. Litvin, A. A. Pascal, M. J. Llansola-Portoles, B. Robert, L. Valkunas, “Electronic and Vibrational Properties of Allene Carotenoids,” *J. Phys. Chem. A*, vol. 126 (6), pp. 813-824, 2022.
- [2] M. Macernis, A. Bockuviene, R. Gruskiene, T. Krivorotova, J. Sereikaite, “Raman study for  $\beta$ -ring positioning in  $\beta$ -Carotene complexes with Cyclodextrins and Chitoooligosaccharides,” *J. Mol. Str.*, vol. 1226, pp. 129362, 2021.
- [3] L. Diska, A. Bockuviene, R. Gruskiene, T. Kavleiskaja, J. Sereikaite, G. Bankovskaite, M. Macernis, “Interactions of lycopene with  $\beta$ -cyclodextrins: Raman spectroscopy and theoretical investigation,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* Vol 27 (15), pp. 7874-7881, 2025.
- [4] M. Macernis, “Component-wise AO basis reduction: norm loss, negative contribution normalization, and functional implications,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 27 (27), pp. 14555-14564, 2025.

## **Žodinė sesija 2B**

**(Fizikos istorija, terminija ir mokslo politika; Fizikos  
edukologija ir sklaida)**

## **Ekspimentinės fizikos profesorius Alex Montwill**

### **Professor of Experimental Physics Alex Montwill**

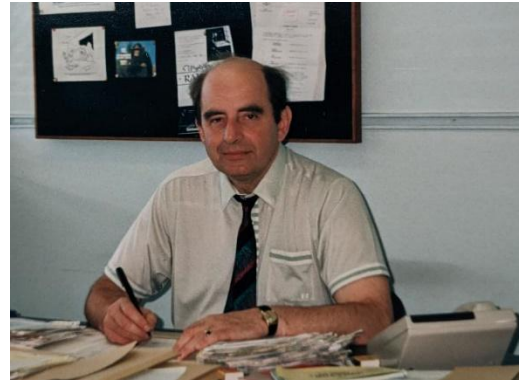
Judita Puišo,

Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas  
[juditapuiso@ktu.lt](mailto:juditapuiso@ktu.lt)

Dublino universitetinio koledžo (angl. – University College Dublin) eksperimentinės fizikos profesorius emeritas Alex Montwill gimė 1935 m. Rygoje, kaip Aleksandras Montvila. Jis buvo vienintelis vaikas Stanislovo ir Jadvygos Montvilų šeimoje. Jo senelis Aleksandras Montvila (1845–1908) buvo garsių Lietuvos geradarių Stanislovo Adomo Montvilos (1841–1916), Vincento Montvilos (1845–1908) ir Juozapo Montvilos (1848–1911) brolis. A. Montwill augo Troškūnų dvare iki ketverių metų, vėliau kartu su tėvais pasitraukė į vakarus. Vaikystę praleido Vokietijoje, o vėliau gyveno Austrijoje. 1947 metais atvyko į Airiją. Ten A. Montwill pradėjo lankyti mokyklą Belvedere College. Dr. V. Vilsonui pavyko įtikinti A. Montwill tėvus leisti sūnų į Jono Krikštytojo de la Salle vienuolijos Christian Brothers mokyklą Westland Row, kurioje galėjo nemokamai mokytis neturtingųjų vaikai, suskirstyti pagal pasiekimus. A. Montwill laimėjo matematikos stipendiją ir 1953 m. pradėjo studijuoti gamtos mokslus Dublino universitetiniame koledže. 1957 m. jis puikiai baigė gamtos mokslų bakalauro studijas Airijos nacionaliniame universitete (The National University of Ireland) ir gavo eksperimentinės fizikos diplomą su pagyrimu. Tada jis prisijungė prie fundamentalųjų dalelių tyrimų grupės ir įstojo į magistrantūrą. 1959 m., įgijęs magistro laipsnį, jis tęsė studijas doktorantūroje, kur jam vadovavo profesorius Thomas Edwin Nevin (1906–1986). 1965 m. A. Montwill apgynė filosofijos daktaro (Ph. D) disertaciją. 1978 m. Airijos Nacionalinis universitetas suteikė jam mokslų daktaro laipsnį.

A. Montwill dėstė fiziką universitetiniame koledže Dubline net 40 metų, pradėjęs 1959 m. asistentu. Po metų jam teko vadovauti didelei ir aktyviai tyrimų grupei. Tais pačiais metais jo grupė buvo pakviesta prisijungti prie pirmaujančio Europos mokslininkų kolektyvo, tiriančio hipernuklidų susidarymą ir savybes Brukavane ir CERN. Šeštojo dešimtmečio pabaigoje A. Montvila tapo vienu pirmųjų Airijos atstovu, dirbančiu CERN (Ženeva, Šveicarija) kaip vizituojantis mokslininkas. Jis buvo pakviestas vadovauti UCD Fundamentalųjų dalelių tyrimų grupei, kuri tapo europinio branduolinių emulsijų masių tyrimo dalimi, vykdė plačius smulkesnių už branduolį dalelių tyrimus.

1976 m. A. Montwill priklausė septynių šalių komandai, kuri pirmoji pastebėjo „žavųjį kvarką“, kuris matomas suskilus atomui.



1 pav. Profesorius Alex Montwill

Dvejus metus, išvykęs kūrybinių atostogų, kaip vizituojantis profesorius, A. Montwill ne tik skaitė paskaitas Niujorko miesto koledže (City College of New York) ir Minesotos universitete Mineapolyje, bet ir vykdė tyrimus burbulinės kameros tyrimų srityje. 1973 m. A. Montvila buvo išrinktas derinti bendradarbiavimą su FERMILAB. Nuo 1972 m. A. Montwill buvo paskirtas etatiniu lektoriumi, 1981 m. docentu ir 1985 m. eksperimentinės fizikos profesoriumi. A. Montwill taip pat buvo egzaminų apeliacinio komiteto pirmininku nuo pat jo įkūrimo 1994 m. Per tą laiką buvo išnagrinėta daugiau kaip tūkstantis apeliacijų. Šias pareigas jis ėjo ir 2000 m. spalio 28 d., išėjęs į pensiją. Jis buvo Fizikos instituto bendradarbis (Institute of Physics, London), Airijos karališkosios akademijos Dubline narys.

A. Montwill buvo ne tik mokslininkas, bet ir mokslo populiarintojas, parengė 150 parengtų radijo laidų plačiajai visuomenei. A. Montwill nuo 1984 iki 1994 m. vedė mokslo laidas plačiajai visuomenei per Airijos transliuotojo RTE radiją. Kartu su kolege daktare Ann Breslin išleido dvi knygas: „Let There be Light“ (2008 m.) ir „The Quantum Adventure: Does God Play Dice? (2012).“

A. Montwill mokslinis palikimas: knygos (<https://www.alexmontwill.com/c/books/3>), parengtos radijo laidos: (<https://www.alexmontwill.com/c/radio-interviews/2>), moksliniai straipsniai (<https://inspirehep.net/authors/1054005>). A. Montwill mirė staiga nuo širdies smūgio 2013 m. balandžio 18 d. ir palaidotas Dublino Dublino Deans Grange kapinėse.

*Reikšminiai žodžiai: CERN, fizika, fundamentaliosios dalelės*

# Jaunieji tyrėjai Baltijos šalyse: iššūkiai ir perspektyvos kintančiame akademiniame kraštovaizdyje

## Young Researchers in the Baltic States: Challenges and Prospects in a Changing Academic Landscape

Dalia Šatkovskienė<sup>1,2</sup>, Sandra Pralgauskaitė<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>BASNET Forumas, Saulėtekio al. 9(III), LT-10222 Vilnius

[dalia.satkovskiene@ff.vu.lt](mailto:dalia.satkovskiene@ff.vu.lt)

Šiandieniniame sparčiai besikeičiančiame pasaulyje, kurį formuoja moksliniai proveržiai ir didėjantis tyrimų vaidmuo pasaulinėje ekonomikoje, pati mokslo struktūra išgyvena gilius pokyčius. Ji pamažu artėja prie į verslą orientuoto modelio, dėl kurio destabilizuojama tradicinė „tiesinė“ mokslininko karjera. Dėl šio pokyčio mažėja motyvacija siekti tyrėjo profesijos ir joje išlikti. Atsižvelgiant į tai, kad jaunoji tyrėjų karta yra ateities mokslo potencialas, tai tampa rimtu iššūkiu mokslui. Problema taip pat tiesiogiai siejasi ir su ateities mokslo atradimais paremtos, konkurencingos ekonomikos plėtra.

Pranešimo tikslas supažindinti Lietuvos fizikų bendruomenę su nesaugia jaunųjų mokslininkų situacija ir jos įtaka mokslui.

Remiantis ekonominio bendradarbiavimo ir plėtros organizacijos (EBPO) atliktais tyrimais [1], pranešime bus trumpai aptarti su kintančiu akademinių tyrimų kontekstu susiję veiksniai: tyrimų atlikimo, mokslų daktaro laipsnį turinčių asmenų pasiūlos ir paklausos, tyrėjų karjeros ir akademinių institucijų pokyčiai, darbo sąlygų blogėjimas; kultūriniai lūkesčiai, istorinis palikimas ir jų įtaka ankstyvosios karjeros tyrėjams (AKT, angl. ECR).

Dėl susistemintų duomenų apie AKT padėtį ES trūkumo, situaciją Europos fizikų bendruomenėje, apžvelgsime, remdamiesi „Europos būsimųjų greitintuvų komiteto (ECFA) debatų su jauniaisiais mokslininkais dėl Europos dalelių fizikos strategijos atnaujinimo ataskaita“ [2] bei Europos Fizikų bendradarbiavimo tinklo GENERA, turimais tyrimais [3].

Pranešime taip pat bus pristatytos ir aptartos VU mokslininkų, dalyvaujančių COST veikloje „Making Early Career Researchers' Voices Heard for Gender Equality“ (Voices), iniciatyvos, skirtos išsiaiškinti AKT situaciją Lietuvoje ir Baltijos šalių regione. Tuo tikslu pristatysime BASNET Forumas asociacijos kartu su Vilniaus Universiteto Gyvybės mokslų centru, Kauno technologijos universitetu bei Fizinių ir technologijos mokslų centrų 2023m lapkričio 23d. LR Seime organizuotos tarptautinės konferencijos „**Jaunųjų mokslininkų situacija Baltijos šalyse: Ateities mokslo potencialo vystymas ar jo švaistymas**“ rezultatus [4]. Konferenciją globojo LR Seimo pirmininkė p. Viktorija Čmilytė-Nielsen. Joje skaitė pranešimus mokslo politikai, universitetų ir mokslo institutų bei jų padalinių vadovai ir jų atstovai bei tyrėjai iš visų Baltijos šalių, Vokietijos, Prancūzijos ir Italijos. Iššūkiais, siekiant mokslinės karjeros, dalinosi jaunieji mokslininkai,

atstovaujantys Baltijos šalių Jaunąsias Akademijas ir Jaunųjų mokslininkų asociacijas. Buvo konstatuota, kad AKT problema yra sisteminė, trūksta išsamių situacijos tyrimų ir stebėsenos, Baltijos šalyse nėra nacionalinių politikų, nukreiptų ateities mokslo potencialo plėtrai užtikrinti.

Mokslininkų asociacija BASNET Forumas, norėdama prisidėti prie pokyčių mokslo sistemoje įgyvendinimo Baltijos šalių regione, 2024m. lapkričio 27d., kartu su partneriais Vilniaus Universiteto Fizikos Fakultetu, Kauno technologijos universitetu ir Lietuvos Fizikų draugija organizavo tarptautinį suinteresuotų šalių susitikimą „Nuo iššūkių prie sprendimų: sisteminis ankstyvosios karjeros tyrėjų problemų sprendimas Baltijos šalyse“ [5].

Renginio dalyviai nutarė, kad ankstyvosios karjeros tyrėjų potencialo plėtra ir jų indėlis į mokslo pažangą turi būti pripažintas nacionalinės mokslo politikos prioritetu. Turėtų būti sukurta ir įgyvendinta nacionalinė ateities mokslo potencialo plėtros strategija, kurioje būtų numatyti politiniai sprendimai, siekiant pagerinti AKT darbo sąlygas, skatinti ir išlaikyti reikšmingą AKT įsitraukimą ir indėlį į mokslo pažangą.

Suinteresuotų šalių susitikimo dalyviai parengė Rekomendacijas, kaip pagerinti ankstyvosios karjeros tyrėjų padėtį Baltijos šalyse. Rekomendacijos pateiktos mokslo politiką formuojančioms, mokslinę veiklą reguliuojančioms ir finansuojančioms organizacijoms (Baltijos šalių parlamentams, Mokslo taryboms ir Švietimo ir mokslo ministerijoms), mokslo institutams ir universitetams bei jaunųjų mokslininkų asociacijoms ir jaunųjų mokslininkų akademijoms.

*Reikšminiai žodžiai: potencialas, kinetika, elektrinio lauko stipris.*

### Literatūra

- [1] Reducing the precarity of academic research careers, OECD Science, technology and industry policy papers, May 2021 no. 113
- [2] Report on the ECFA Early-Career Researchers Debate on the 2020 European Strategy Update for Particle Physics
- [3] <https://www.genera-network.eu/genderinphysics>
- [4] <https://www.youtube.com/watch?v=mYq7o5B8004>
- [5] <https://www.basnetforumas.eu/international-meeting-of-stakeholders-2024/>

## Balansuojant įvairovę

### Balancing diversity

Sandra Pralgauskaitė<sup>1</sup>, Dalia Šatkovskienė<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>BASNET Forumas, Saulėtekio 9(III), 10222 Vilnius

[sandra.pralgauskite@ff.vu.lt](mailto:sandra.pralgauskite@ff.vu.lt)

Įtrauki visuomenę įgalina ir išnaudoja kiekvieno individo potencialą, sudaro sąlygas platesniam požiūriui, patirčių ir idėjų spektrui. Įvairialypė tyrėjų bendruomenė išplečia mokslinių tyrimų lauką, yra labiau linkusi iškelti unikalias problemas, nagrinėti jas skirtingais požiūriais [1].

Europos Sąjunga (ES) siekia puoselėti įvairialypę ir įtraukia darbo aplinką, kurioje darbuotojai atspindėtų besivystančią visuomenę. Lygios galimybės įsitraukti į mokslinius tyrimus ir siekti akademinės karjeros yra viena iš pagrindinių ES vertybių, kuri didina mūsų visuomenės mokslinį potencialą, skatina mokslo ir technologijų vystymąsi.

Šis pranešimas skirtas apžvelgti skirtingų lyčių įsitraukimą į mokslinę veiklą fizinių mokslų, technologijų ir inžinerijos srityse, jų karjeros akademinėje srityje vystymąsi pastaraisiais metais Europoje, Lietuvoje bei Vilniaus universiteto Fizikos fakultete. Taip pat bus pateikta apklausų apie tai, kas lemia susidomėjimą fizika, mokslininko karjera bei galimybes siekti šios karjeros, rezultatų apžvalga.

Naujausioje ES parengtoje „She Figures“ apžvalgoje Lietuva kartu su Švedija bei Suomija yra lyderiaujančios šalys pagal lyčių lygybės įgyvendinimą mokslinių tyrimų srityje [2]. „She Figures“ indeksas apibendrina 6 pagrindinius rodiklius: darbuotojų įvairovė, tyrimų sritys, karjeros vystymasis, dalyvavimas sprendimų priėmime, dalyvavimas moksliniuose tyrimuose, lyčių dimensijos įtraukimas į mokslinius tyrimus. Per pastaruosius metus (nuo 2017 m.) moterų dalyvavimas mokslinių tyrimų ir inžinerijos srityse vidutiniškai Europos Sąjungoje nekito ir moterų tarp šių sričių darbuotojų yra 41 proc.; Lietuvoje šis procentas sumažėjo nuo 57 proc. 2017 m. iki 47,5 proc. 2023 m. [3]. Pastebima tendencija, kad šalyse, kuriose moterų moksle procentinė dalis yra santykinai didelė lyginant su ES vidurkiu, moterų įsitraukimas mažėja, o šalyse, kur šis procentas mažesnis – didėja. Lyčių pasiskirstymo tarp Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto akademinių darbuotojų kitimas pastaraisiais metais yra 5 procentų ribose.

Sekant mokslininkų akademinę karjerą Europos Sąjungos šalyse (vertinant visas mokslo sritis) stebimos įprastos „žirkklės“, kai daugiau moterų yra tarp studentų ir žemiausio lygmens darbuotojų, tačiau vyrų dalis tarp mokslininkų ima viršyti moterų, kylant karjeros laipteliais [3]. Išskiriant fizinių mokslų ir inžinerijos sritį, visuose karjeros lygiuose (taip pat ir tarp studentų) vyrų yra žymiai daugiau nei moterų. Toks pats pasiskirstymas stebimas ir tarp visų Lietuvos fizikų mokslininkų bei

Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto akademinių darbuotojų. Ypač ryškus skirtumas yra aukščiausiose akademinėse pozicijose (profesoriaus ir vyriausiojo mokslo darbuotojo pareigose), kur Fizikos fakultete moterys sudaro 4 proc.

Vertinant moterų atstovavimą akademinių institucijų sprendimus priimančiuose organuose, Lietuvoje yra daugiau moterų institucijų vadovių (37,8 proc.), nei vidutiniškai ES (26,4 proc.), tačiau moterys Lietuvoje mažiau atstovaujamos įvairiuose komitetuose ir komisijose: 31 proc. Lietuvoje ir 39,5 proc. ES [2]. Vilniaus universitete moterys sudaro 37,5 proc. akademinių padalinių vadovų, 50 proc. Tarybos ir 37 proc. Senato narių. Fizikos fakulteto Taryboje moterų yra 10 proc.

Apklausos rodo, kad mokslininko darbas STEM srityje vertinamas kaip įdomus, pilnas iššūkių, įgalina prisidėti prie pasaulio gerovės, dalyvauti pasaulinių problemų sprendimuose, daryti įtaką visuomenei [4]. Tačiau ši sritis nėra populiari tarp jaunų žmonių. Pagrindine priežastimi nurodoma nusivylimas, atgrasymas jauname amžiuje (mokykloje). Taip pat apklausose minimos vis dar pasitaikančios išankstinės nuostatos, nerimaujama dėl darbinių ir šeiminių įsipareigojimų derinimo [4].

Siekiant pritraukti daugiau jaunų žmonių į akademinę bendruomenę, reikėtų veikti dviem kryptimis: (1) paskatinimas domėtis mokslu nuo mažens (neatbaidyti mokykloje), (2) priemonės, siekiant išlaikyti jaunus žmones jau esančius akademinėje kelyje.

*Reikšminiai žodžiai: akademinė karjera, fiziniai mokslai, lyčių lygybė, mokslo politika.*

#### Literatūra

[1] A.-L. Claey-Kulik, T. E. Jorgensen, H. Stober, Diversity, Equity and Inclusion in European Higher Education Institutions (Results from the INVITED project), ed. C. Royo, H. Mariaud (2019).

[2] European Commission: Directorate-General for Research and Innovation, She figures 2024 – Gender in research and innovation – Statistics and indicators, Publications Office of the European Union (2025); <https://data.europa.eu/doi/10.2777/592260>.

[3] <https://ec.europa.eu/eurostat/web/main/home> (2025 05 10).

[4] <https://www.aiprm.com/women-in-stem-statistics/> (2025 05 10)

# Fizikos mokymo ypatumai bendrojo ugdymo pagrindinėje mokykloje

## Peculiarities of teaching physics in lower secondary education

Rigonda Skorulskienė

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

[rigonda@gmail.com](mailto:rigonda@gmail.com)

Fizika kaip atskiras mokomasis dalykas bendrojo ugdymo mokykloje tradiciškai pradedama dėstyti nuo septintos klasės. Vis dėlto, būtina atsižvelgti į tai, kad mokiniai nuo pirmosios klasės mokosi integruoto gamtos mokslų kurso, kuriame nagrinėjami fizikiniai reiškiniai ir formuojamos pagrindinės fizikinės sąvokos [1]. Todėl svarbu ne akcentuoti dalyko „naujumą“, bet pabrėžti tęstinumą – sudarant sąlygas mokiniams prisiminti jau turimas žinias, jas plėtoti ir užpildyti atsiradusias spragas. Kaip pažymi Osborne ir Dillon [2], vien teorinių žinių perteikimo nepakanka – fizikos ugdymas turi apimti praktinį tyrinėjimą bei problemų sprendimą, kad mokiniai gebėtų prasmingai taikyti žinias realiose situacijose.

Klasikinė fizikos pamoka pasižymi aiškia struktūra: mokytojo įžanga, naujos medžiagos aiškinimas, demonstracijos ir uždavinių sprendimas. Tokiose pamokose dominuoja mokytojo kalbėjimas, o mokiniai lieka pasyvūs klausytojai ir užrašų perrašytojai. Uždaviniai dažniausiai grindžiami mechaniniu formulių taikymu, įstatant skaitines reikšmes, neretai nesigilinant į jų prasmę. Pamokos pabaigoje mokytojas pakartoja pagrindines sąvokas, užduoda kelis klausimus ir paskiria namų darbus. Nors toks modelis užtikrina tvarką, jis riboja mokinių aktyvumą, kūrybiškumą ir gilesnį konceptualų supratimą. Be to, mokomosios veiklos menkai siejamos su realaus gyvenimo kontekstu, todėl mokiniams tampa sunku suvokti praktinę fizikos žinių vertę.

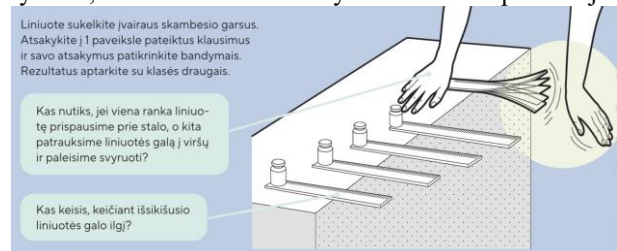
Šiuolaikinės ugdymo teorijos pabrėžia, kad mokiniai žinias konstruoja aktyviai, remdamiesi savo patirtimi ir diskusijomis [3]. Todėl pamokos, paremtos mokinių patirtimi, pradedamos klausimais, kurie padeda aktyvinti turimas žinias ir skatina diskusiją apie kasdienes reiškinius. Nauja medžiaga atrandama kartu – analizuojant mokinių pavyzdžius, pastebėjus atvejus, išgyventą patirtį. Eksperimentai ir simuliacijos tampa priemone patikrinti hipotezes, o uždaviniai formuluojami taip, kad būtų susieti su mokinių aplinka. Pamokos pabaigoje svarbi refleksija, leidžianti mokiniams įvertinti naujai įgytas žinias ir jų taikymą realiaame gyvenime.

Šis metodinis pokytis glaudžiai susijęs su mokymosi priemonių pobūdžiu. Tinkamai parengtas vadovėlis gali tapti ne tik informacijos šaltiniu, bet ir įrankiu, formuojančiu pamokos struktūrą bei mokytojo darbo įpročius. Pavyzdžiui, 7 klasės fizikos vadovėlyje (serija „Horizontali“) [4] tema apie garsą pradedama diskusija ir paprastu bandymu su liniuote (1 pav.), remiantis tuo, kad dauguma mokinių dar vaikystėje yra taip išgavę garsą žaidimo metu. Tik po šio praktinio patyrimo įvedami fizikiniai terminai ir aiškinama garso prigimtis.

Analogiškai tema apie šviesos atspindį grindžiama kamuoliuko judėjimo trajektorijos analize – mokiniai patys pastebi dėsningumą ir suformuluoja atspindžio dėsny. Tokiu būdu vadovėlis ne tik pateikia turinį, bet ir kryptingai veda mokytoją bei mokinius prie tyrinėjimų grįsto mokymosi, kuriame išryškėja ugdymo tęstinumas ir prasmingas žinių taikymas.

Dar pažangesnė kryptis yra tyrinėjimu ir problemų sprendimu grįstas mokymas. Tokios pamokos pradedamos intriguojančiu klausimu ar reiškiniu, kuris kelia nuostabą ir kviečia ieškoti paaiškinimo. Mokiniai patys kelia hipotezes, planuoja veiksmus, atlieka eksperimentus ir analizuoja rezultatus. Mokytojas čia tampa proceso vadovu, padedančiu struktūruoti tyrimą, bet neatskleidžiančiu atsakymų iš anksto. Skaičiavimai ir formulės atsiranda natūraliai – kaip priemonė įrodyti arba paaiškinti gautus duomenis. Tokia metodika atitinka šiuolaikinės švietimo kryptis, kurios pabrėžia tyrinėjimo, problemų sprendimo ir STEAM integracijos reikšmę mokinių ugdyme [2].

Fizikos mokymas pagrindinėje mokykloje turėtų būti suvokiamas kaip tęstinis procesas, pradedamas dar pradinėse klasėse. Klasikinis modelis užtikrina tvarką, tačiau riboja mokinių aktyvumą ir neatskleidžia fizikos aktualumo realiame gyvenime. Patirtimi ir atradimais grįstos pamokos, leidžia mokiniams tapti aktyviais pažinimo dalyviais, konstruoti žinias remiantis savo patirtimi bei tyrinėjimais. Mokytojas iš žinių perteikėjo tampa proceso vadovu, sudarančiu sąlygas mokiniams tyrinėti, atrasti ir taikyti žinias praktikoje.



1 pav. Tema apie garsą pradedama diskusija ir paprastu bandymu su liniuote

*Reikšminiai žodžiai: fizikos mokymas, pagrindinė mokykla, tyrinėjimu grįstas mokymasis, vadovėlis.*

### Literatūra

- [1] Bendrojo ugdymo programos. Gamtos mokslai (2022).
- [2] J. Osborne and J. Dillon, *Science Education in Europe: Critical Reflections* (The Nuffield Foundation, London, 2008).
- [3] R. Driver, H. Asoko, J. Leach, E. Mortimer, and P. Scott, *Educational Researcher* 23(7), 5–12 (1994).
- [4] R. Skorulskienė ir L. Gražienė, *Fizika. Vadovėlis 7 klasei* (serija „Horizontali“) (Šviesa, Vilnius, 2024).

## Fizikos didaktikos aspektai

### Didactic Aspects of Physics Education

Edita Palaimienė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, 10222, Vilnius  
[edita.palaimiene@ff.vu.lt](mailto:edita.palaimiene@ff.vu.lt)

Fizikos mokymo kokybė ir metodai yra esminiai veiksniai, formuojantys mokinių gamtamokslinį raštingumą, kritinį mąstymą bei gebėjimą taikyti žinias praktikoje. Atsižvelgiant į šiuolaikinės švietimo sistemos lūkesčius, vis svarbesniu tampa nuoseklus, teorijomis grįstas didaktikos principų taikymas bendrojo ugdymo mokyklose.

Šiuolaikinis fizikos mokymas remiasi konceptualaus pokyčio teorija [1], kuri pabrėžia, kad mokymas turi ne tik perteikti informaciją, bet ir keisti mokinių išankstines nuostatas. Tik taip galima sudaryti prielaidas gilesniam pasaulio reiškinių supratimui. Todėl svarbu, kad mokymo turinys būtų susietas su realiomis situacijomis, o mokymasis – orientuotas į sąvokų suvokimą, problemų sprendimą ir patyriminę veiklą [2]. Tokiame kontekste svarbų vaidmenį atlieka mokytojas, kuris tampa ne vien žinių perteikėju, o mokymosi proceso fasilitatoriumi. Jis skatina aktyvų, konstruktyvų, savarankišką mokymąsi ir mokinių įsitraukimą [3]. Tam būtinas nuolatinis profesinis tobulėjimas bei gili didaktinių ir dalykinių kompetencijų refleksija.

Tyrimo tikslas – išanalizuoti, kaip fizikos mokytojai taiko šiuolaikinius didaktinius principus, kokias pedagogines strategijas pasirenka, kaip vertina mokinių pasiekimus ir su kokiais iššūkiais susiduria kasdienėje praktikoje.

Tyrimo rezultatai leidžia įvertinti fizikos mokymo praktiką Lietuvoje, išryškinti veiksmingas pedagogines strategijas, nustatyti problemines sritis bei pagrįsti inovatyvių, į mokinių poreikius orientuotų mokymo modelių kūrimo būtinybę.

Šiandienos kontekste vis didesnę reikšmę įgyja skaitmeninių technologijų integracija. Virtualios laboratorijos, simuliacijos ir duomenų analizės įrankiai leidžia ne tik vizualiai pateikti sudėtingus reiškinius, bet ir sudaro galimybes mokiniams savarankiškai

eksperimentuoti, tyrinėti bei gilinti supratimą remiantis realiais duomenimis. Ne mažiau svarbus yra ir mokymosi diferencijavimas, padedantis atliepti skirtingus mokinių gebėjimus ir motyvacijos lygį. Kūrybiškas mokymo metodų derinimas prisideda prie įtraukesnės mokymosi aplinkos kūrimo, kurioje kiekvienas mokinys gali patirti pažangą.

Be formaliojo ugdymo praktikų, reikšmingą indėlį į mokinių motyvaciją ir domėjimąsi mokslu teikia neformalios iniciatyvos, tokios kaip Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto organizuojama „Fotono“ mokykla. Ji skatina praktinį žinių taikymą ir padeda moksleiviams ne tik gilinti, bet ir plėsti savo dalykines kompetencijas.

*Reikšminiai žodžiai: didaktika, metodai, kompetencijos.*

#### Literatūra

- [1] R. Duit and D.F. Treagust, Conceptual change: A powerful framework for improving science teaching and learning, *International Journal of Science Education*, 25:6, 671-688 (2003).
- [2] E.F. Redish, *Teaching Physics with the Physics Suite* (John Wiley & Sons, ISBN 0471393789, 2003).
- [3] S. Vosniadou, *International Handbook of Research on Conceptual Change*. Routledge (New York, Routledge ISBN9780203154472, 2013).

## **Žodinė sesija 2C (Cheminė fizika)**

## BMR spektroskopija baterijų ir baterijų medžiagų tyrimuose

### NMR spectroscopy for battery and battery materials research

Vytautas Klimavičius<sup>1</sup>, Rokas Lemežis<sup>1</sup>, Aurimas Dubauskas<sup>1</sup>, Matas Manionis<sup>1</sup>, Emilis Čiupaila<sup>1</sup>, Nadežda Traškina<sup>2</sup>, Jurgis Pilipavičius<sup>2,3</sup>, Linas Vilčiauskas<sup>2,3</sup>

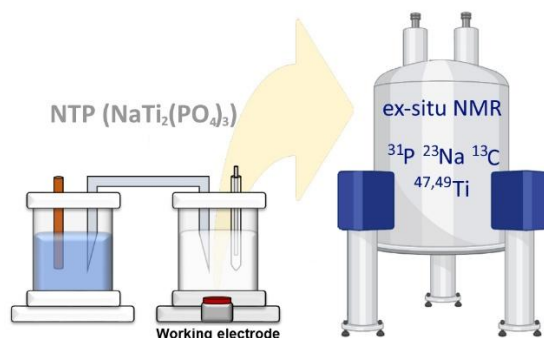
<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

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

[vytautas.klimavicius@ff.vu.lt](mailto:vytautas.klimavicius@ff.vu.lt)

Kietojo kūno ir aukštosios skynos BMR spektroskopija yra galingas eksperimentinis metodas, pagrįstas energinių šuolių tarp branduolių sukininių energijos lygmenų, atsirandančių stipriuose magnetiniuose laukuose, registravimu. Kartu taikant magiškojo kampo sukimąsi (MAS) ir daugybę impulsų sekų, kietojo kūno BMR leidžia atskleisti tiriamųjų sistemų aspektus molekuliname lygmenyje, pavyzdžiui, cheminę aplinką, tarp-branduolinius atstumus, kvadrupolinės sąveikos parametrus ir kt. Aukštosios skynos BMR ir aibė impulsų sekų, leidžia registruoti skystosios fazės medžiagų BMR spektrus, kurie leidžia detalai atskleisti jų molekulinę struktūrą. Visa tai padaro BMR puikia technika energijos medžiagų ir energijos kaupimo įrenginių, pavyzdžiui, NASICON (Sodium Super Ionic CONductor) pagrindo baterijų tyrimuose – galima tirti elektrolitus, elektrodus ex-situ ir in-situ metodais. Pranešimo metu bus pristatyti grupės naujausi tyrimai NASICON pagrindo baterijų tyrimų srityje (1 pav.).



1 pav. NASICON tipo baterijų elektrocheminis sendinimas ir ex-situ BMR tyrimai.

NASICON struktūros elektrodas buvo elektrochemiškai sendinamas ir tiriamas naudojant  $^{31}\text{P}$ ,  $^{23}\text{Na}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{47,49}\text{Ti}$  ex-situ kietojo kūno BMR. Buvo aptiktas ir stebėtas  $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$  vandeninis elektrocheminis skilimas ir elektrodo – elektrolito tarpfazės susidarymas. Susidariusi tarpfazė susideda iš amorfinės fazės, panašios į  $\text{TiO}(\text{OH})(\text{H}_2\text{PO}_4) \cdot n\text{H}_2\text{O}$ , ir karboksilinių grupių ant anglies fazės. Šių tarpfazių susidarymas įkrovimo-iškrovimo ciklų metu lemia talpos praradimą  $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$  pagrindu pagamintame elektrocheminiame įrenginyje. [1]

Pranešimo metu bus pristatyti elektrolitų aukštosios skynos BMR tyrimai. Šie tyrimai leidžia kiekybiškai įvertinti ištirpusių aktyviųjų elektrodų medžiagų elektrocheminio įkrovimo iškrovimo metu kiekius.

Baterijų tyrimuose in-situ BMR yra labiausiai besivystanti sritis. Pranešimo metu bus pristatyti grupėje vykdomi BMR eksperimentinės įrangos kūrimo darbai. Būtent bus pristatytas BMR zondas, kuris leidžia tirti NASICON tipo baterijas jų elektrocheminio įkrovimo ir iškrovimo metu.

Šis projektas gavo finansavimą pagal dotacijos sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMT) (projekto nr. S-MIP-23-47). Autoriai dėkoja centrui SPECTROVERSUM už prieigą prie BMR įrangos.

*Reikšminiai žodžiai: NASICON, BMR, Baterijos.*

#### Literatūra

- [1] V. Klimavičius, N. Traškina, A. Dubauskas, M. Manionis, J. Pilipavičius, L. Vilčiauskas, Appl. Phys. Lett. **84**, 4798 (2004) ACS Appl. Energy Mater., 7, 24, 11665–11669, (2024).

# Tikslus $^1\text{H}$ BMR spektrų modeliavimas: $[\text{C}_4\text{mim}][\text{BF}_4]$ joninis skystis ir jo mišiniai su vandeniu

## Towards accurate modelling of $^1\text{H}$ NMR spectra of ionic liquids: The case of $[\text{C}_4\text{mim}][\text{BF}_4]$ and its aqueous mixtures

E. Sipavičius, G. Majauskaitė, D. Lengvinaitė<sup>1</sup>, S. Bielskutė, V. Klimavičius, F. Mocci, A. Laaksonen, K. Aidas

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 9, LT-10221, Vilnius

[dovile.lengvinaite@ff.vu.lt](mailto:dovile.lengvinaite@ff.vu.lt)

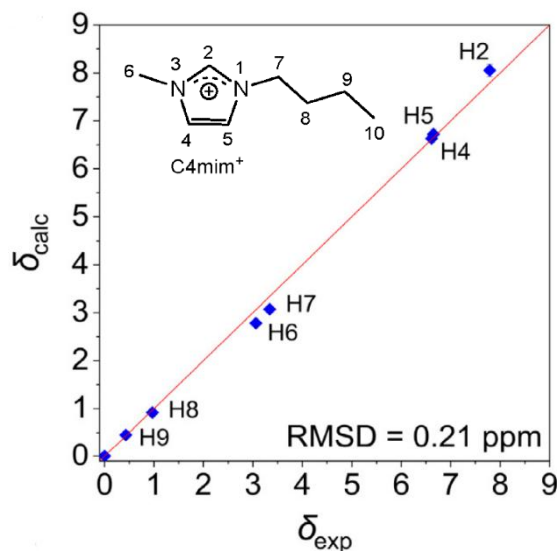
Kambario temperatūros joniniai skysčiai (JS), tai organinės druskos, kurios išlieka skystos kambario ar artimoje temperatūroje. Šie skysčiai yra plačiai tyrinėjami dėl jų potencialaus pritaikymo įvairiose srityse. Tačiau, dažniausiai, dėl savo lokaliai anizotropinės struktūros bei dažnai pasitaikančios nanoskalinės segregacijos, jų struktūros analizė taikant  $^1\text{H}$  branduolių magnetinio rezonanso (BMR) spektroskopiją kelia didelių iššūkių[1]. Nors ankstyvieji tyrimai bandė modeliuoti imidazolio pagrindu sudarytų JS protonų cheminius poslinkius remiantis vienos jonų poros modeliu vakuume ar dielektriniame kontinuu, deja, toks supaprastintas požiūris leido atkurti tik kokybinius spektrų bruožus. Šiame tyrime bandoma įveikti ankstesnių metodų ribotumus taikant integruotą požiūrį, apimančią molekulinis dinaminis (MD) modeliavimus bei kvantinės mechanikos / molekulinės mechanikos (KM/MM) metodiką, siekiant tiksliai prognozuoti  $^1\text{H}$  BMR spektrus joninių skysčių sistemose.

Tyrimo tikslas – pasiekti kiekybinį spektrų  $^1\text{H}$  BMR tikslumą tiek grynam 1-butil-3-metil-imidazolio tetrafluorborato joniniam skysčiui, tiek jo mišiniams su vandeniu, kuriuose molinė joninio skysto dalis svyruoja nuo 0,17 iki 1. Šiam tikslui įgyvendinti buvo taikytas integruotas modeliavimas, taigi buvo atliktos klasikinės molekulinės dinamikos simuliacijos, taikant joniniams skysčiams pritaikytą jėgų lauką bei išsamūs kvantinės mechanikos/molekulinės mechanikos skaičiavimai, kuriais nustatomi  $^1\text{H}$  BMR izotropinio ekranavimo konstantos.

Molekulinės dinamikos simuliacijų metu nustatyta, kad tetrafluorborato ( $\text{BF}_4^-$ ) anijonai dažniausiai lokalizuojasi priešais  $\text{C}2\text{--H}2$  grupę imidazolo žiedą, o ne virš žiedo, kaip buvo spėta ankstesniuose eksperimentiniuose tyrimuose. Struktūrinė analizė parodė, kad net mažėjant joninio skysto koncentracijai mišiniuose, vandens molekulės retai išstumia anijonus iš pirmojo solvatacijos sluoksnio aplink  $\text{C}2\text{--H}2$ , todėl struktūrinė aplinka išlieka palyginti pastovi. Taip pat buvo pastebėta nanosegregacija, kai butilo grupės sudaro nepoliarinį tinklą, o vandens molekulės labiau pasiskirsto anijonų srityje. Taip pat esant žemam joninio skysto kiekiui mišinys su vandeniu, pastebėti didesni vandens klasteriai, tačiau JS struktūra vis dar išlaiko segmentuotą pobūdį.

$^1\text{H}$  BMR spektrų modeliavimo rezultatai parodė, kad skaičiuoti  $^1\text{H}$  cheminiai poslinkiai labai tiksliai sutampa su eksperimentiniais – nuokrypis siekė vos  $\sim 0.2$  ppm visose sistemose[2]. Ypač tiksliai buvo modeliuotas H2

protono cheminis poslinkis – anksčiau tai buvo vienas iš labiausiai nenuspėjamų parametrų. Nustatyta, kad  $^1\text{H}$  BMR spektrai  $[\text{C}_4\text{mim}]^+$  katijono yra beveik nepriklausomi nuo mišinio sudėties, nepaisant to, kad molekulinė aplinka aplink C-H jungtis pastebimai kinta. Šie rezultatai taip pat atskleidė, kad JS struktūriniai pokyčiai tik nežymiai keičia BMR spektrus, kas buvo netikėta, turint omeny ankstesnius tyrimus su kitais anijonais (pvz., halogenidais), kur spektrai ženkliai keitėsi.



1 pav. Palyginimas tarp apskaičiuotų ir išmatuotų santykinų  $[\text{C}_4\text{mim}]^+$  katijonų  $^1\text{H}$  BMR spektrų gryname  $[\text{C}_4\text{mim}][\text{BF}_4]$ . Eksperimentinės ir apskaičiuotos  $^1\text{H}$  BMR cheminės poslinkio vertės, atitinkamai  $\delta_{\text{exp}}$  ir  $\delta_{\text{calc}}$ , pateiktos ppm vienetais. Vienetinis tiesės grafikas iliustruoja idealų atitikimą tarp skaičiavimų ir eksperimentinių rezultatų[2].

*Reikšminiai žodžiai: joniniai skysčiai, tirpikliai, klasikinės molekulinės dinamikos simuliacijos, kvantinė mechanika / molekulinė mechanika*

### Literatūra

- [1] Y.-L. Wang, B. Li, S. Sarman, F. Mocci, Z.-Y. Lu, J. Yuan, A. Laaksonen, M.D. Fayer, Chem. Rev., 120, 2020, 5798.
- [2] E. Sipavičius, G. Majauskaitė, D. Lengvinaitė, S. Bielskutė, V. Klimavičius, F. Mocci, A. Laaksonen, K. Aidas, Chemical Physics Letters, 887, 2025, 142295.

# Polipropileno ir plastikinių pakuočių atliekų skilimo kinetikos analizė greitosios pirolizės metu

## Kinetic Analysis of Pyrolytic Decomposition of Polypropylene and Plastic Packaging Waste during Flash Pyrolysis

Ieva Kiminaitė<sup>1</sup>, Clara Leonie Brigitte Eckert<sup>2</sup>, Andrius Tamošiūnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Lietuvos energetikos institutas, Plazminių technologijų laboratorija, Breslaujos g. 3, LT-44403 Kaunas

<sup>2</sup>Technical University of Munich, Boltzmannstraße 15, 85748 Garching

[ieva.kiminaite@lei.lt](mailto:ieva.kiminaite@lei.lt)

Globally, plastic waste treatment is a major environmental challenge. The incineration for energy recovery is still the main treatment method in Europe. While in the world, the greater part of plastic waste is landfilled (approximately 50%) or mismanaged, directly polluting the land and oceans. Only a small fraction of plastic waste is recycled globally, with estimates below 10% [1].

Pyrolysis is a thermochemical conversion process during which wastes can be converted to value-added products (gaseous, liquid or solid) through heating in the absence of oxygen. According to Kannan et al. [2], polyolefins during flash pyrolysis between 950 and 1000 °C are primarily depolymerised, recovering up to 68% of ethylene and propylene monomers. Therefore, flash pyrolysis of plastics mainly produces hydrocarbon gases, which are also valuable from a calorific point. Additionally, heavier hydrocarbons are the second most abundant product in this type of pyrolysis of plastics, which is comparable to diesel oil [3].

This study aimed to determine the kinetic parameters of polypropylene (PP) plastic and plastic packaging mix (PPM) pyrolytic decomposition in isothermal heating conditions. The most common approach in pyrolysis kinetic analysis is the isoconversional methods. Despite the advantage of high convenience of the isoconversional methods and precise measurement of temperature feasible on the thermogravimetric analysis (TGA) instrument, the main limitation noted is the slow heating rate.

The primary reactions of the pyrolysis process are the thermal decomposition of the polymeric chain, with the main reaction mechanism being the random scission. The random scission model assumes that polymer decomposition occurs via the progressive cleavage of chemical bonds and follows first-order kinetics. [4] To estimate the kinetics of the single-step thermal decomposition of feedstock for continuous or semicontinuous flash pyrolysis, the following equation is used:

$$\frac{d\alpha}{dt} = k(T)f(\alpha) \quad (1)$$

where  $\frac{d\alpha}{dt}$  represents the rate of change of the degree of conversion ( $\alpha$ ),  $k(T)$  is the temperature-dependent reaction rate constant, and  $f(\alpha)$  is the reaction model in this case equal to  $1-\alpha$ . The rate constant of a chemical reaction, which dictates the reaction's speed, is dependent on temperature, as described by the Arrhenius equation.

Proximate and ultimate analysis of PP and PPM was performed to determine the feedstock composition. While TG-GC analysis was carried out to study thermal behaviour and VOC composition of pulverised ( $\leq 1$  mm) PP and PPM pyrolysis, heating from ambient temperature to 900 °C at 15 °C/min. Experiments on wire-mesh reactor applying instant heating (1000 °C/s) were carried out to measure the volatile yield from plastic samples (30 mg), maintaining them from 0,5 to 10 s at 800–1200 °C temperature. The model was fitted with empirical data points using the least squares fitting procedure to determine kinetic parameters, activation energy ( $E_a$ ) and pre-exponential factor ( $A$ ). These are further used to estimate the decomposition duration at relevant pyrolysis temperatures by the first-order decay law.

The coefficient of determination was calculated to be 0.925, revealing a good fit of the single first-order reaction model to the flash pyrolysis process of PP and PPM. The plastic packaging mixture was determined to possess a lower activation energy for decomposition and markedly higher reaction rate constants relative to the pure polypropylene. Several studies have described it as a result of interactions between the different plastic types during thermal degradation. Additionally, the activation energy values of isothermal pyrolysis were significantly lower than those of non-isothermal pyrolysis estimated via isoconversional methods, which is mathematically described by the kinetic compensation effect. The primary cracking of PP and PPM at 800–1200 °C concludes within 2–5 seconds, which is an important measure for reactor design and process optimisation.

*Keywords: plastic pyrolysis, decomposition kinetics, plastic recycling*

### References

- [1] P.N.T. Pilapitiya, and A.S. Ratnayake. The world of plastic waste: A review. *Cleaner Materials*, 11, (2024).
- [2] P. Kannan, A. Al Shoaibi, and C. Srinivasakannan. Temperature effects on the yield of gaseous olefins from waste polyethylene via flash pyrolysis. *Energy & fuels*, 28(5), (2014).
- [3] K. Radhakrishnan, P.S. Kumar, G. Rangasamy, L.P. Perumal, S.Sanulla, S. Nilavendhan, V. Manivasagan, and K. Saranya. A critical review on pyrolysis method as sustainable conversion of waste plastics into fuels. *Fuel*, 337, (2023).
- [4] N. Koga, S. Vyazovkin, A.K. Burnham, L. Favergeon, N.V. Muravyev, L.A. Pérez-Maqueda, C. Saggese, and P.E. Sánchez-Jiménez. ICTAC Kinetics Committee recommendations for analysis of thermal decomposition kinetics. *Thermochimica Acta*, 719, (2023).

# Peptidas [Emim][TFA] mišiniuose su vandeniu – struktūros ir BMR savybių teorinis tyrimas

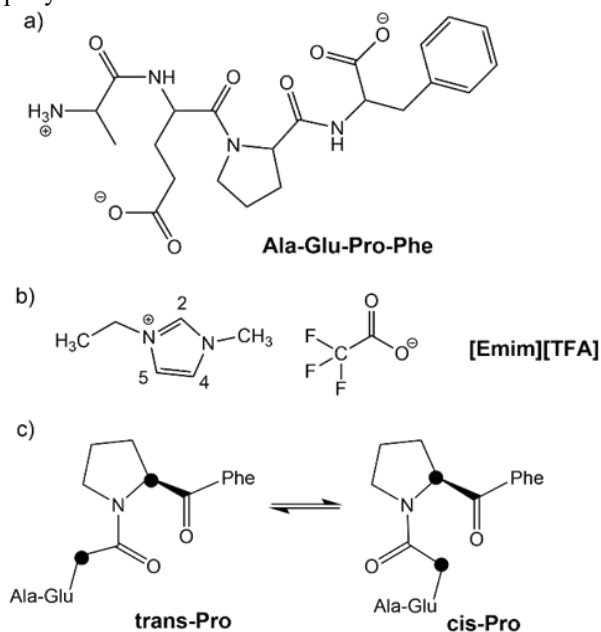
## Peptide in [Emim][TFA] Mixtures with Water – Theoretical Study of Structural and NMR Properties

Žyginta Murnikova<sup>1</sup>, Kęstutis Aidas<sup>1</sup>

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

[zyginta.murnikova@ff.stud.vu.lt](mailto:zyginta.murnikova@ff.stud.vu.lt)

Joniniai skysčiai (JS) jau kurį laiką yra žinomi kaip „žalieji“ ir biologiškai suderinami tirpikliai, o jų galimi panaudojimo būdai biologinėse srityse apima fermentų katalitinio aktyvumo keitimą, įvairių baltymų stabilizavimą arba destabilizavimą, taip pat jų pralaidumo per membranas didinimą [1]. Sąveikos tarp joninių skysčių ir baltymų yra įvairios ir gana sunkiai interpretuojamos, todėl kaip modelinė sistema dažnai naudojami trumpesni peptidai su JS. Tokiu būdu galima nustatyti, kaip skirtingi JS sąveikauja su peptidais, ar keičia jų struktūrą vandeniniame tirpale. Tinkamiausias metodas tarpmolekulinių sąveikų nustatymui yra branduolių magnetinio rezonanso (BMR) spektroskopija, kadangi atomų, ypač vandenilio, cheminis poslinkis yra itin jautrus centrinės molekulės artimos aplinkos pokyčiams.



1 pav. a) peptidas Ala-Glu-Pro-Phe, b) etil-3-metilimidazolio trifluoracetato joninis skystis, c) AEPF *trans/cis* izomerai

Šiame darbe buvo tirtas Ala-Glu-Pro-Phe (AEPF) tetrapeptidas, taikant teorinės chemijos metodus kaip molekulinės dinamikos (MD) simuliacijos ir kvantinės mechanikos/molekulinės mechanikos skaičiavimai, vandeninėje terpėje bei JS/vandens mišinyje. Tyrimui pasirinktas joninis skystis sudarytas iš dažnai JS sudarančio imidazolio katijono ir trifluoroacto rūgšties anijono – etil-3-metilimidazolio trifluoracetatas ([Emim][TFA]). Dėl proline aminorūgšties, esančios

peptido sudėtyje, šis peptidas gali egzistuoti dviejose izomerinėse formose – *cis* ir *trans*, kurių abiejų parametrai buvo įvertinti. Teoriškai apskaičiuoti peptido vandenilio atomų cheminio poslinkio skirtumai buvo palyginti su eksperimentiniais rezultatais [2], leidusiais įvertinti įvairias sąveikas, vykstančias peptido/joninio skysčio/vandens sistemose, o MD simuliacijų duomenys atskleidė tam tikrus pokyčius peptido antrinėje struktūroje. Joninio skysčio/vandens mišinyje aptikta keletas skirtingų peptido konformacijų, todėl buvo atlikta išsami struktūros, tarpmolekulinių sąveikų bei joninio skysčio poveikio joms analizė.

*Reikšminiai žodžiai:* MD simuliacijos, QM/MM, BMR, peptidai, joniniai skysčiai.

**Padėka:** Darbe aprašyti skaičiavimai vykdyti atviros prieigos skaičiavimo centro „HPC Saulėtekis“ aukšto našumo superkompiuteriu Vilniaus universiteto Fizikos fakultete. Tyrimas finansuotas Lietuvos mokslo tarybos, grantu nr. S-MIP-22-74.

### Literatūra

- [1] J. M. Gomes, S. S. Silva, and R.L. Reis, Chem. Soc. Rev. **48**, 4317–4335 (2019)
- [2] A. Richardt, C. Mrestani-Klaus, and F. Bordusa, J. Mol. Liq. **192**, 9–18 (2014).

# Photoinitiation dynamics in SZ2080 photoresist sensitized with different photoinitiators

Marius Navickas,<sup>1</sup> Dimitra Ladika,<sup>1</sup> Edvinas Orentas,<sup>2</sup> Martynas Talaikis,<sup>3</sup> Gediminas Niaura,<sup>3</sup> Mangirdas Malinauskas,<sup>1</sup> Mikas Vengris<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilnius University, Laser Research Center, Saulėtekio av. 10, LT-10223, Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Department of Organic Chemistry, Vilnius University, Naugarduko str. 24, LT-03225, Vilnius, Lithuania

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

[marius.navickas@ff.vu.lt](mailto:marius.navickas@ff.vu.lt)

Multiphoton laser lithography has emerged as a rapidly developing technology, enabling the fabrication of sophisticated three-dimensional (3D) microstructures. Recent progress in this field primarily focuses on the creation of novel microstructures [1], the development of new laser sources, and the synthesis of new polymerization materials with desired properties. As a result, a hybrid organic-inorganic photoresist SZ2080 has been synthesised and tested for 3D fabrication [2]. This material facilitates the creation of inorganic ceramic structures by utilizing multiphoton photopolymerization process [2]. However, despite the broad applicability of SZ2080, the photochemistry governing its potential applications has not been investigated. Therefore, in this work, we apply ultrafast transient absorption (TA) spectroscopy to study these events.

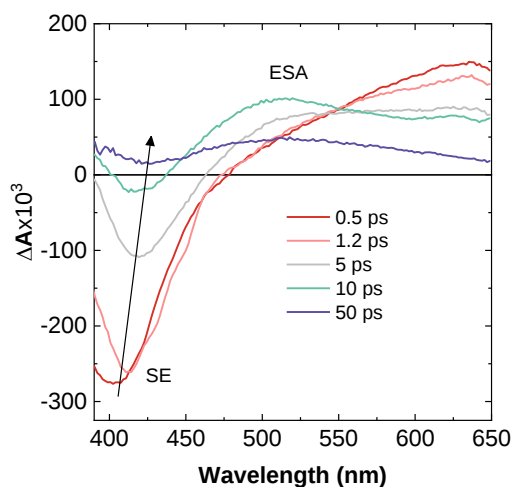


Fig. 1. TA spectra at different probe times of SZ2080 containing 1.0 wt % of Irgacure369

In this work, we investigate the photopolymerization initiation dynamics in hybrid organic-inorganic photoresist SZ2080 doped with various photoinitiators. Fig. 1 shows the transient absorption (TA) spectra recorded at different probe delay times for SZ2080 containing 1.0 wt% Irgacure 369 photoinitiator. These measurements provide insight into the early-stage events following photoexcitation and allow us to track the evolution of intermediate stages on the femtosecond-to-picosecond timescale.

Our results reveal the emergence of a strong stimulated emission (SE) when Irgacure 369 is embedded in the SZ2080 photoresist matrix, while in the solvent,

we track only the development of excited-state absorption (ESA). Finally, TA demonstrates an ability of Irgacure 369 to initiate the polymerization reaction significantly faster compared with other commonly used photosensitizers, such as acyl phosphine oxide derivatives. This enhanced reactivity was hypothesized to be related to the photoinitiator's coordination interactions within the inorganic part of SZ2080.

According to the nuclear magnetic resonance spectroscopic data, we attribute the latter behaviour to the formation of a donor–acceptor complex facilitated by the electron-withdrawing Zr(IV) atom in the inorganic moiety of SZ2080 interacting with the electron-donating Irgacure 369. Such an interaction appears to promote localization of photoinitiation, thus skipping the diffusion of the radicals until they activate monomers. The photoinitiation then becomes diffusion-unlimited, which enables better control of the photopolymerization process.

Taken together, these findings unveil the potential of developing photoresist–photoinitiator interactions as a way of choice to optimize material performance in high-resolution 3D microfabrication.

**Keywords:** Multiphoton photopolymerization, hybrid organic-inorganic prepolymer, donor-acceptor complexes, electron transfer.

## References

- [1] E. Skliutas, M. Lebedevaitė, *Nanophotonics* **10**, 1211–1242 (2021).
- [2] G. Merkininkaitė, D. Gailevičius, *Int. J. Polym. Sci.* **2019**, 3403548 (2019).

**Žodinė sesija 3A**  
**(Astrofizika, astronomija ir kosmologija)**

# Spiral galaxies with unusual azimuthal asymmetry in oxygen abundance

L. S. Pilyugin<sup>1,2</sup>, G. Tautvaišienė<sup>1</sup>

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

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

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

The discs of spiral galaxies have long been known to show negative radial abundance gradients in the sense that the abundance is higher at the centre and decreases with the galactocentric distance [1]. The distribution of nebular abundances across the disc of a galaxy is specified by a relation between the oxygen abundance, O/H, and the galactocentric distance, R. It is a common practice to derive the O/H – R relation assuming that the abundance within the disc is symmetric. The scatter in oxygen abundances around the O/H – R relation is usually within 0.05 dex, i.e. spiral galaxies reveal an azimuthal variation in the oxygen abundance with an amplitude within 0.05 dex, and regions with enhanced and reduced abundances are distributed throughout the whole disc.

We found five galaxies in the Mapping Nearby Galaxies at Apache Point Observatory survey (MaNGA) with unusual abundance distributions. In the inner (more than half of the optical radius) part of each galaxy, there is a large, sector-like (up to a semi-circle) region where the oxygen abundances are appreciably higher ( $> 0.06$  dex) than in another sector, that is, the difference between the oxygen abundances in those sectors exceed the typical value of the scatter around the O/H – R relations, an amplitude of the azimuthal variations in the oxygen abundance. The galaxy M-11761-12705 is a massive galaxy with a stellar mass of  $\log(M_{\text{star}}/M_{\text{sun}}) = 11.6$  (more massive than our Galaxy, the Milky Way, by a factor around 10), the masses of four other galaxies are moderate:  $10.1 < \log(M_{\text{star}}/M_{\text{sun}}) < 10.4$ .

The oxygen abundances in the inner part of each selected galaxy do not form a single sequence along the radius; instead, they are split into two branches. Abundances within both high- and low-metallicity regions show flat radial gradients (the abundances are at nearly constant levels). The histogram for the spaxel abundances demonstrates two distinct peaks, the difference between high and low abundances are of 0.06 – 0.08 dex.

We compare the evolutionary status our sample of galaxies with azimuthal abundance asymmetry to other galaxies, that is, we considered their positions in the stellar mass versus star formation rate (SFR) diagram. The SFRs in galaxies with azimuthal abundance

asymmetry agree with the SFR – Mstar relation for other galaxies [2].

The central oxygen abundance in the massive galaxy is lower than the central oxygen abundances in galaxies of similar masses, while the central O/H abundances in four moderate-mass galaxies are comparable to that in galaxies of similar masses. The N/O value for a given O/H contains important information about the enrichment history of heavy elements in the region [3,4]. The high- and low-metallicity regions in massive galaxy are located in the very low envelope of the band in the O/H – N/O diagram. The positions of high-metallicity regions of the moderate-mass galaxies in the N/O – O/H diagram are closer to the lower envelope of the band than the positions of low-metallicity regions of those galaxies. This indicates that the origin of the high-metallicity regions in the massive galaxy and four moderate-mass galaxies can be different.

The abundance properties in the massive galaxy M-11761-12705 can be explained by the low-metallicity gas infall onto the galaxy and a subsequent episode of high star formation rate (starburst) in the diluted interstellar medium occurring between 20 and 50 Myr ago. For moderate-mass galaxies, the higher oxygen abundance in the high-metallicity region and its shift towards the lower envelope in the N/O – O/H diagram compared to the low-metallicity region can be explained in one of two ways: either the starburst in the high-metallicity region occurred several dozens of Myr ago, or the star formation in the galaxy is accompanied by galactic winds, and the region evolved with the lower efficiency of the enriched galactic winds shows the higher metallicity.

Detailed discussion of those galaxies are given in [4].

*Key words:* spiral galaxies, abundances, evolution

## References

- [1] Searle L., 1971, ApJ, 168, 327
- [2] Speagle J.S., Steinhardt C.L., Capak P.L., Silverman J.D., 2014, ApJS, 214, 15
- [3] Edmunds M.G., Pagel B.E.J., 1978, MNRAS, 185, 77
- [4] Pilyugin L.S., G. Tautvaišienė G., 2025, A&A, 700, A54

# Gravitacinis mikrolėšis – įrankis aptikti nematomus planetinės masės objektus

## Gravitational microlensing is a tool to detect invisible planetary-mass objects

Marius Maskoliūnas<sup>1</sup>, Łukasz Wyrzykowski<sup>2</sup>, E. Stonkutė<sup>1</sup>, J. Zdanavičius<sup>1</sup>, V. Čepas<sup>1</sup>, E. Pakštienė<sup>1</sup>, P. Zielinski<sup>3</sup>, K. Kruszynska<sup>2</sup>, P. J. Mikołajczyk<sup>2</sup>, M. Gromadzki<sup>2</sup>, N. Ihanec<sup>2</sup> and U. Jonauskaitė<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Warsaw University Astronomical Observatory Al. Ujazdowskie 4, 00-478 Warszawa, Poland

<sup>3</sup>Institute of Astronomy, Faculty of Physics, Astronomy and Informatics, Nicolaus Copernicus University in Toruń, Poland

[marius.maskoliunas@tfai.vu.lt](mailto:marius.maskoliunas@tfai.vu.lt)

Iš žvaigždžių stebėjimų ir evoliucijos teorijos žinome, kad pačios mastviausios žvaigždės galiausiai virsta juodosiomis skylėmis (juodosiomis bedugnėmis), mažesnės masės – neutroninėmis žvaigždėmis ir jei evoliucijos pabaigoje likusi masė mažesnė už  $1.33 M_{\odot}$ , turime baltąją nykštukę (angl. White dwarf). Dar mažesnės masės objektai yra rudosios nykštukės (angl. Brown dwarfs) kur masė mažesnė už  $0.08 M_{\odot}$ . Jei objekto masė siekia maždaug  $0.012 M_{\odot}$  atitinkamai maždaug 13 Jupiterio masių ir mažiau, tai yra planetiniai objektai. Tai yra santykinai labai silpnos spinduliuotės, bet turintys masę mūsų galaktikos objektai ir tokių objektų turėtų būti labai daug. Problema ta, kad tokius objektus praktiškai sunku pastebėti net ir su pačiais galingiausiais teleskopais, negana to, dar reikia žinoti kur teleskopą nukreipus yra didesnė tikimybė objektą atrasti. Gravitacinis mikrolėšis yra fizikinis reiškinys kai tolimesnės žvaigždės šviesa yra sustiprinama prieš mus esančio nematomo objekto masės, kurią gali sukelti minėtos juodosios skylės, neutroninės žvaigždės, baltosios nykštukės, bet ir planetiniai objektai, kurių masės ženkliai mažesnės už Saulės. Juodųjų skylių, kurios susidaro iš masyviausių žvaigždžių ir masė lygi 5-15 Saulės masių, pagal Žvaigždžių evoliucijos teoriją manoma, kad Paukščių Tako galaktikoje turi būti apie 20 milijonų tuo tarpu mažesnės masės ir silpnos spinduliuotės objektų tūkstančiais kartų daugiau[1].

Mes stebime tolimos žvaigždės šviesą, o artimesnio kūno gravitacinis laukas ją sustiprina panašiai kaip lėšis. Dažniausiai gravitacinio mikrolėšio trukmė yra nuo kelių savaičių iki kelių mėnesių, bet kartais pasitaiko ir kelis metus trunkančio įvykio. Atrasti ir atpažinti mikrolėšį pakankamai sudėtingas uždavinys, bet laimei, astronomai šiai dienai plačiau naudoja įvairias dangaus apžvalgas. Ilgą laiką GAIA kosminio teleskopo duomenys buvo naudojami nuspėti mikrolėšio įvykio pradžią. Šiandien plačiai taikome ASAS-SN (The All Sky Automated Survey for Super Novae), LCO (Las Cumbres Observatory) ir kitos apžvalgos. Kadangi automatinės apžvalgos skenuoja dangų kas tam tikrą laiko intervalą, dažniausiai savaitės ir mėnesiai, o tyrimams reikalingi vos ne kiekvienos nakties duomenys, todėl tęstiniuose stebėjimuose dalyvauja antžeminiai teleskopai išsidėstę po visą žemės rutulį. Be detalių tęstinių stebėjimų, kurie trunka nuo kelių mėnesių iki metų, numanomas gravitacinių lėšių įvykius yra

sudėtinga atskirti nuo eilinių žvaigždžių šviesio pokyčių [2].

Gravitacinių lėšių Galaktikos diske tyrimai leidžia mums tirti nematomus objektus plačiame masių intervale. Lietuvos ir Lenkijos astrofizikai pasauliniu lygiu bendradarbiauja Paukščių Tako Galaktikos disko gravitacinių mikrolėšių įvykių paieškose ir tyrimuose. Pagal Lietuvos mokslų tarybos (LMT) finansuojamą tarptautinį projektą Lenkijos - Lietuvos juodųjų skylių paieška - atradimų metas (*LMTLT, grant No. S-LL-24-1*) vadovas Dr. Edita Stonkutė, atlikome tęstinius mikrolėšių stebėjimus įvykiams *Gaia16aye* [3], *Gaia18cbf* [4], *Gaia19dke* [5], bendradarbiavimo rezultatai atsispindi recenzuojamuose aukšto mokslinio indekso publikacijose, ir paskutinis planetinis mikrolėšio įvykis *AT2021uey* [6] kurio metu atrasta 1 kpc nuotolyje  $M$  nykštukė žvaigždė turinti 1,3 Jupiterio masės planetą.

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

### Literatūra

- [1] Gould A. 2000, Measuring the Remnant Mass Function of the Galactic Bulge, *ApJ*, 535, 928
- [2] Wyrzykowski Ł., et al. 2016, Black hole, neutron star and white dwarf candidates from microlensing with OGLE-III, *MNRAS*, 458, 3012
- [3] Wyrzykowski, Ł.; Mróz, P.; Rybicki, K. A. and 182 more. *Full orbital solution for the binary system in the northern Galactic disc microlensing event Gaia16aye 2020A&A*, 633, A98
- [4] Kruszynska, K.; Wyrzykowski, Ł.; Rybicki, K. A. and 29 more. *Lens parameters for Gaia18cbf a long gravitational microlensing event in the Galactic plane 2022A&A*, 662, A59
- [5] Maskoliūnas, M.; Wyrzykowski, Ł.; Howl, K. and 74 more. *Lens mass estimate in the Galactic disk extreme parallax microlensing event Gaia19dke ACTA ASTRONOMICA Vol. 74 (2024) pp. 77–111*
- [6] Ban, M.; Voloshyn, P. and 43 more. *AT2021uey: A planetary microlensing event outside the Galactic bulge 2025A&A*, 697, A57

# [C/N] gausų santykiai padrikuosiuose spiečiuose kaip žvaigždžių amžiaus indikatoriai

## Tracing Stellar Ages from [C/N] Abundance Ratios in Open Clusters

Bruno Ćurjurić<sup>1</sup>, Arnas Drazdauskas<sup>1</sup>, Valentina D'Orazi<sup>2,3,4</sup>, Marina Dal Ponte<sup>2</sup>, Angela Bragaglia<sup>5</sup>, Gražina Tautvaišienė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilnius University, Faculty of Physics, Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Saulėtekio av. 9., LT-10222, Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>INAF - Osservatorio Astronomico di Padova, vicolo dell'Osservatorio 5, 35122 Padova, Italy

<sup>3</sup>Department of Physics, University of Rome Tor Vergata, via della Ricerca Scientifica 1, 00133 Rome, Italy

<sup>4</sup>Department of Astronomy & McDonald Observatory, The University of Texas at Austin, 2515 Speedway, Austin, TX 78712, USA

<sup>5</sup>INAF - Osservatorio di Astrofisica e Scienza dello Spazio, via P. Gobetti 93/3, 40129 Bologna, Italy

[bruno.curjurić@ff.stud.vu.lt](mailto:bruno.curjurić@ff.stud.vu.lt)

The chemical evolution of the Milky Way provides a unique window into the history of our Galaxy and the processes that shaped its diverse stellar populations. Among the elements forged in stars, carbon, nitrogen, and oxygen (CNO) are of particular importance. They trace nucleosynthetic pathways of different stellar progenitors, govern crucial aspects of stellar structure and evolution, and represent the most abundant heavy elements in the Universe after hydrogen and helium [1]. Beyond their astrophysical significance, CNO are also indispensable for life as we know it, forming the backbone of biogenic molecules and driving planetary atmospheric chemistry and maybe even planetary formation processes [2].

In this work, we present preliminary results on the abundances of CNO in stars belonging to 35 open clusters in the solar neighbourhood (96 stars in total). The targets are in different evolutionary stages, namely the red giant branch and red clump, located at distances up to 4.6 kpc from the Sun and spanning ages from 0.05 up to 5 billion years [3]. The stars were observed with the Telescopio Nazionale Galileo (TNG) in La Palma, Canary Islands. The spectra were obtained using the HARPS-N spectrograph ( $R = 115,000$ ), covering the 3830–6930 Å wavelength range [4]. Preliminary trends of [C/Fe] and [N/Fe] as a function of [Fe/H] are shown in Fig. 1.

Carbon and nitrogen are so-called mixing-sensitive elements, as their surface abundances change during stellar evolution. When a star ascends the red giant branch, the first dredge-up occurs: the convective envelope deepens and connects the chemically altered regions of the stellar interior with the surface. As a result, carbon becomes depleted while nitrogen is enhanced. These abundance variations not only trace internal astrophysical processes, but also provide information about the stars themselves: the extent of the mixing depends on stellar mass, which is closely linked to stellar age [5]. The resulting empirical [C/N]–age correlation thus offers a useful age indicator, that can be applied alongside other dating methods to ensure robust and reliable estimates.

By analysing [C/N] in open clusters spanning a wide range of ages, we can calibrate the relationship between

abundance ratios and stellar ages. Such relations not only provide constraints on the efficiency of mixing processes in stellar interiors but also provide an additional practical tool for estimating ages of large stellar samples. This, in turn, contributes to refining our picture of the chemical and dynamical evolution of the Milky Way.

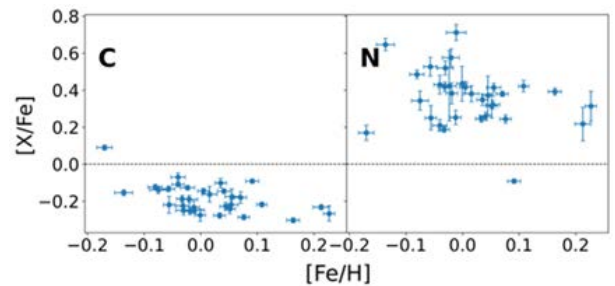


Figure 1. [C/Fe] and [N/Fe] vs. [Fe/H]. Ćurjurić et al., in preparation

**Keywords:** *Galactic chemical evolution, open clusters, stellar evolution and nucleosynthesis, stellar ages.*

**Acknowledgements:** *We acknowledge funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT, grant No. S-MIP-23-24).*

### References

- [1] D. Romano, *Astron Astrophys Rev* 30, (2022).
- [2] J.M. Brewer and D.A. Fischer, *ApJ* 831, 20 (2016).
- [3] T. Cantat-Gaudin, F. Anders, A. Castro-Ginard, C. Jordi, M. Romero-Gómez, C. Soubiran, L. Casamiquela, Y. Tarricq, A. Moitinho, A. Vallenari, A. Bragaglia, A. Krone-Martins, and M. Kounkel, *A&A* 640, A1 (2020).
- [4] M. Mayor et al., *The Messenger* 114, 20 (2003).
- [5] G. Casali et al., *A&A* 629, A62 (2019).

# Lithium and CNO Abundances in Chromospherically Active RS CVn Stars

B. Bale<sup>1</sup>, G. Tautvaišienė<sup>1</sup>, R. Minkevičiūtė<sup>1</sup>, A. Drazdauskas<sup>1</sup>, Š. Mikolaitis<sup>1</sup>, E. Stonkutė<sup>1</sup>, M. Ambrosch<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilnius University, Faculty of Physics, Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Saulėtekio av. 3, 10257 Vilnius, Lithuania

[barkha.bale@ff.vu.lt](mailto:barkha.bale@ff.vu.lt)

Lithium (Li) and CNO surface abundances are powerful tracers of stellar evolution and internal mixing processes. In single red giants, these abundances generally follow well-predicted changes after the first dredge-up [1]. However, RS CVn-type stars are close, chromospherically active systems with rapid rotation and strong magnetic fields, which often show abundance patterns that diverge from these standard predictions [2,3]. Their pronounced chromospheric emission, spot activity, and enhanced angular momentum make them important targets for understanding how magnetic activity affect chemical evolution [4].

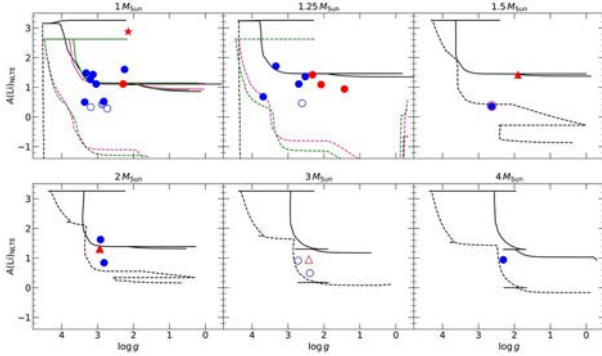


Figure 1: Solid lines show models including 1DUP; dashed lines show thermohaline + rotation mixing [5]. Black, pink, and green lines correspond to  $Z = 0.014$ ,  $0.004$ , and  $0.002$ . Circles: RGB stars; plus signs: subgiants; triangles: red clump. Blue symbols: below RGB bump, red: above RGB bump, green: thick-disc stars.

The aim of this study is to investigate Li and CNO abundances, together with  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  and C/N ratios, in a sample of 33 RS CVn stars observed with the 1.65 m Moletai Astronomical Observatory telescope equipped with the VUES spectrograph, complemented by archival spectra of 13 additional stars taken from Paper I [6]. High-resolution spectra ( $R \approx 36000$  and  $68000$ ) were analysed using spectral synthesis, and stellar masses were determined via the UniDAM tool.

Our analysis shows that roughly half of the low-mass RS CVn giants display lithium abundances consistent with first dredge-up (1DUP) predictions, whereas the rest are more strongly depleted, in line with additional thermohaline mixing. In intermediate-mass RS CVn stars, lithium is systematically reduced compared to standard models, with the pattern best explained by rotation-induced mixing. Overall, the lithium behavior in RS CVn systems mirrors the

evolutionary decline seen in normal red giants, but with evidence for earlier onset of extra mixing.

Carbon isotopic ratios further support this picture. Two stars, \*iot Gem and HD 179094, exhibit low  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  values despite lying below the red giant branch (RGB) luminosity bump, suggesting that extra mixing begins earlier in active stars than in inactive counterparts. In contrast, the Li-rich giant V\* OP And retains unusually high C/N and  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  ratios, leaving the mechanism of its enrichment unresolved.

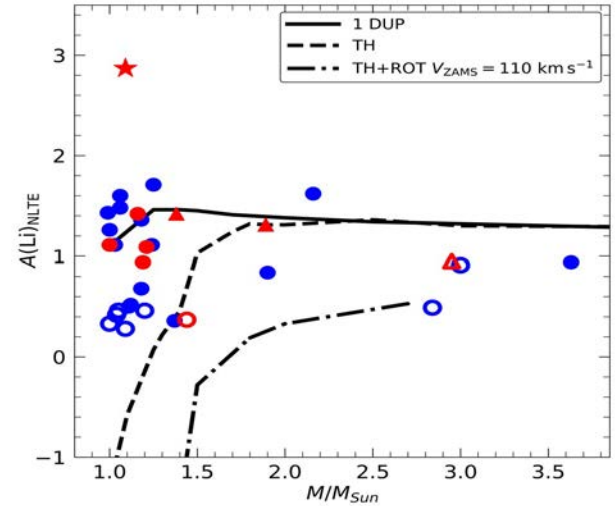


Figure 2: Model predictions are shown: solid line – first dredge-up (1DUP), dashed – thermohaline mixing (TH), dash-dotted – thermohaline + rotation (TH+ROT) [7].

**Key words:** RS CVn stars, lithium abundance, carbon isotopes, stellar evolution, chromospheric activity

**Acknowledgements:** We acknowledge funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT, grant No. S-MIP-23-24).

## References:

- [1] Iben I., *ApJ*, **142**, 1447 (1965).
- [2] Randich S. et al., *A&A*, **283**, 893 (1993).
- [3] Pallavicini R. et al., *A&A*, **253**, 185 (1992).
- [4] Hall D. S., *ASSL*, **60**, 287 (1976).
- [5] Lagarde N. et al., *A&A*, **543**, A108 (2012).
- [6] Bale B. et al., *A&A*, **696**, A23 (2025).
- [7] Charbonnel C., Lagarde N., *A&A*, **522**, A10 (2010)

**Žodinė sesija 3B**  
**(Biofizika ir medicinos fizika)**

## Aplinkos sąlygų įtaka CuInZnS/ZnS kvantinių taškų poveikiui gėlių vandenų fitoplanktonui

### Environmental conditions impact on effects of CuInZnS/ZnS quantum dots on freshwater phytoplankton

Rasa Miliukaitė<sup>1,2</sup>, Martyna Petkutė<sup>1</sup> ir Agnė Kalnaitytė-Vengeliienė<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, Biomokslų institutas, Saulėtekio al. 7, LT-10257 Vilnius  
[agne.kalnaityte@ff.vu.lt](mailto:agne.kalnaityte@ff.vu.lt)

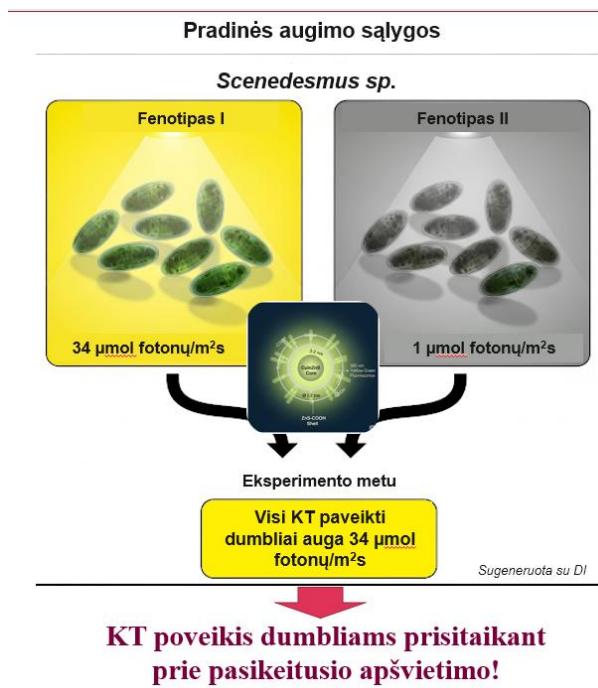
Dėl vis dažniau vandens telkiniuose nustatomų nanomedžiagų didesnį mokslinį susidomėjimą kelia ir kvantinių taškų (KT), įskaitant CuInZnS/ZnS-COOH, poveikis gėlių vandenų fitoplanktonui. Nors vario pagrindu pagaminti kvantiniai taškai laikomi mažiau toksiška alternatyva nei kitų tipų KT, jie vis tiek kelia potencialią riziką vandens organizmams, todėl jų poveikis fitoplanktonui reikalauja išsamesnio įvertinimo ir nuodugnių tyrimų. Fitoplanktoną sudarantys mikrodumbliai, kaip bioindikatoriai, yra gyvybiškai svarbūs vertinant vandens kokybę ir aptinkant bei nustatant teršalus. Jų vertė taip pat grindžiama jautrumu aplinkos pokyčiams ir greita fiziologine reakcija. Kai kurių tipų nanodalelių sąveika su mikrodumbliais gali sutrikdyti gyvybiškai svarbius ląstelių procesus, pavyzdžiui, fotosintezę [1].

Impulso-amplitudės moduluota (anglų kalba: Pulse Amplitude Modulated - PAM) fluorimetrija yra patikimas metodas, leidžiantis neinvaziškai stebėti mikrodumblių autofluorescencijos ir fotosintezės parametrų pokyčius. Fluorescencijos (FL) ir Koherentinės anti-Stokes Ramano sklaidos (anglų kalba: Coherent Anti-Stokes Raman Scattering - CARS) [2] mikroskopijos metodų derinimas suteikia detalią informaciją apie natūralių cheminių medžiagų pasiskirstymą mikrodumbliuose, pavyzdžiui, karotinoidų ir kaip šias medžiagas paveikia kvantiniai taškai. Tačiau kol kas nepakanka žinių, kaip skirtingų tipų KT poveikis priklauso nuo mikrodumblių rūšies ir kokią įtaką jam padaro aplinkos sąlygos, kuriomis auga fitoplanktonas.

Atliktas *Desmodesmus sp.* ir *Scenedesmus sp.* mikrodumblių tyrimas, siekiant palyginti specifinį kvantinių taškų sukeltą poveikį jų fotosintezės efektyvumui ir bendrai fiziologijai skirtingomis aplinkos sąlygomis. Nustatyta, kad komerciškai prieinami CuInZnS/ZnS-COOH kvantiniai taškai trikdo abiejų rūšių mikrodumblių fotoaklimatizacijos procesą, tačiau konkretūs pokyčiai priklauso nuo auginimo sąlygų, prie kurių mikrodumbliai buvo prisitaikę.

Vario pagrindu pagaminti kvantiniai taškai sukelia *Scenedesmus sp.* dumblių elektronų transporto greičio (ETR) ir fotosintezės II sistemos kvantinio našumo (Y(II)) sumažėjimą. Tačiau nefotocheminių koeficientų pokyčiai priklauso nuo dumblių prisitaikymo prie aplinkos sąlygų ir susiformavusių fenotipų (1 pav.). Tiriant *Desmodesmus sp.* dumblius nustatyta, kad CuInZnS/ZnS-COOH KT sukelia ląstelių žūtį: pradiname etape, praėjus 24 valandoms, buvo užregistruotas autofluorescencijos ir karotinoidų CARS

signalų sumažėjimas, o po 48 valandų buvo aptiktas iš ląstelių išsiskyrusio chlorofilo fluorescencijos signalas.



1 pav. *Scenedesmus sp.* mikrodumblių fenotipai susiformavę dėl skirtingų apšvietimo sąlygų.

Išsamesnės žinios apie skirtingų tipų kvantinių taškų ekotoksiškumą platesniam mikrodumblių rūšių spektrui padėtų ne tik prognozuoti ir mažinti galimą žalą, kurią sukelia KT, patekę į ekosistemas, bet taip pat prisidėtų prie KT taikymo pramonėje ir medicinoje tobulinimo bei plėtros.

*Reikšminiai žodžiai:* nanodalelės; vandeninė terpė; autofluorescencija; mikroskopija.

#### Literatūra

- [1] A. Kalnaityte-Vengeliene and et.al, Environ. Sci.: Nano, 2024.
- [2] A. Dementjev and J. Kostkevičienė, J. Raman Spectrosc. 2013.

## **Tetrapiroliniai junginiai – radiosensibilizatoriai ir radioprotektoriai, jų taikymo vėžio terapijoje problematika ir ateities perspektyvos**

### **Tetrapyrrolic compounds – radiosensitizers and radioprotectors, issues of their application in cancer therapy and future prospects**

Saulius Bagdonas, Agnė Kalnaitytė-Vengalienė, Marija Kalnaitytė, Mantas Grigalavičius  
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius  
[saulius.bagdonas@ff.vu.lt](mailto:saulius.bagdonas@ff.vu.lt)

Tetrapiroliniai junginiai yra viena iš ankstyviausių fotosensibilizatorių (FS) klasių, naudojamų sukelti oksidacinį stresą vėžio ląstelėse, jas paveikiant šviesa, ir tokiu būdu įgalinant tikslinį citotoksiškumą, kartu sumažinant pašalinį poveikį sveikiems audiniams. Toks gydymo būdas vadinamas fotosensibilizuota terapija, tačiau platesnį jo pritaikymą klinikinėje praktikoje, be kitų priežasčių, apsunkina nepakankama regimosios šviesos skvarba pro biologinius audinius.

Jonizuojančioji spinduliuotė (JS), kuri neturi šio trūkumo, taip pat pritaikoma vėžio ląstelėms inaktyvuoti, tačiau jos sukelia žala audiniams nėra selektyvi, o pašalinis poveikis sveikiems audiniams mažina leistinas praktinio taikymo ribas ir riboja radikalaus gydymo galimybes. Šią problemą siekiama įveikti kuriant ir įdiegiant naujas technologines spindulinio gydymo priemones, bei tarpusavyje derinant kelis gydymo metodus, pvz., radioterapiją ir chemoterapiją. Tačiau kompleksinis vėžinių audinių atsakas į jonizuojančios spinduliuotės sukeltas pažaidas apsunkina radikalaus sprendimo paiešką.

Siekiant išplėsti jonizuojančios spinduliuotės pritaikymo galimybes, didinti jos veiksmingumą bei minimizuoti žalingą poveikį spindulinės terapijos metu, pasitelkiami radiosensibilizatoriai, radioprotektoriai ir radiomodulatoriai. Radiosensibilizatoriai ir radiomodulatoriai - tai medžiagos, kuriomis siekiama stiprinti tiesioginį spindulinės terapijos poveikį ar įvairiais būdais mažinti vėžio ląstelių atsparumą, paveikiant jų gyvybinius procesus tiek pačios procedūros metu, tiek ją pabaigus. Kita vertus, radioprotektoriai yra junginiai, kuriais norima apsaugoti nuo jonizuojančios spinduliuotės sukeltų pažeidimų normalius, sveikus audinius, ar gauti didžiausią terapinio poveikio langą, pavyzdžiui, įgalinant padidinti toleruojamą švitinimo dozę. Vienas iš pagrindinių ūminių JR poveikių organizmui yra oksidacinis stresas [1]. Fotosensibilizatorių veiksmingumas fotosensibilizuotos vėžio terapijos atveju taip pat priskiriamas padidėjusiam audinių oksidaciniam stresui; tačiau gaunamas biologinis poveikis priklauso tiek nuo sudėtingos sąveikos tarp FS struktūrinių ypatumų, fotofizikinio ir fotocheminio aktyvumo, bei jų kaupimosi ir pasiskirstymo biologiniuose audiniuose savybių, tiek ir nuo pačiuose audiniuose sukeliamų procesų. Taigi, nors kai kurių tetrapirolinių junginių radiosensibilizuojantis poveikis buvo tiriamas dešimtmečius ir netgi atlikti sėkmingi klinikiniai tyrimai [2], tačiau mechanizmas, atsakingas

už pastebėtą gydomojo poveikio sustiprėjimą arba jo nebuvimą, nėra iki galo suprantamas. Iš dalies taip yra dėl skirtingų naudojamų eksperimentinių protokolų, taip pat ir dėl vėžio audinių heterogeniškumo bei deguonies lygio skirtumų juose, kurie yra svarbūs veiksniai, lemiantys ląstelių radiosensibilizaciją ir terapinį rezultatą. Kita vertus, tai lemia ir nepakankamas dėmesys pritaikomų fotosensibilizatorių fizikocheminėms savybėms, kurios gali paveikti jų sąlygojamą radiosensibilizuojantį ar apsauginį poveikį jonizuojančios spinduliuotės poveikiams audiniams.

Šioje tarpdisciplininėje apžvalgoje bus aptariami tyrimai atskleidžiantys galimą tetrapirolinių junginių, kaip radiosensibilizatorių ir radioprotektorių, dvejopą vaidmenį, ir panaudojimą didinant vėžio radioterapijos optimizavimo galimybes. Svarbus vaidmuo čia tenka ir egzogeninės 5-aminolevulino rūgšties, sukeliančios protoporfirino IX kaupimąsi mitochondrijose, panaudojimui, taip sukuriant išskirtinę galimybę įveikti vėžio ląstelių gynybos mechanizmus, galinčius reikšmingai paveikti gydymo rezultatą [3]. Bus pristatyti esami kombinuotosios vėžio radioterapijos iššūkiai ir apžvelgtos kelios galimybės pagerinti jos veiksmingumą, tam pasitelkiant naujausius nanotechnologinius metodus, besiremiančius unikaliomis nanodarinių savybėmis.

*Reikšminiai žodžiai: jonizuojanti spinduliuotė, tetrapiroalai, vėžys, radiosensibilizatoriai.*

#### **Literatūra**

- [1] J. Talapko, D. Talapko, D. Katalinić, et al., *Medicina*, **60**, 653 (2024).
- [2] M. Schaffer, R. Batash, P.M. Schaffer, et al., *J. Gen. Med. Clin. Pract.*, **7**, 155 (2024)
- [3] L. Gong, Y. Zhang, Ch. Liu, et al., *J. Nanomed*, **16**, 1083 (2021).

# Mezenchiminių kamieninių ląstelių panaudojimas dendrimerinių nanoklasterių gabenimui į vėžines ląsteles

## Mesenchymal stem cells for the targeted delivery of dendrimer-based nanoclusters to cancer cells

Simona Steponkienė<sup>1</sup>, Emilė Pečiukaitytė<sup>1,2</sup>, Džiugas Jurgutis<sup>1,2</sup>, Alėja Marija Daugėlaitė<sup>1,3</sup>, Vilius Poderys<sup>1</sup>, Hsiu-Pen Lin<sup>4</sup>, Yaw-Kuen Li<sup>4,5</sup>, Tung-Kung Wu<sup>4,6</sup>, Vitalijus Karabanovas<sup>1,7</sup>, Ričardas Rotomskis<sup>1,8</sup>.

<sup>1</sup>Biomedical Physics Laboratory, National Cancer Institute, Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Life Sciences Center, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

<sup>3</sup>Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

<sup>4</sup>Center for Emergent Functional Matter Science, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsin-Chu, Taiwan.

<sup>5</sup>Department of Applied Chemistry, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsin-Chu, Taiwan.

<sup>6</sup>Department of Biological Science and Technology, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsin-Chu, Taiwan

<sup>7</sup>Department of Chemistry and Bioengineering, Vilnius Gediminas Technical university, Vilnius, Lithuania

<sup>8</sup>Biophotonics Group of Laser Research Center, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

[Simona.steponkiene@nvi.lt](mailto:Simona.steponkiene@nvi.lt)

Mesenchymal stem cells (MSCs) are promising therapeutic carriers thanks to their natural ability to migrate to tumors. Recent studies showed that loading cargo into MSCs does not affect this homing ability [1, 2]. To ensure safety, the cargo must remain inactive until MSCs reach tumors. One strategy is to use light-activated materials, which are harmless in the absence of stimuli but trigger cytotoxic reactions upon illumination. The main drawback is limited light penetration, so near-infrared (NIR) excitation would help reach deeper tumor layers [3]. Chemotherapeutic drugs, such as the clinically proven doxorubicin (DOX), can be harmful to MSCs and may impair their natural migratory abilities. As a result, only a few studies have demonstrated the targeted delivery of chemotherapy drugs using MSCs [4]. Nanotechnologies may offer various ways to encapsulate doxorubicin in a safe nanoenvelope; however, a smart, stimuli-triggered release mechanism must be engineered to enable the release of the toxic compound on demand.

Recently, dendrimer-based nanoclusters (DNCs) have been synthesized, loaded with DOX and indocyanine green (ICG) to construct a light-sensitive chemotherapy drug [5]. ICG is known to increase the local temperature upon irradiation of 808 nm laser light, and as a consequence, DOX is released from the dendrimer structure.

*Research objective* – to synthesize novel multifunctional dendrimer-based nanoparticles with targeting, photothermal, and photodynamic features, combined with MSCs as cancer-specific cell delivery vehicles to achieve efficient cancer diagnosis and treatment.

PAMAM dendrimer nanoclusters (DNCs-ICG-DOX-PEG) were synthesized by a previously established protocol [5]. The optical properties of DNCs-ICG-DOX-PEG were measured using an FLS920 spectrophotometer (Edinburgh Instruments Ltd) and a UV–VIS spectrophotometer Cary 50 (Varian, Australia). The hydrodynamic diameter of nanoclusters was determined using a ZetaPals (Brookhaven Inc., USA) particle size analyzer. Photobleaching and phototherapeutic effect

experiments on MSCs were performed using an 808 nm wavelength laser. Live MSCs cells were imaged using a Nikon Eclipse TE2000-S C1 plus scanning laser confocal microscope. Hoechst 33342 and LysoTracker Green DND-26 were used to stain nuclei and lysosomes for intracellular localisation analysis of DNCs-DOX-ICG-PEG. The metabolic activity of MSCs after exposure to different concentrations of DNCs-DOX-ICG-PEG was evaluated using the CCK-8 cell counting kit. Migratory properties of MSCs were evaluated using a wound assay. Finally, a pilot study with mouse tumor models was conducted to investigate the accumulation and biodistribution of DNCs-DOX-ICG-PEG following injection.

It was determined that DNCs-ICG-DOX-PEG are stable in various biological media, compared to DNCs without PEG. MSCs are able to efflux DOX from their nucleus; however, DOX encapsulated in dendrimers remains inside the cells for the longer period. Biocompatibility studies showed that at certain concentrations, DNCs-ICG-DOX-PEG does not affect the metabolic activity and migratory properties of MSCs. Upon irradiation with 808 nm laser, the metabolic activity of MSCs is decreased in a dose-dependent manner.

This study was supported by Research Council of Lithuania No. S-LT-TW-17 and National Council of Science and Technology No. NSTC 113-2923-M-A49-006 -MY2.

*Keywords:* nanocarriers, dendrimers, phototherapy, mesenchymal stem cells

### Literature

- [1] Buddhadev Layek et al. (2018). Mol Cancer Ther.;17(6):1196-1206. doi: 10.1158/1535-7163.MCT-17-0682.
- [2] Greta Butkiene et al. (2024). ACS Applied Materials & Interfaces: 18;16(37):49092-49103.
- [3] Suresh Thangudu et al. (2021). Biomater Sci.;9(16):5472-5483.
- [4] Amirhesam Babajani et al. (2020). Front Bioeng Biotechnol.;8:748.
- [5] Weng, C.-C., Yang, T.-A., & Li, Y.-K. (2021). Materials & Design, 197, 109230.

# Didelio pralaidumo erdvinė-laikinė optinė koherentinė tomografija

## High-throughput spatio-temporal optical coherence tomography

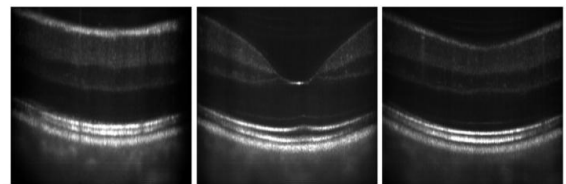
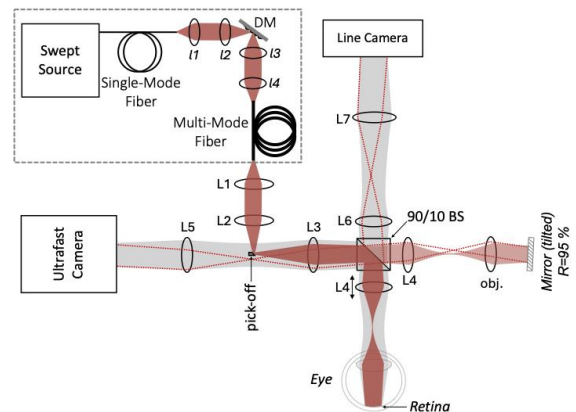
Karolis Adomavičius<sup>1</sup>, Austėja Trečiokaite<sup>1</sup>, Erikas Tarvydas<sup>1,2</sup>, Egidijus Aukšorius<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, Vilnius.

[austeja.treciokaite@ftmc.lt](mailto:austeja.treciokaite@ftmc.lt)

Optinė koherentinė tomografija (OKT) yra metodas, leidžiantis registruoti trimačius (3D) vaizdus šviesą sklaidančiose medžiagose. Dėl šios savybės OKT vos per kelis dešimtmečius tapo vienu kertinių oftalmologinės diagnostikos metodų. Tačiau tradicinių skenuojančių OKT sistemų pritaikymą riboja palyginti mažas skenavimo greitis, optinės aberacijos, koherentinis triukšmas ir judesio artefaktai. Šias problemas iš dalies sprendžia pilno lauko OKT (PL-OKT), kurioje naudojama 2D kamera lygiagrečiam signalo registravimui, iš esmės padidinančiam vaizdinimo spartą [1]. Maksimalus greitis pasiekiamas sujungus PL-OKT su derinamo bangos ilgio lazeriu ir Furjė srities duomenų registravimo principu. Šis metodas, vadinamas erdvinė-laikine optine koherentine tomografija (ELOKT) [2], leidžia atlikti didelės spartos 3D tinklainės vaizdinimą, tačiau pasižymi ribotu jautriu. Šiame darbe pristatome didelio pralaidumo (DP) optinę sistemą, kuri pagerina ELOKT jautrį iki 3.5 karto (5.4 dB). To pasiekama standartinį 50/50 šviesos pluošto daliklį pakeitus asimetriniu 90/10 dalikliu ir panaudojus galinėje objektyvo židinio plokštumoje montuojamą nukreipiantį veidrodį [3]. Ši konfigūracija leidžia maksimaliai padidinti į bandinį patenkančią šviesos srautą ir efektyviau surinkti atgal išsklaidytą signalą, nes naudojant įprastus 50/50 pluošto daliklius, prarandama daugiau nei 75 % šviesos: apie 50 % netenkama apšviečiant bandinį ir dar tiek pat signalui grįžtant link detektoriaus. Be to, vaizdinant biomedicininis bandinius, atskaitos pluošto atspindžio koeficientas turi būti labai žemas (vos keli procentai), o tai dar labiau padidina nuostolius. Paprasčiausiai padidinti šviesos šaltinio galią dažnai negalima dėl techninių apribojimų arba fototoksinių poveikio rizikos tiriamam objektui. Mūsų pasiūlytas paprastas, šviesos energiją taupantis metodas pritaiko ELOKT sistemas realaus laiko, silpnai atspindinčių biologinių bandinių vaizdinimui. Metodo efektyvumą patikrinome tirdami tiek sintetinius (atspindinčius ir sklaidančius) bandinius, tiek žmogaus tinklainę *in vivo* [4]. Pav. 1 pavaizduota DP-ELOKT sistema, susidedanti iš šviesos generavimo ir vaizdinimo sistemų. Šviesos generavimo sistemoje derinamo bangos ilgio lazerio šviesa, atspindėta nuo deformuojamos membranos (DM), yra įvedama į ilgą daugiamodį šviesolaidį. Vaizdinimo sistema pagrįsta Linnik interferometru ir susideda iš dviejų vaizdinimo kamerų: itin sparčios 2D kameros ir linijinės kameros kuri naudojama greitam aksialinių tinklainės vaizdų registravimui. DP-ELOKT pagerina SNR 3.5 karto, o sistemos jautrumas siekė 81.2 dB esant įprastinei konstrukcijai ir 86 dB DP režime.



1 pav. Viršuje pavaizduota DP-ELOKT principinė schema. L1–L9 – achromatiniai lęšiai; obj. – objektyvas. Raudonas pluoštas žymi apšvietimo ir atraminius pluoštus, o pilki pluoštai vaizduoja išsklaidytą šviesą. Apačioje- tinklainės XZ skerspjūviai.

Pav. 1 pavaizduoti trys tinklainės skerspjūvio (XZ) vaizdai, apimantys geltonosios dėmės (makulos) sritį su DP-ELOKT sistema. Kiekvienas vaizdas atitinka skirtingą tinklainės skerspjūvį ir fiksuoja vis kitą vietą geltonojoje dėmėje. Visuose vaizduose aiškiai atpažįstami visi pagrindiniai tinklainės sluoksniai: nervinių skaidulų sluoksnis, vidinis ir išorinis tinkliniai sluoksniai, tinklainės pigmentinis epitelis ir gyslainė.

*Reikšminiai žodžiai: mikroskopija, optinė koherentinė tomografija, oftalmologija.*

### Literatūra

1. A. Dubois, et al., "High-resolution full-field optical coherence tomography with a Linnik microscope," *Applied Optics* **41**, 805–812 (2002).
2. E. Aukšorius, et al., "Spatio-temporal optical coherence tomography provides full thickness imaging of the chorioretinal complex," *iScience* **25**, 105513 (2022).
3. E. Aukšorius and A. C. Boccara, "High-throughput dark-field full-field optical coherence tomography," *Opt. Lett.* **45**, 455–458 (2020).
4. K. Adomavičius, et al., "High-throughput spatio-temporal optical coherence tomography (STOC-T)," *Optics Continuum* **4**(2025).

**Žodinė sesija 3C**  
**(Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika,**  
**Nanomokslas ir nanotechnologijos)**

# Krūvio nešėjų judrio ir gyvavimo trukmės poveikis CdSeTe saulės celių našumui

## Impact of carrier mobility and lifetime to polycrystalline CdSeTe solar cell efficiency

Patrik Ščajev<sup>1</sup>, Marco Nardone<sup>2</sup>, Carey Reich<sup>3</sup>, Rouin Farshchi<sup>3</sup>, Kevin McReynolds<sup>4</sup>, Dmitry Krasikov<sup>4</sup>, and Darius Kuciauskas<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Institute of Photonics and Nanotechnology, Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio Ave. 3, LT-10257, Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Department of Physics Bowling Green State University Bowling Green, OH 43403, USA

<sup>3</sup>California Technology Center, First Solar, Santa Clara, CA, 95050 USA

<sup>4</sup>Advanced Research, First Solar, Perrysburg, OH, 43551 USA

<sup>5</sup>Chemistry and Nanoscience Center, National Renewable Energy Laboratory, Golden, CO, 80401 USA

[patrik.scajev@ff.vu.lt](mailto:patrik.scajev@ff.vu.lt)

CdTe is the only thin film technology to demonstrate large scale manufacturability and long-term reliability. [1] It is cost-competitive with crystalline photovoltaics and has lower embedded energy and carbon. To further reduce cost per watts, efficiency improvements are needed. Loss analysis and defect models guide and benchmark such improvements.

Here, we apply detailed measurements of electronic defects and carrier dynamics using a combination of spectrally- and time-resolved methods [2]. We study polycrystalline  $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$  heterostructures fabricated by vapor transport deposition as a function of Se composition ( $x = 0, 0.2$ , and  $0.4$ ) and As dopant incorporation. Impact of uniform and graded bandgaps (graded bandgaps are used in record-efficiency solar cells) and with different levels of As (group V dopant) incorporation were investigated. Such correlative analysis of electronic defects and their impact is applied to polycrystalline PV absorbers for the first time: spectral photoluminescence (PL) quantifies near-bandgap radiative defect states, time-resolved PL quantifies trapping, picosecond-resolution light-induced transient grating (LITG) quantifies initial mobility  $\mu_1$ , nanosecond-resolution LITG quantifies mobility on the charge collection timescale  $\mu_2$  (Fig. 1), and pump-probe spectroscopy quantifies radiative and nonradiative state lifetimes. We show that initial mobilities in As-doped polycrystalline heterostructures ( $\mu_1 = 5\text{--}60\text{ cm}^2\text{ (Vs)}^{-1}$ ) are comparable with mobilities in single crystal CdTe:As with similar dopant activation ( $\mu = 10\text{--}100\text{ cm}^2\text{ (Vs)}^{-1}$ ). Carrier trapping to the sub-bandgap defect states (activation energies  $E_A = 60\text{--}165\text{ meV}$ ) within less than  $1\text{ ns}$  results in  $\approx 50$  times lower mobility, consistent with device simulations. Impact on solar cells is quantified in device simulations, which agree with current CdTe photovoltaics efficiency records (Fig. 2).

We show that electronic defects in high-efficiency As-doped CdSeTe solar cells are more complex than usually assumed in solar cell models, and more complex than defects in perovskites or  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$ . Our work builds on recent observations of sub-bandgap emission in CdSeTe, develops a more detailed understanding of

charge carrier transport and recombination, and examines the impact on state-of-the-art solar cells.

**Keywords:** CdTe, thin film solar cells, optical characterization, loss analysis.

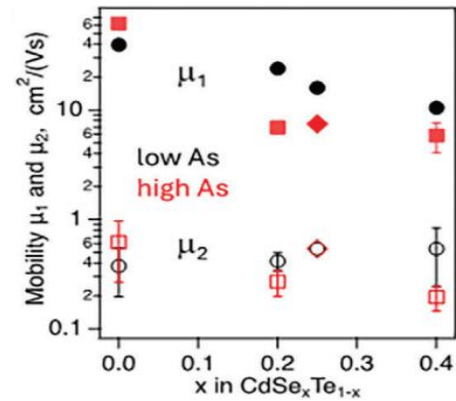


Fig. 1. LITG mobility dependences on x content [2].

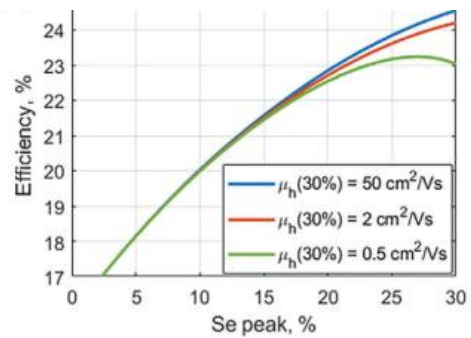


Fig. 2. Cell efficiency vs. Se content and mobility [2].

## References

- [1] M. A. Scarpulla, B. McCandless, A. B. Phillips, Y. Yan, M. J. Heben, et al. Sol. Energy Mater. Sol. Cells **255**, 112289 (2023).
- [2] P. Ščajev, M. Nardone, C. Reich, R. Farshchi, K. McReynolds, D. Krasikov, D. Kuciauskas, As-Doped Polycrystalline CdSeTe: Localized Defects, Carrier Mobility and Lifetimes, and Impact on High-Efficiency Solar Cells. Adv. Energy Mater. **15**, 2403902 (2025).

# Lazerinio mikroapdirbimo taikymai GaN ir Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> puslaidininkinių prietaisų gamyboje

## Additive processing of the GaN and Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> based semiconductor devices by Direct Laser Micromachining

Justinas Jorudas<sup>1</sup>, Laimis Zubauskas<sup>2</sup>, Maxim Moscotin<sup>1</sup>, Simonas Indrišiūnas<sup>2</sup>, Paulius Gečys<sup>2</sup>, and Irmantas Kašalynas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Optoelectronics, Center for Physical Sciences and Technology (FTMC), Saulėtekio Ave. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Department of Laser Technologies, Center for Physical Sciences and Technology (FTMC), Savanorių Ave. 231, LT-02300 Vilnius, Lithuania  
justinas.jorudas@ftmc.lt

Direct laser micromachining (DLM) is widely studied technique in semiconductor processing, due to its contactless nature, sub-micron precision, and high speed. Typically, DLM has been applied to GaN-based and Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> based for laser liftoff of the epitaxial layers [1], [2], laser vertical interconnect accesses (VIAs) drilling [3], [4], laser dye dicing [5], [6], and high precision laser annealing of Ohmic contact stacks for device processing [7], [8]. However up to date – very little research has been done on usage of DLM for typical semiconductor device formation processing steps such as mesa isolation formation, recessing and metallization lift-off for ohmic and Schottky contacts.

In this work, we investigate uses of DLM for mesa isolation formation and ohmic contact recessing on Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-based and AlGaIn/GaN high electron mobility transistor (HEMT) structures. Such new mask-less technology is additive, maskless, and green expanding usage of recessed electric contacts in semiconductor heterostructures due to reduction of the fabrication time, material consumption, and simplifying the technology [9].

The DLM was used to remove material with 320 fs laser pulses of 345 nm wavelength controlling the damage to the semiconductor structure and contamination with ancillary materials. The results were compared to the UV-photo lithography methods combined with reactive ion etching. Electric contacts were processed of a Ti/Al/Ni/Au (30/210/40/150 nm) metal stack. Only organic contamination removal from semiconductor surfaces was used prior to metallization using a piranha solution H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>:H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (3:1). Circular transmission line measurement (CTLTM) method was used to compare performance of the recessed and reference CTLTM ohmic contact arrays. To investigate mesa formation capability, semiconductor areas between CTLTM array contacts were recessed from 70 nm to 250 nm in the case of heterostructures of GaN and Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and above 1 μm for epitaxial Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> layers. Recessing of ohmic contacts in CTLTM arrays for AlGaIn/GaN HEMT structures was investigated by DLM in the range of 70 nm.

Results of DLM isolation obtained for the semiconductor heterostructure samples show that recess depth of 100 nm or more between ohmic contacts is enough to isolate contacts, since resistance between them

increases more than 7 orders of magnitude. In the case of DLM recessing of ohmic contacts for AlGaIn/GaN HEMT structures – good ohmic performance was achieved but still demonstrating up to 1.6 times higher ohmic contact resistance that requires further optimization. This can be caused by the current 70 nm DLM recess depth (recessing below two-dimensional electron gas – over recessing) and contact front edge recessing design used. Possible solution is to use complex pattern recesses, such as array recessing, which could provide a better match to over-recessing and will be studied in future.

*Acknowledgement:* the work received founding from LMT through the project: „Tyrimas bekausių žaliųjų technologijų GaN ir Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> galios įrenginiams gaminti naudojant lazerinį mikroapdirbimą“ (P-LT-TW24-1).

*Key words:* direct laser micromachining, AlGaIn/GaN, HEMT, Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

### References

- [1] A. Tanaka et al., Sci. Rep., vol. 12, no. 1, p. 7363, May 2022, doi: 10.1038/s41598-022-10610-4.
- [2] M. D. Alam et al., Appl. Phys. Lett., vol. 119, no. 13, Sep. 2021, doi: 10.1063/5.0064716.
- [3] O. Kruger et al., IEEE Electron Device Lett., vol. 27, no. 6, pp. 425–427, Jun. 2006, doi: 10.1109/LED.2006.874212.
- [4] C. Sasaoka, Y. Ando, H. Takahashi, N. Ikarashi, and H. Amano, Phys. status solidi, vol. 220, no. 16, Aug. 2023, doi: 10.1002/pssa.202200739.
- [5] S. Indrišiūnas, E. Svirplys, J. Jorudas, and I. Kašalynas, Micromachines, vol. 12, no. 4, p. 407, Apr. 2021, doi: 10.3390/mi12040407.
- [6] Z. Sun et al., J. Mater. Sci. Technol., vol. 238, pp. 303–312, Dec. 2025, doi: 10.1016/j.jmst.2025.03.044.
- [7] M. Hou, G. Xie, and K. Sheng, IEEE Electron Device Lett., vol. 39, no. 8, pp. 1137–1140, Aug. 2018, doi: 10.1109/LED.2018.2844951.
- [8] Z. Liu, D. Chen, L. Wan, and G. Li, IEEE Electron Device Lett., vol. 39, no. 12, pp. 1896–1899, Dec. 2018, doi: 10.1109/LED.2018.2877717.
- [9] I. Kašalynas, S. Indrišiūnas, P. Prystawko, and P. Kruszewski, “METHOD FOR FABRICATION OF RECESSED ELECTRICAL ELEMENTS,” EP3975224B1, 2022.

# Tiesioginė grafeno sintezė ant SiO<sub>2</sub> ir h-BN mikrobange plazma aktyvuoto cheminio nusodinimo iš garų fazės būdu ir taikymas lauko tranzistoriams bei fotodiodams

## Direct synthesis of graphene on SiO<sub>2</sub> and h-BN by microwave plasma enhanced chemical vapor deposition for field-effect transistor and photodiode applications

Šarūnas Meškinis, Andrius Vasiliauskas, Asta Guobienė, Šarūnas Jankauskas, Mindaugas Andrulevičius, Rimantas Gudaitis

Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, Baršausko 59, LT-51423 Kaunas  
[sarunas.meskinis@ktu.lt](mailto:sarunas.meskinis@ktu.lt) (elektroninis paštas susirašinėjimui)

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

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

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

Šiame darbe grafeno sluoksniai buvo tiesiogiai sintezuoti ant Si(100) plokštelių, SiO<sub>2</sub> plėvelių, terminio oksidavimo būdu užaugintų ant Si(100) pagrindų ir heksagoninio boro nitrido (h-BN) plėvelių užaugintų ant silicio didelės galios impulsinio magnetroninio dulkavimo būdu. Grafeno sintezei naudotas mikrobange plazma aktyvuotas cheminis nusodinimo iš garų fazės.

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

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

Ištyrus įvairiom sąlygom užauginto grafeno lauko tranzistorius su SiO<sub>2</sub> užtūros dielektriku nustatyta, kad krūvininkų judris grafene didėjo didėjant auginimo trukmei, sintezės temperatūrai ir plazmos galiai. Parodyta, kad didžiausią įtaką krūvininkų judriui grafene

turėjo grafeno sąveika su pagrindu ir savaiminio legiravimo procesai. Tuo tarpu aiškios defektų tankio ir tipo įtakos krūvininkų judriui nenustatyta. Ištyrus heksagoninio boro nitrido įtaką grafeno struktūrai ir prietaisų elektrinėms bei fotoelektrinėms charakteristikoms parodyta, kad h-BN pasluoksnis padidino grafeno sluoksnių šiurkštumą. Tačiau kartu šis pasluoksnis susilpnino grafeno savaiminio legiravimo efektą, gerokai padidindamas grafeno/Si(100) fotodiodų fotosrovę, atviros grandinės įtampą ir trumpojo jungimo srovę.

Apibendrinant, ištyrus tiesiogiai sintezuoto grafeno struktūrą ir grafeno lauko tranzistorių bei fotodiodų charakteristikas nustatyta, kad krūvininkų judriui grafene ir grafeno/Si fotodiodų fotoelektrinėms bei fotovoltinėms charakteristikoms lemiamą įtaką turi grafeno savaiminis legiravimas, o ne defektų tankis grafene arba jų tipas.

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

### Literatūra

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

## Terminis lazeriu indikuotas nanodalelių generavimas iš plonų titano-aukso dangų

### Thermal laser-induced generation of nanoparticles from thin titanium-gold films

Vita Petrikaitė<sup>1</sup>, Evaldas Stankevičius<sup>1</sup>

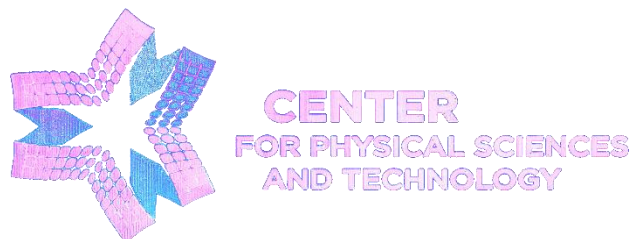
<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

[vita.petrikaite@ftmc.lt](mailto:vita.petrikaite@ftmc.lt)

Įprasti sintetiniai dažai pasižymi plačiu spalvų spektru, tačiau dažnai kelia ekologinę grėsmę dėl toksiškų ir biologiškai neskaidomų medžiagų išsiskyrimo [1]. Plazmoninės nanostruktūros, ypač auksinės nanodalelės, siūlo tvarią alternatyvą dėl unikalių optinių savybių. Keičiant metalo nanodalelių dydį, formą ir sudėtį, galima reguliuoti jų šviesos sugerties ir sklaidos savybes, kad būtų sukurtos specifinės spalvos. Skirtingai nuo įprastinių struktūrinių spalvų, kurios priklauso nuo nanostruktūrų periodiškumo, lemiančio matomą spalvą [2], plazmoninės spalvos sukuriamos dėl lokalizuotų rezonansų atskirose nanostruktūrose. Plazmonika grindžiama koherentiniais laidumo juostos elektronų virpesiais nanodalelėse, vadinamaisiais plazmonais [3]. Lokalizuoti paviršiaus plazmonų rezonansai (LPPR) apibūdina šviesos ir metalo nanodalelių sąveiką, apimančią krūvio tankio svyravimus nanodalelių paviršiuje [4]. Ryškios plazmoninių nanodalelių spalvos skiriasi nuo tūrinių medžiagų atspalvių. Tačiau terminiškai generuojamos nanodalelės lazeriu iš plonos aukso dangos pasižymi ribotu spalvų diapazonu dėl morfologinių apribojimų [5]. Šiame darbe siekta išplėsti plazmoninių spalvų spektrą įterpiant adhezinį titano (Ti) pasluoksnį tarp stiklo padėklo ir aukso dangos. Šis sluoksnis skirtas pagerinti tiek aukso plamonių spalvų įvairovę, tiek dangos stabilumo savybes [6].

Eksperimentai atlikti nanodaleles generuojant iš plonų dangų (Au 8 nm; Ti 2 nm + Au 8 nm; Ti 4 nm + Au 8 nm; Ti 6 nm + Au 8 nm; Ti 10 nm + Au 10 nm; Au 8 nm + Ti 6 nm) jas terminiškai kaitinant nanosekundiniu impulsiniu lazeriu, veikiančiu 532 nm bangos ilgio diapazone. Sisteminė analizė buvo atlikta keičiant impulso energiją (3,5 μJ – 38,5 μJ), skenavimo greitį (1 mm/s – 500 mm/s), pasikartojimo dažnį (0,5 kHz–100 kHz) ir linijų tarpą (25 μm – 75 μm), siekiant optimizuoti lazerio parametrus plazmoninių spalvų formavimui. Nustatyta, kad dangos su adheziniu Ti pasluoksniu pasižymėjo intensyvesnėmis lokalizuoto paviršiaus plazmonų rezonanso (LPPR) smailėmis. Sluoksnių konfigūracija Ti 10 nm + Au 10 nm pasižymėjo plačiausiu spalvų spektru, su maksimaliu spalvų skirtumo parametru  $\Delta E=36,83$ , ir aukštomis ekstinkcijos vertėmis, net esant mažai impulsų energijai. Nustatyta, kad didinant Ti pasluoksnio storį, vyksta raudonasis poslinkis ilgesnių bangų link ir mažėja reikalinga impulso energija spalvai gauti. Šie rezultatai patvirtina, kad nanodalelės generuotos iš plonų Ti/Au dangų naudojant lazerinį terminį kaitinimą yra perspektyvus metodas plazmoninėms spalvinėms savybėms gauti be litografijos, kurios pritaikomos

didelės raiškos spausdinimui, apsaugai nuo klastojimo, fotoninių komponentų ir ekologiškų optinio spausdinimo technologijų taikyme.



1 pav. Optinės mikroskopijos nuotrauka, kurioje matomas šio tyrimo metu sugeneruotas Fizinių ir technologijos mokslų centro logotipas.

*Reikšminiai žodžiai: nanodalelės, plazmonika, lazeris, auksas, plazmoninės spalvos, LPPR, lokalizuotas paviršiaus plazmonų rezonansas.*

#### Literatūra

- [1] J. Lin, W. Ye, M. Xie, D.H. Seo, J. Luo, Y. Wan, B. Van der Bruggen, Environmental impacts and remediation of dye-containing wastewater, *Nature Reviews Earth & Environment* 4 (2023) 785-803.
- [2] Q. Chen, D.R. Cumming, Visible light focusing demonstrated by plasmonic lenses based on nano-slits in an aluminum film, *Optics Express* 18 (2010) 14788-14793.
- [3] D. Bohm, D. Pines, A collective description of electron interactions. I. Magnetic interactions, *Physical Review* 82 (1951) 625.
- [4] C.F. Bohren, D.R. Huffman, Absorption and scattering of light by small particles, John Wiley & Sons 2008.
- [5] V. Petrikaitė, G. Niaura, E. Stankevičius, et al. Hybrid gold-silver nanoparticles synthesis on a glass substrate using a nanosecond laser-induced dewetting of thin bimetallic films and their application in SERS. *Opt Laser Technol.*, 168, 109956 (2024).
- [6] R. Liudvinavičius, A. Selskis, E. Stankevičius. Titanium adhesion layer influence on the formation of hybrid lattice plasmon structures via laser-direct writing. *Optics & Laser Technology*, 175, 110807 (2024).

**Žodinė sesija 4A**  
**(Astrofizika, astronomija ir kosmologija)**

## Užgalaktinių atstumų tikslumas ir krizė kosmologijoje

### The accuracy of extragalactic distances and the crisis in cosmology

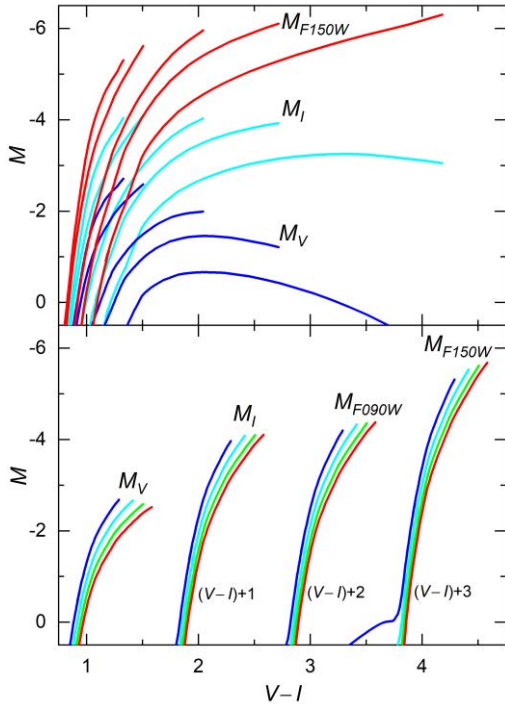
Rima Stonkutė ir Vladas Vansevicius

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio pr. 3, 10257 Vilnius

vladas.vansevicius@ftmc.lt

Pastarąjį dešimtmetį, ypač po observatorijos Planck rezultatų galutinio paskelbimo 2018 m., aktualizavosi poreikis suprasti Lemetro-Hablo konstantos dichotomiją [1], kuri sukėlė krizinę situaciją kosmologijoje.

Perspektyviausias kelias šiai problemai spręsti yra tolesnis atstumų iki galaktikų matavimo tikslumo didinimas. Mes parodėme, kad tiksliausias iš esamų užgalaktinių atstumų nustatymo metodų yra milžinių sekos viršūnės (TRGB) ryškio matavimas (1 pav.) [1].

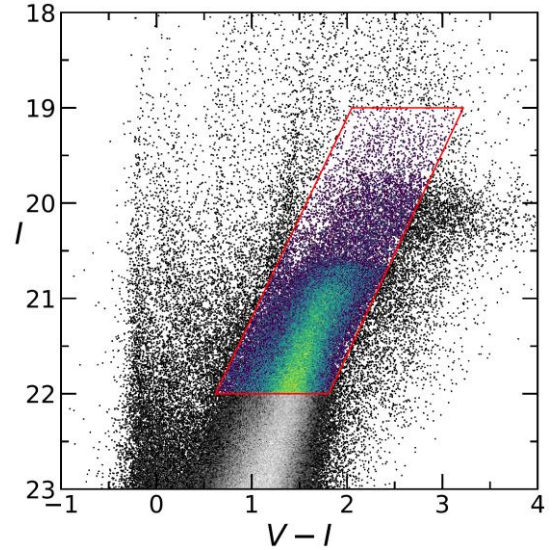


1 pav. TRGB priklausomybės: viršuje 8 Gyr izochronos, kurių metalingumas  $[M/H] = -2.2, -1.5, -0.7, -0.4, 0.0$  (iš kairės į dešinę); apačioje  $[M/H] = -1.5$  izochronos, kurių amžius 2, 4, 8 ir 14 Gyr (iš kairės į dešinę).

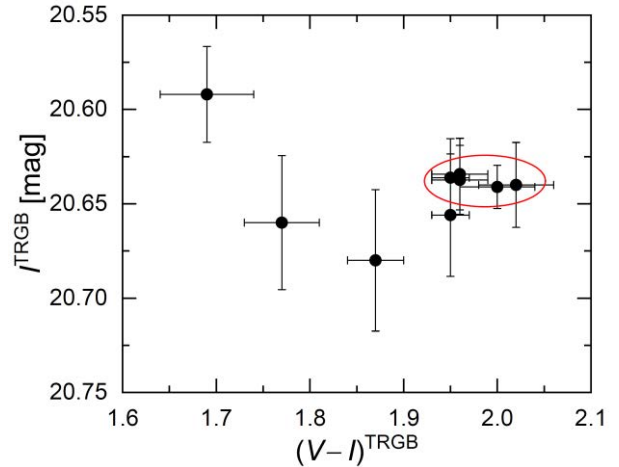
Fotometrinės juostos: Johnson  $V$ , Cousins  $I$ , JWST/NIRCAM  $F090W$  ir  $F150W$  [1].

Tyrimui naudojome galaktikos M33 žvaigždžių  $BVI$  fotometrijos duomenis (2 pav.) [2]. Sukūrėme naują metodą TRGB nustatymui ir ištyrėme TRGB kitimą M33 diske (3 pav.) [3]. Nustatėme M33 atstumą – 842 kpc:  $(I - M_I)_{\text{TRGB}} = 24.626 \pm 0.008$ . Parodėme, kad metodo tikslumas geresnis nei 1 % ir taip galima išmatuoti netgi mažai pasvirusio M33 disko pakraščių atstumų skirtumą.

Mūsų rezultatai, priešingai nei tikėjomės, sustiprino išvadą, kad Visatos plėtimosi greitis, nustatytas pagal kosminės foninės spinduliuotės temperatūros fluktuacijų spektrą, reikšmingai ( $\sim 5\sigma$ ) skiriasi nuo išmatuoto pagal galaktikų judėjimą [1].



2 pav. M33 žvaigždžių (162087), esančių 6-10 kpc atstumu nuo galaktikos centro,  $I, (V - I)$  diagrama [2].



3 pav. M33 TRGB ryškio ( $I$ ) priklausomybė nuo spalvos rodiklio  $(V - I)$ . Galaktikos M33 atstumas nustatytas pagal 5 matavimus elipsės (raudona spalva) viduje [3].

**Reikšminiai žodžiai:** TRGB, galaktika M33, kosmologija.

#### Padėka

Esame dėkingi COST Action 21136 Cosmoverse kolegoms už informatyvias diskusijas. Tyrimui buvo gauta finansinė parama iš Lietuvos mokslo tarybos (sutartis Nr. S-MIP-24-98).

#### Literatūra

- [1] E. Di Valentino, J.L. Said, A. Riess ir kt., *Physics of the Dark Universe* **49**, 101965 (2025).
- [2] R. Stonkutė ir V. Vansevicius, *Astrophysical Journal Supplement Series* **273**, id.22 (2024).
- [3] V. Vansevicius, *Astronomy and Astrophysics* **697**, id.L6 (2025).

# Supermasyvių juodųjų skylių kilmė

## The origin of supermassive black holes

Kastytis Zubovas<sup>1</sup>, Matas Tartėnas<sup>1</sup>

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

[kastytis.zubovas@ftmc.lt](mailto:kastytis.zubovas@ftmc.lt)

Beveik kiekviena galaktika centre turi supermasyvią juodąją skylę. Jų masės varijuoja nuo  $<10^6 M_{\text{Saulės}}$  iki  $>10^{10} M_{\text{Saulės}}$ . Panašių, daugiau nei milijardo Saulės masių, juodųjų skylių randama net ir galaktikose, kurių šviesa mus pasiekia iš mažiau nei milijardo metų amžiaus Visatos (kosmologinis raudonasis poslinkis  $z > 5.5$ ). Kaip jos susiformavo ir kaip sukauptė tokią masę per kelis šimtus milijonų metų? Galutinio atsakymo neturime, tačiau egzistuoja bent kelios hipotezės [1].

Dažniausiai literatūroje minima hipotezė - vadinamasis „masyvių pirmtakų“ modelis, pagal kurį supermasyvių juodųjų skylių pirmtakai buvo  $10^5 - 10^6 M_{\text{Saulės}}$  dujų telkiniai, egzistavę maždaug 100 milijonų metų amžiaus Visatoje ir tiesiogiai kolapsavę į juodąsias skylės. Vėliau jos užaugo iki ~1000 kartų didesnės masės, prisijungdamos supančias dujas. Kita hipotezė teigia, jog juodosios skylės susiformavo iškart po Didžiojo sprogo, tad turėjo daugiau laiko užaugti. Kitos hipotezės teigia, jog juodųjų skylių pirmtakai buvo pirmosios žvaigždės, maždaug 100-180 milijonų metų amžiaus Visatoje sprokusios supernovomis ir palikusios  $10-100 M_{\text{Saulės}}$  juodąsias skylės. Viršribinio augimo modelis teigia, kad juodosios skylės galėjo augti prisijungdamos medžiagą sparčiau už vadinamąją Edingtono ribą, kai spinduliuotės slėgio jėga atsveria juodosios skylės gravitaciją. Galiausiai, chaotinės akrecijos modeliuose viršedingtonis augimas nereikalingas, pakanka tiesiog lėto juodosios skylės sukimosi, dėl kurio sumažėja akrecijos spinduliuotės efektyvumas.

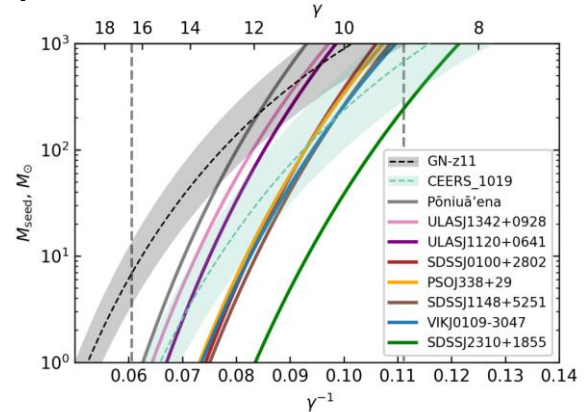
Juodųjų skylių augimą galima aprašyti viena išraiška, susiejanti juodosios skylės masę  $M$  ir laiką po Didžiojo sprogo  $t$  [2]:

$$M(t) = M_0 \exp\left(\frac{t-t_0}{\tau_{\text{Ed}}} \frac{1-\epsilon}{\epsilon} \lambda \delta\right); \quad (1)$$

čia  $M_0$  yra juodosios skylės pirmtako masė,  $t_0$  - susiformavimo laikas,  $\tau_{\text{Ed}} = 454$  mln. m. - Edingtono laiko skalė,  $\epsilon$  - spinduliuotės efektyvumas,  $\lambda$  - vidutinis akrecijos metu pasiekiamas šviesis lyginant su Edingtono šviesiu, o  $\delta$  - laiko dalis, kurią juodoji skylė prisijungia medžiagą. Lygties supaprastinimui apibrėžiamo „augimo efektyvumą“  $\gamma \equiv (1-\epsilon)\epsilon^{-1}\lambda\delta$ . Pav. 1 pavaizduotas ryšys tarp  $M_0$  ir  $\gamma$  (bei jam atvirkštinio dydžio  $\gamma^{-1}$ , kurio vertė esant maksimaliai efektyviam augimui, t.y.  $\lambda = \delta = 1$ , artima  $\epsilon$ ) jaunoje Visatoje aptiktoms supermasyvioms juodosioms skylėms, laikant, kad  $t_0 = 100$  mln. m. Matyti, kad sumažinus spinduliuotės efektyvumą nuo dažnai priimanamos vertės  $\epsilon = 0.1$  ( $\gamma^{-1} \sim 0.11$ ) iki nesisukančiai juodajai skylei būdingo  $\epsilon = 0.057$  ( $\gamma^{-1} \sim 0.061$ ), būtina pirmtako masę daugumai stebimų objektų susiformuoti sumažėja daugiau nei trimis eilėmis.

Kuo ankstyvesnėje Visatoje aptinkama juodoji skylė, tuo griežtesnės masės ribos - tą rodo punktyrinės kreivės, atitinkančios itin ankstyvų juodųjų skylių, aptiktų James Webb teleskopu ties  $z > 8$ , pirmtakų masės ribas. Tačiau negalima atmesti, kad net ir šie objektai galėjo išaugti iš žvaigždinės masės ( $M_0 = 10-100 M_{\text{Saulės}}$ ) pirmtakų.

Pranešime pateiksiu naujausių James Webb atradimų analizę ir parodysiu, kad jie geriau dera su chaotinės arba viršribinės akrecijos modeliais, o ne su masyvių pirmtakų ar pirmųjų skylių juodųjų skylių hipotezėmis. Taip pat parodysiu, kad tokių sparčiai augančių juodųjų skylių kuriamos tėkmės gerai paaiškina vadinamųjų „mažų raudonų taškelį“, randamų ankstyvoje Visatoje [3], savybes.



1 pav. Reikalingos pirmtakų masės iš kurių esant skirtingam efektyvumui gali užaugti stebimos juodosios skylės ankstyvoje Visatoje ( $z > 5.5$ ). Skalė viršuje - augimo efektyvumas, apačioje - atvirkštinis dydis (žr. tekstą). Punktyrinėmis kreivėmis pažymėti du objektai-rekordininkai, atrasti James Webb kosminiu teleskopu.

Vertikalios punktyrinės linijos žymi spinduliuotės efektyvumo rėžį (kairėje - kai juodoji skylė stacionari, dešinėje - naudojant įprastą vertę).

*Reikšminiai žodžiai: juodosios skylės, akrecija, galaktikų evoliucija.*

### Literatūra

- [1] A. Smith, V. Bromm, *Contemp. Phys.* **60**, 111 (2019).
- [2] K. Zubovas, A. King, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **501**, 4289 (2021).
- [3] J. Matthee ir kt., *Astrophys. J.* **963**, 129 (2024).

# M31 disko žvaigždžių spiečių dydžio ir masės funkcijos evoliucija

## Evolution of star cluster size and mass function in the M31 disc

Karolis Daugevičius, Eimantas Kriščiūnas, Erikas Cicėnas, Rima Stonkutė, Vladas Vansevicius  
Fizinis ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius  
[karolis.daugevicius@ftmc.lt](mailto:karolis.daugevicius@ftmc.lt)

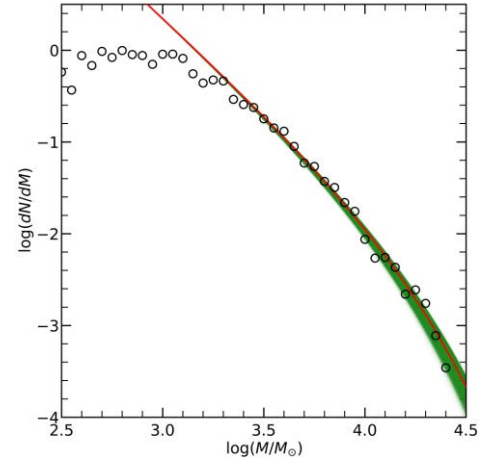
Žvaigždėdara yra vienas iš pagrindinių mechanizmų, lemiančių galaktikų formavimąsi bei evoliuciją. Didžioji dalis žvaigždžių gimsta spiečiuose, kurie dėl evoliucinių ir dinaminių procesų suyra ir sudaro bendrą galaktikos disko žvaigždžių populiaciją. Todėl žvaigždžių spiečių tyrimai padeda geriau suprasti fundamentinius žvaigždėdaros ir galaktikų evoliucijos procesus. Esminės žvaigždžių spiečių populiacijų savybės, įgalinančios apriboti minėtų procesų teorinius modelius, yra spiečių masės funkcijos (CMF) ir spiečių dydžio skirstinio laikinė bei erdvinė evoliucija.

Pasitelkdami Andromedos galaktikos (M31) PHAT apžvalgoje aptiktų spiečių apertūrinės fotometrijos matavimus [1, 2] nustatėme 1922 spiečių amžių, masę, ekstinkciją, struktūrinius parametrus ir parengėme iki šiol didžiausią M31 disko spiečių parametų katalogą. Jį analizuodami ištyrėme M31 CMF bei spiečių dydžio evoliuciją.

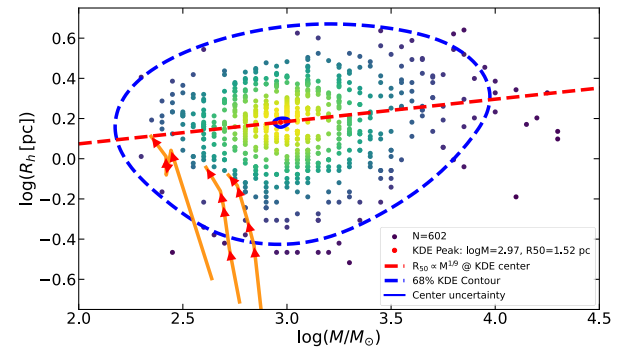
CMF modeliavome plačiai taikoma Schechter tipo funkcija  $dN/dM = A \cdot M^{-2} \cdot \exp(-M/M_C)$ , kur  $A$  yra normavimo konstanta, proporcinga spiečių formavimo spartai;  $M_C$  – CMF posūkio masė. Nustatėme M31 disko CMF  $M_C = (13.3^{+1.3}_{-2.6}) \cdot 10^3 M_\odot$  (1 pav.). Šis įvertis daugiau kaip 1.5 karto didesnis už anksčiau nustatytą,  $M_C = (8.5^{+2.8}_{-1.8}) \cdot 10^3 M_\odot$  [3]. Pranešime aptarsime CMF laipsnio rodiklio ir  $M_C$  parametro laikines bei erdvinės variacijas M31 diske.

Naudodami realistiškus spiečių modelių vaizdus [4], įvertinome kokią įtaką mašininiu mokymu (ML) grįstų spiečių aptikimo algoritmų taikymas turėtų CMF tyrimams artimose galaktikose. Parodėme, kad ML algoritmai M31 atveju aptiktų ~2 kartus mažesnės masės spiečius, nei žmogaus atliekama vizuali paieška. Tai užtikrintų patikimesnius CMF rezultatus mažos spiečių masės srityje, o tai savo ruožtu įgalintų daug tiksliau nustatyti CMF laipsnio rodiklio ir  $M_C$  vertes.

Tirdami M31 spiečių dydžio evoliuciją nustatėme, kad didžioji dalis jų yra kompaktiški (pusės šviesio spindulys  $R_h \sim 1.7$  pc). Nustatėme, jog gravitacinėmis jėgomis susietų spiečių charakteringasis  $R_h$  per pirmuosius 100 mln. m. padidėja daugiau kaip 2 kartus (nuo ~0.7 pc iki ~1.6 pc). Šis spiečių plėtimasis ypač efektyvus per pirmus ~40 mln. m. Taip pat, jaunų spiečių (<100 mln. m.) skirstinys masės-spindulio parametru erdvėje bei  $R_h$  evoliucinė eiga gerai sutampa su hidrodinaminio plius gravitacinio sąveikų modeliavimo [5] rezultatais (2 pav.), nepaisant to, jog [5] darbe yra modeliuojamos skirtingo tipo (nykštukinės, mažo metalingumo) galaktikos. Šie rezultatai indikuoja, kad jaunų spiečių dydžio evoliucijai M31 diske didžiausią įtaką, bent jau per pirmuosius 100 mln. m., turi masyvios trumpai gyvenančios žvaigždės.



1 pav. Diferencialinis spiečių masės skirstinys. Raudona linija – Schechter funkcija,  $M_C = (13.3^{+1.3}_{-2.6}) \cdot 10^3 M_\odot$ ; žalios linijos – 10 000 individualių CMF aproksimacijų taikant atsitiktinės atrankos (angl. *bootstrap*) metodą.



2 pav. Jaunų spiečių (<100 mln. m.) masės-spindulio sąryšis. Oranžinės linijos žymi 3 spiečių modelių evoliuciją [5] nuo 3 iki 100 mln. m. Raudonos rodyklės rodo evoliucijos kryptį ties 10, 20, 40 ir 80 mln. m.

**Reikšminiai žodžiai:** M31 galaktika, žvaigždžių spiečiai.

### Padėka

Šis tyrimas gavo finansinę paramą iš Lietuvos mokslo tarybos (sutartis Nr. S-MIP-24-98).

### Literatūra

- [1] R. Naujalis ir kt., *Astronomy and Astrophysics*, **654**, A6 (2021).
- [2] E. Kriščiūnas ir kt., *Astronomy and Astrophysics*, **677**, A100 (2023).
- [3] L. C. Johnson ir kt., *The Astrophysical Journal*, **839**, 78 (2017).
- [4] K. Daugevičius ir kt., *Astronomy and Astrophysics*, **699**, A290 (2025).
- [5] N. Lahén ir kt., *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **538**, 2129 (2025).

# Automatinis žvaigždžių spiečių aptikimas galaktikų diskuose

## Automated Star Cluster Detection in the Disks of Galaxies

Erikas Cicėnas<sup>1,2</sup>, Karolis Daugevičius<sup>1</sup>, Eimantas Kriščiūnas<sup>1</sup>, Rima Stonkutė<sup>1</sup>, Vladas Vansevičius<sup>1</sup>

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

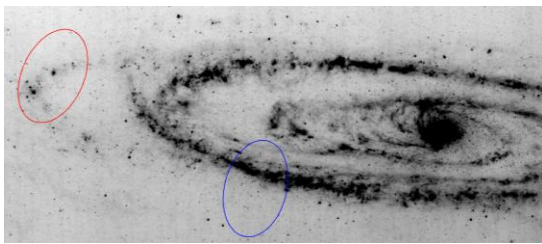
<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius

[erikas.cicenas@ftmc.lt](mailto:erikas.cicenas@ftmc.lt)

Astrofizikoje vienas svarbiausių procesų yra žvaigždėdara, kuri lemia galaktikų, tarpžvaigždinės terpės ir žvaigždžių evoliuciją. Žvaigždžių spiečiai nuo šio proceso neatsiejami, kadangi dauguma žvaigždžių susiformuoja juose [1]. Šiuo metu didžiausia problema yra spiečių galaktikų diskuose identifikavimas plataus lauko apžvalgose; kol kas efektyviausias būdas – pasitelkti savanorius ir/ar ekspertus.

Sprendžiant šią problemą mašininis mokymasis (ML) yra perspektyvus metodas [2]. Jis įgalina pagreitinti procesą, jį atkartoti ir atlikti detalius statistinius tyrimus. Tačiau šiems tyrimams tinkamų stebėtų spiečių skaičius yra labai ribotas.

Mes naudojame 9 milijonų parametrų konvoliucinį neuroninį tinklą (CNN), kurį treniravome naudodami stebėjimų duomenis iš *Panchromatic Hubble Andromeda Treasury* (PHAT) [3] ir daugiau nei 12 mln. mūsų sugeneruotų stochastinių spiečių modelių. Tinklo architektūra yra panaši į ResNet [4]. Klasifikatorius treniruojamas į tikrus PHAT fonus įterpiant sintetinius spiečius. 1 pav. parodytos Andromedos galaktikos zonos, naudotos treniravimui ir testavimui. Treniravimo zona parinkta taip, kad turėtų įvairaus tankio sričių, o testavimo zona (15 kpc žvaigždėdaros žiedas), kad apimtų daug foninių galaktikų. 2 pav. parodyta treniravimo eiga ir pastebime, jog tinklas gerai konverguoja.

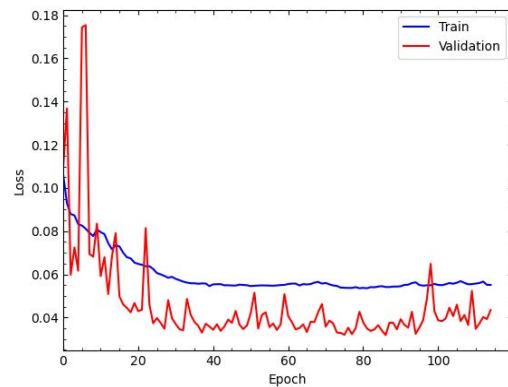


1 pav. 24  $\mu\text{m}$  galaktikos M31 nuotrauka. Mėlynai pažymėta treniravimo sritis, raudonai – testavimo sritis.

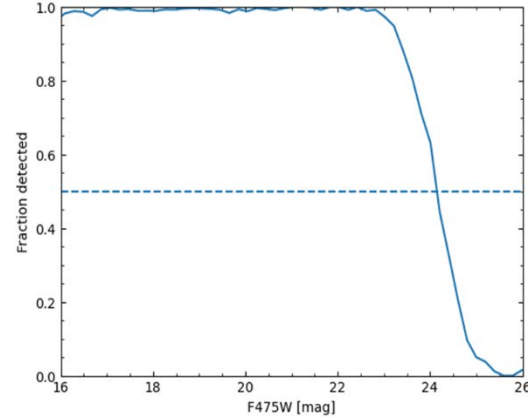
Tinklo efektyvumas buvo patikrintas naudojant dirbtinių spiečių testą ir lyginant su PHAT spiečių katalogu [5]. 3 pav. matome, kad tinklas itin gerai aptinka spiečius; ribinis ryškis yra apie 2 mag gilesnis nei [5]. Iš testavimo srityje esančių 196 spiečių mūsų tinklas atranda 193 (98,5%), taip pat papildomai aptinka 59 dar neatrastus spiečius.

Šiuo metu sprendžiame perteklinio aptikimo problemą – tinklas atranda  $\sim 4\text{x}$  daugiau objektų nei yra tikėtinų spiečių, todėl dar reikalinga papildoma interaktyvi

atranka. Taip pat tinklą dar reikia tobulinti mažinant jautrumą fono lygio tikslumui.



2 pav. Treniravimo (Train) ir testavimo (Validation) imčių nuostolių funkcijų (Loss) priklausomybė nuo epochos. Testavimui naudota 23-ia epocha.



3 pav. Atrastų sintetinių spiečių dalies priklausomybė nuo ryškio. Ribinis ryškis  $F475W \sim 24$  mag.

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

### Padėka

Tyrimą rėmė Lietuvos mokslo taryba, sutartis Nr. S-MIP-24-98.

### Literatūra

- [1] Lada, C., Lada, E. 2003, ARA&A, 41, 57
- [2] Zhang, B. et al. 2025, ApJS, 278, 16
- [3] Dalcanton, J. J. et al. 2012, ApJS, 200, 18
- [4] He, K. et al. 2015, arXiv:1512.03385
- [5] Johnson, L.C. et al. 2015, ApJ, 802, 127

**Žodinė sesija 4B**  
**(Nanomokslas ir nanotechnologijos)**

# Mašininio mokymo taikymai plazmoninių nanodalelių ekstinkcijos spektrų interpretavimui

## Applications of Machine Learning for Interpreting the Extinction Spectra of Plasmonic Nanoparticles

Tomas Klinavičius<sup>1</sup>, Asta Tamulevičienė<sup>1,2</sup>, Tomas 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, Fizikos katedra, Studentų g. 50, LT-51368, Kaunas  
tomas.tamulevicius@ktu.lt

Plazmoninės nanomedžiagos, kurios pasižymi unikaliomis, nuo dielektrinės funkcijos bei linijinių matmenų priklausomomis, rezonansinėmis savybėmis, turi daugybę taikymų fotonikoje, katalizėje, jutikliuose, biomedicinoje bei daugelyje kitų sričių [1]. Tauriųjų metalų nanostruktūras galima formuoti naudojant raiškias litografijos priemones tačiau nors šie metodai pasižymi dideliu tikslumu, tačiau taip suformuoti nanodariniai dėl polikristališkumo bei kraštų šiurkštumo nebūtinai yra geros optinės kokybės. Lazerinė bei cheminė koloidų sintezės yra plačiai taikomi alternatyvūs nanodarinių formavimo metodai. Pagrindiniai cheminės sintezės privalumai - galima išgauti pakankamai monodispersinius, monokristalinius, bei daug sudėtingesnės geometrijos nanodarius, įskaitant anizotropines trimates nanostruktūras, kurių sintezė kitais būdais tiesiog nėra įmanoma [2].

Nors nanodarinių koloidai turi ir tiesioginių taikymų, tačiau dažniau jie yra nusodinami ant paviršiaus siekiant kuo efektyviau panaudoti jų rezonansines savybes. Pavyzdžiui, naudojant kapiliarinį nusodinimą į iš anksto suprojektuotus šablonus su periodinėmis kliūtimis, galima efektyviai susiaurinti paviršiaus plazmonų rezonansą. Tokios periodinės dvimatės nanostruktūros, dar vadinamos metapaviršiais bei pasižyminčios paviršiaus gardelės rezonansu, yra naudojamos, nanolazeriams, paviršiuje stiprinamos Ramano sklaidos jutikliams bei katalizei [3,4].

Visų šių taikymų pagrindinis elementas yra žinomo dydžio bei formos koloidinės nanodalelės, kurių matmenis galima kryptingai keisti sintezės metu. Dažniausiai koloidų kokybė yra kokybiškai vertinama atliekant ekstinkcijos matavimus UV-Vis-NIR diapazone bei lygiagrečiai kiekybiškai vertinama pasitelkiant raiškias elektroninės mikroskopijos vaizdinimo galimybes. Norint mikroskopiškai įvertinti nanodarinių dydžių skirstinius reikia atitinkamo bandinio paruošimo bei, siekiant užtikrinti patikimą statistiką, daugybės mikroskopinių matavimų atlikimo. Tuo tarpu, nors ekstinkcijos matavimai suteikia tik kokybinę informaciją, jie yra daug paprastesni ir prieinamesni.

Elektromagnetinių bangų sugertis ir sklaida sferinėse dalelėse yra gana tiksliai matematiškai aprašoma žinant dalelių matmenis bei jų dielektrinę konstantą, tačiau net ir monodispersiniais laikomi koloidiniai tirpalai pasižymi tam tikra vidutinio dydžio sklaida. Pastaruoju metu vis plačiau taikant mašininio mokymo sprendimus jie buvo pradėti taikyti ir optinės ekstinkcijos spektrų interpretavimui. Turint pakankamą kiekį eksperimentinių

duomenų, arba dar palankiau, pasitelkiant skaitinį modeliavimą skaitiškai sugeneravus treniravimo duomenis bei jais apmokius giliuosius neuroninius tinklus, tapo įmanoma gana tiksliai nustatyti realių eksperimentinių koloidinių mėginių nanodarinių matmenis bei jų dydžių skirstinius [5].

Šiame darbe, naudojant sidabro bei aukso nanodalelių cheminę sintezę iš užuomazgų, buvo susintetinti skirtingo vidutinio dydžio bei skirtingo poldispersiškumo koloidiniai tirpalai. Jų optinės ekstinkcijos spektrai bei skenuojančios elektronų mikroskopijos matavimai buvo naudojami kaip vertinimo duomenys giliojo mokymo neuroninių tinklų pateikiamiems rezultatams. Generuojant treniravimo duomenis giliojo mokymo neuroniniams tinklams buvo išbandyta daugelis literatūroje aprašytų dielektrinės funkcijos dispersijų ir buvo nustatyta, kad geriausio atitikimo galima tikėtis, kai jų kokybės koeficientai ir kristalitų dydžiai yra artimi tiriamiems koloidams. Giliojo mokymo neuroninių tinklų spėjamų vidutinių dydžių rezultatų tikslumas siekė 1% vidutinį kvadratinį nuokrypį, o atsakymai, naudojant standartinį stalinį kompiuterį, buvo generuojami per 11 ms.

*Reikšminiai žodžiai: nanodalelės, auksas, sidabras, ekstinkcijos spektras, mašininis mokymas, dydžių skirstinys, dielektrinė funkcija.*

### Literatūra

- [1] K. M. Mayer, J. H. Hafner, Chem. Rev. 111 (6) 3828–3857 (2011)
- [2] G. A. Vinnacombe-Willson, Y. Conti, A. Stefancu, P. S. Weiss, E. Cortés, L. Scarabelli. Chem. Rev. 123 (13) 8488–8529 (2023)
- [3] N. Khinevich, M. Juodėnas, A. Tamulevičienė, T. Tamulevičius, M. Talaikis, G. Niaura, S. Tamulevičius. Sens. Actuators B: Chem. 394, 134418 (2023)
- [4] M. Juodėnas, N. Khinevich, G. Klyvis, J. Henzie, T. Tamulevičius, S. Tamulevičius. Nanoscale Horiz. 10, 142–149 (2025)
- [5] T. Klinavičius, T. Klinavičius, N. Khinevich, A. Tamulevičienė, L. Vidal, S. Tamulevičius, T. Tamulevičius. J. Phys. Chem. C 128 (23) 9662–9675 (2024)

# Spyglių geometrijos įtaka linijinėms ir nelinejinėms optinėms auksinių nanoežių savybėms

## Spike geometry-dependent linear and nonlinear optical properties of gold nanourchins

Domantas Peckus<sup>1,2</sup>, Fatima Albatoul Kasabji<sup>3,4</sup>, Maziar Moussavi<sup>1</sup>, Loic Vidal<sup>3,4</sup>, Hana Boubaker<sup>3,4</sup>, Asta Tamulevičienė<sup>1,2</sup>, Arnaud Spangenberg<sup>3,4</sup>, Tomas Tamulevičius<sup>1,2</sup>, Joel Henzie<sup>5</sup>, Karine Mougin<sup>3,4</sup>, Sigitas Tamulevičius<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Materials Science of Kaunas University of Technology, K. Baršausko st. 59, LT-51423, Kaunas, Lithuania

<sup>2</sup>Department of Physics, Kaunas University of Technology, Studentų st. 50, LT-51368, Kaunas, Lithuania

<sup>3</sup>Institut de Science des Matériaux de Mulhouse IS2M UMR 7361, 15 rue Jean Starcky, F 68100 Mulhouse, France

<sup>4</sup>Université de Strasbourg, 4 Rue Blaise Pascal, CS 90032, F-67081 Strasbourg, France

<sup>5</sup>International Center for Materials Nanoarchitectonics (WPI-MANA), National Institute for Materials Science (NIMS), Tsukuba, Ibaraki 305-0044, Japan  
[domantas.peckus@ktu.lt](mailto:domantas.peckus@ktu.lt)

Nanostructures exhibiting localized surface plasmon resonance (LSPR) possess optical properties that are highly sensitive to their size and shape. Such nanostructures are widely applied in photocatalysis, nonlinear optics, surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS), fluorescence enhancement, sensing, photovoltaics, biosensing, and biomedicine [1,2]. Selecting the most suitable plasmonic material for a given application requires careful consideration of the metal type, size, geometry, and crystallinity. Among plasmonic metals, gold (Au) and silver (Ag) are the most commonly used due to their strong and tunable optical responses.

Gold nanostructures can be synthesized in both symmetrical forms (spheres, cubes, tetrahedra, nanorods) and non-symmetrical morphologies (nanourchins, nanostars, nanoflowers). While these non-symmetrical nanostructures share the common feature of a central core decorated with protrusions, their distinct geometries lead to markedly different optical behaviors. Gold nanourchins (Au NUs) feature a spherical core densely covered with short, irregular spikes of varying length and thickness, whereas nanostars exhibit a core with long, sharp, and well-defined tips, and nanoflowers are characterized by petal-like surface features [1,2].

In this work, we investigated the linear and nonlinear optical properties of Au NUs with core sizes of 50–80 nm and spike lengths ranging from 6–15 nm, and compared them to spherical Au nanoparticles of similar size. Steady-state absorption, transient absorption spectroscopy (TAS), transmission electron microscopy (TEM), SERS, and electromagnetic (EM) simulations were employed to examine the role of spikes in governing the plasmonic response. By combining experimental and modeling approaches, we established how spike geometry modifies the EM properties of Au NUs and constructed a plasmon hybridization scheme for NUs with an 80 nm core and 20 nm spikes (80|20), as illustrated in Figure 1.

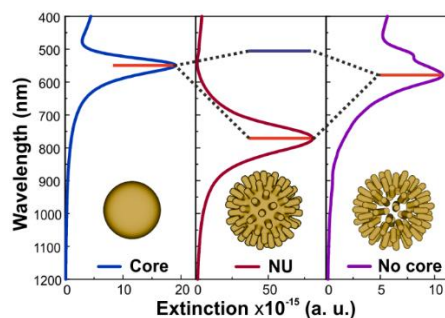


Figure 1. Plasmon hybridization scheme of an 80|20 NU sample, with a schematic energy-level diagram showing hybridization between the spherical core and uniformly distributed spike plasmons [2].

Our results demonstrate that the plasmonic and optical properties of Au NUs are strongly governed by spike geometry. The linear and nonlinear plasmonic properties of spheres and Au NUs with short spikes (7 nm) are quite similar. While significant spectral shifts and field enhancements are observed once the spike length exceeds 10 nm and the aspect ratio surpasses 1.5 (Au NUs long (>10 nm) spikes). These findings highlight the importance of spike engineering for practical applications in photocatalysis, sensing, and SERS.

The studies were performed within the NANOTRAACES project carried out under the M-ERA.NET 2 scheme, MERANET-22-2 and co-funded by the Research Council of Lithuania.

**Keywords:** TAS, Au nanourchins, spikes of Au nanourchins, EM modeling, SERS.

### References:

- [1] D. Issaad et al. J. Phys. Chem. C **121**, 18254–18262 (2017).
- [2] D. Peckus et al. <https://arxiv.org/abs/2507.03161>.

# Struktūros ir elektrinių savybių priklausomybė nuo augimo temperatūros PVD telūro nanostorio sluoksniuose

## Dependence of Structure and Electrical Properties on Growth Temperature in PVD Tellurium nano-thin Films

Virginijus Bukauskas<sup>1</sup>, Viktorija Strazdienė<sup>1</sup>, Tomas Daugalas<sup>1</sup>, Vladimir Astachov<sup>1</sup>, Graham J Hickman<sup>2</sup>, Dominic Craske<sup>2</sup>, Sandra Stanionytė<sup>1</sup>, Vidas Pakštas<sup>1</sup>, Martynas Talaikis<sup>1</sup>, Arūnas Šetkus<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Nottingham Trent University, Nottingham NG11 8NS, Jungtinė Karalystė  
[virginijus.bukauskas@ftmc.lt](mailto:virginijus.bukauskas@ftmc.lt)

Nanomatmenų medžiagos kelia didelį susidomėjimą, nes jos gali būti pritaikytos naujos kartos prietaisuose, tokiuose kaip lauko tranzistoriai, infraraudonųjų spindulių jutikliai ar naujo tipo atminties elementai. Viena iš medžiagų, pastaruoju metu sulaukusi susidomėjimo yra telūras (Te), kurio nano-atmaina telūrenas, skirtingai negu grafenas, yra sunkiai išgaunami mechaniniu kristalų plėšymo būdu [1]. Siekiant tirti telūreno savybes bei panaudoti praktikoje, būtina telūro sluoksnius auginti kontroliuojamomis sąlygomis. Augimo kontrolė yra pagrindinis veiksnys, lemiantis atomų išsidėstymą bei elektrines (optines) sluoksnių savybes. Šios savybės stipriai priklauso nuo sluoksnių auginimo sąlygų, o vienas svarbiausių parametru yra padėklo temperatūra.

Nepaisant augančio susidomėjimo plonais telūro sluoksniais, iki šiol nėra iki galo suprata padėklo kaitinimo įtaka, ypač temperatūrų intervale iki 326 K. Ant santykinai šaltų padėklų užaugintuose sluoksniuose sudėtinga kontroliuoti adsorbcijos, desorbcijos ir atomų migracijos procesus, lemiančius sluoksnių morfologiją ir kristališkumą. Šių procesų įtaka ypač ryški itin plonuose sluoksniuose (7–10 nm), kurie dažnai būna neištiesiniai, todėl tampa sudėtinga tirti jų elektrines bei struktūrines savybes.

Šiame darbe buvo pasirinkta tirti kiek storesnius, apie 20 nm storio telūro sluoksnius. Tokie sluoksniai vis dar pasižymi nanometrinių sluoksnių savybėmis, tačiau juos galima tirti naudojant Rentgeno spindulių difrakciją (XRD), Ramano spektroskopiją bei elektrinių savybių matavimo metodus. Tyrimu siekta nustatyti, kaip padėklo temperatūra veikia telūro sluoksnių struktūrą, atomų išsidėstymą ir elektrines savybes vakuuminio terminio garinimo metu.

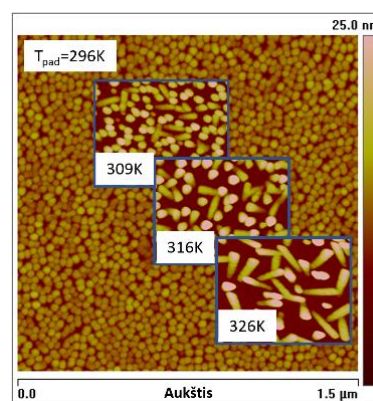
Tyrimuose buvo naudojami terminio garinimo būdu iš kristalinio telūro užauginti sluoksniai ant komercinių Si/SiO<sub>2</sub> padėklų. Auginimo metu padėklo temperatūra buvo stabilizuojama  $\pm 2$  K tikslumu. Buvo užaugintos kelios sluoksnių serijos esant skirtingoms padėklo temperatūroms nuo 296 K iki 326 K. Vidutinis sluoksnių storis siekė 20 nm.

Sluoksnių morfologija, storis ir elektrinės savybės buvo tirtos skenuojančio zondo mikroskopu Dimension 3100 (Veeco). Telūro sluoksnių struktūra analizuota naudojant Ramano spektroskopiją (InVia, Renishaw, 532

nm lazerio žadinimas), peršviečiamąjį elektronų mikroskopiją (TEM, Electron Microscopy Sciences) bei šliaužiančio kampo rentgeno spindulių difrakciją (XRD, SmartLab, Rigaku).

Nustatyta, kad Te sluoksnių morfologija ženkliai priklauso nuo padėklo (1 pav.). XRD rezultatai parodė, kad visose tirtose padėklo temperatūrose susiformuoja sluoksniai, pasižymintys kristaliniam telūrai būdingomis difrakcinėmis smailėmis, tačiau jų intensyvumas individualus, kas leidžia spėti apie dominuojančią kristalitų orientaciją paviršiuje. TEM tyrimai patvirtino, jog telūro atomų spiralės formuojasi skersai sluoksnio augimo krypties.

Elektrinių charakteristikų tyrimai skenuojančiojo zondo mikroskopu leido nustatyti priklausomybę tarp padėklo temperatūros nulemtos telūro sluoksnių struktūros ir susiformuojančių elektrinio laidumo kanalų.



1 pav. Telūro sluoksnių, užaugintų esant skirtingai padėklo temperatūrai, morfologija

*Reikšminiai žodžiai: ultraploni telūro sluoksniai, telūrenas, lokalios elektrinės savybės, augimo temperatūra, terminis garinimas vakuumė.*

### Literatūra

[1] X. Huang, R. Xiong, C. Hao, W. Li, B. Sa, J. Wiebe, R. Wiesendange  
Adv. Mater. **36**, 2309023 (2024).

# Paviršiumi sustiprintos Ramano spektroskopijos platforma, pasižyminti kintama periodinių aukso nanodarinių morfologija

## Surface-enhanced Raman spectroscopy platform featuring variable morphology of periodic gold nanostructures

Kernius Vilkevičius<sup>1</sup>, Ilja Ignatjev<sup>2</sup>, Gediminas Niaura<sup>2</sup>, Evaldas Stankevičius<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Organinės chemijos skyrius, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

[kernius.vilkevicius@ftmc.lt](mailto:kernius.vilkevicius@ftmc.lt)

Plazmoninės aukso bei sidabro struktūros pasižymi plazmonų rezonansu, pasireiškiančiu lokalizuoto elektromagnetinio lauko stiprinimu bei spinduliuotės sugertimi. Pagrindinės pastarųjų efektų pritaikymo sritys yra plazmoninis jutimas bei paviršiumi sustiprinta Ramano spektroskopija (SERS) [1]. Periodinis struktūrų išdėstymas lemia plazmoninių modų hibridizaciją bei stipresnius plazmoninius reiškinius, lemiančius didesnę tokio stiliaus plazmoninių platformų jautrumą.

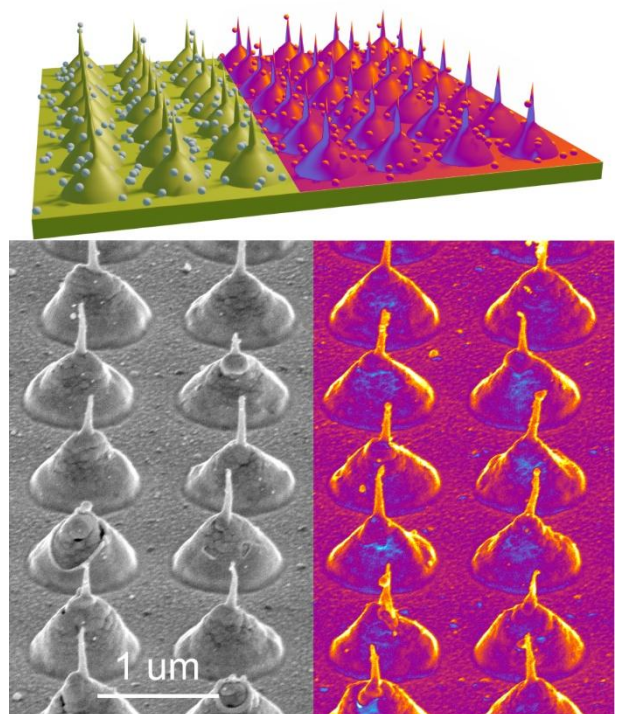
Metallų struktūrizavimas lazerinio rašymo metodu įgalina greitą laisvos formos periodinių vienmačių bei dvimačių gardelių gamybą, tinkamą pritaikyti ir didelių plotų struktūrizavimui [2]. Apdirbimo metu metalas lokaliai išsilydomas ir, priklausomai nuo impulso energijos, suformuojamos skirtingos morfologijos struktūros. Gumbelių, nanokūgių bei nanoantenų forma itin priklauso nuo naudojamo bangos ilgio, metalo storio, gardelės periodo, tad tikslus šių parametrų valdymas lemia precizišką struktūrų morfologijos kontrolę [3].

Šiuo tyrimu pristatomas tiesioginio lazerinio rašymo metodu suformuotų 2D aukso nanodarinių gardelių pritaikymas ir savybių kontrolė SERS srityje [4]. Plonose aukso dangose (50-200 nm) struktūros buvo formuojamos naudojant 343 nm bangos ilgį, lazerio pluoštą aštriai sufokusavus į ~800 nm diametro dėmę. Panaudojant lazerinį skenavimą, buvo vykdomas dvimačių gardelių formavimas ties pastovia impulso energija. Naudojant skenuojantį elektroninį mikroskopą, buvo atliekamas suformuotų darinių morfologinis charakterizavimas.

Ant suformuotų aukso struktūrų (1 pav.) buvo padengiamas 4-merkaptobenzoinės rūgšties (4-MBA) molekulių monosluosknis, kuris naudotas kaip Ramano atsako žymuo. Matavimai buvo atliekami naudojant 785 nm žadinimo bangos ilgį, o 4-MBA charakteringos juostos stebimos ties  $1074\text{ cm}^{-1}$  bei  $1589\text{ cm}^{-1}$ . Lyginant skirtingos morfologijos darinius, nustatyta optimali forma didžiausiam Ramano signalo stiprinimui. Dėl karštųjų taškų, struktūros, pasižyminčios aštriais bei smailiais kraštais, suteikia didesnę atsaką. Įvertinus darinių šiurkštumą bei atsikartojamumą, buvo įvertintas stiprinimo faktorius, viršijantis  $10^7$ , bei stiprinimo atsikartojimas nuo kiekvienos struktūros.

Nustatytos optimalios morfologijos dariniai buvo suformuoti skirtingo storio metalo dangose, siekiant įvertinti sluoksnio įtaką bei galimybę dar tiksliau valdyti SERS atsaką ir padidinti stiprinimo faktorių. Rezultatų paaiškinimui, buvo atliktos teorinės lokalaus

elektromagnetinio lauko stiprinimo simuliacijos, siekiant įvertinti karštųjų taškų išsidėstymą bei kokybę. Suformuoti dariniai pasiekia  $10^7$  stiprinimo faktorių, o tai atveria galimybes šių struktūrų pritaikymui vienmolekulinei detekcijai.



1 pav. Periodinės aukso nanoantenos SERS matavimams.

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

*Reikšminiai žodžiai: plazmoniniai nanodariniai, tiesioginis lazerinis rašymas, paviršiumi sustiprinta Ramano spektroskopija (SERS).*

### Literatūra

- [1] Z.Y. Li, Adv. Opt. Mater, 6, 1701097 (2018).
- [2] E. Stankevičius, K. Vilkevičius, M. Gedvilas, E. Bužavaitė-Vertelienė, A. Selskis, Z. Balevičius, Adv. Opt. Mater. 9(12), 2100027 (2021).
- [3] K. Vilkevičius, G.D. Tsididis, A. Selskis, E. Stratakis, E. Stankevičius, Adv. Opt. Mater. 12 (20), 2400172 (2024).
- [4] K. Vilkevičius, I. Ignatjev, A. Selskis, G. Niaura, E. Stankevičius, Appl. Surf. Sci. 660, 160003 (2024).

# Paviršiniai plazmonų rezonansai aukso ir sidabro mikrogumbelių gardelėse, suformuotuose plonose metalo dangose naudojant tiesioginį lazerinį rašymą.

## Surface plasmon resonances in silver and gold bumps arrays fabricated in thin metallic films using direct laser writing

Rodrigas Liudvinavičius<sup>1</sup>, Evaldas Stankevičius<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių Technologijų skyrius, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius  
[rodrigas.liudvinavicius@ftmc.lt](mailto:rodrigas.liudvinavicius@ftmc.lt)

Pastaraisiais metais plazmonikos sritis sulaukė vis didesnio dėmesio dėl sėkmingo nanostruktūrų pritaikymo biologinių jutiklių gamyboje, plazmoninio lazeriavimo srityje (harmonikų generavime), paviršiaus sustiprintoje Ramano sklaidoje, apsaugos nuo klastojimo žymėjime bei kitų naujų optinių prietaisų kūrime. Toks susidomėjimas kyla dėl ypatingo reiškinio – plazmonų rezonanso, kuris atsiranda kaip kolektyviniai plazmonų svyravimai, sužadinti kritusia elektromagnetine spinduliuote. Šio reiškinio dėka pasiekiamas stiprus elektromagnetinio lauko lokalizavimas nanomasteliu, kuris yra esminis įvairių plazmoninių įrenginių veikimui.

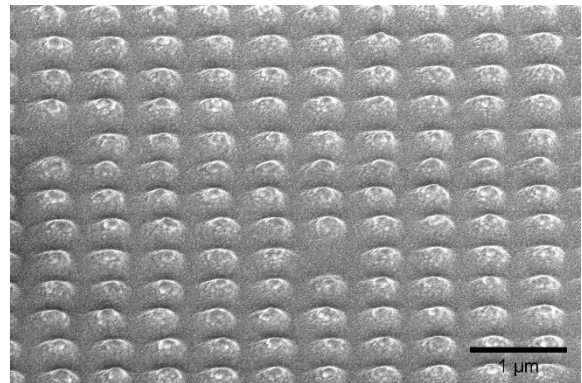
Tai pat, tokį reikšmingą susidomėjimo šuolį lėmė lazerinės gamybos metodų pažanga, ypač tiesioginis lazerinis rašymas (TLR). Naujausi technologiniai sprendimai leidžia kurti plazmoninius darinius, kurių matmenys yra mažesni nei 1  $\mu\text{m}$ , tiesiai ant metalo dangos. Tai tapo efektyvia alternatyva įprastiems litografiniams metodams, kurie formuojant tokio mastelio struktūras reikalauja didesnių išlaidų ir ilgo paruošiamojo proceso.

Naudojant TLR, formuojant metalo mikrostruktūras periodiškai, galima tiesiogiai ant paviršiaus pasiekti plazmonų rezonansą. Šis metodas ne tik yra lankstesnis, leidžiantis gamybos metu keisti darinių parametrus, bet ir efektyvesnis, nes gali sužadinti hibridinius plazmonų modusus, tai yra, kelias plazmonų modas vienu metu. Dėl to gaunami siauresni ir gilesni rezonansai, kurie geriau pritaikomi praktiniams naudojimams ir naujų taikymo galimybių paieškai.

Tradiciškai paviršinis plazmonų rezonansas buvo gaunamas pasitelkiant difrakcijos metodą su Kretschmann konfigūracija, naudojant prizmę impulsui suderinti tarp krintančios šviesos ir paviršinių plazmonų. TLR metodika leidžia šį efektą pasiekti tiesiogiai ant paviršiaus, be papildomų optinių komponentų, ir suteikia galimybę formuoti periodines gardeles, skirtas tiksliai plazmonų žadinimo kontrolei.

Šiame darbe bus nagrinėjama periodinių mikrogumbelių gardelė, sužadinanti paviršinį plazmonų rezonansą aukso ir sidabro paviršiuose. Bus pristatyti TLR metodo privalumai lyginant su įprastais litografiniais metodais, aptarti TLR technologijos pasiekimai, kokiais mažiausias struktūras gali formuoti ir kas riboja jų dydį. Taip pat bus nagrinėjamos skirtingų tauriųjų metalų panaudojimo galimybės, rizikos ir praktiniai aspektai. Galiausiai bus pateiktas aukso ir sidabro mikrogumbelių gardelių tiesioginis palyginimas, kuomet gardelių periodas yra vienodas, bei analizuojami

jų plazmonų žadinimo ypatumai, tai yra, nuo ko jie priklauso ir kokias vertes galima pasiekti.



1 pav. Sidabro mikrogumbelių gardelės SEM mikrografija. Mikrogumbeliai buvo formuojami naudojant 1 nJ impulso energiją, išlaikant 550 nm periodiškumą tarp struktūrų.

*Reikšminiai žodžiai: tiesioginis lazerinis rašymas, plazmonika, plazmonų rezonansas, auksas, sidabras.*

### Literatūra

- [1] R. Liudvinavičius, K. Vilkevičius, E. Stankevičius, High-quality grating-coupled surface plasmon resonances in silver and gold bumps arrays fabricated in thin metallic films using the third harmonic of femtosecond laser, *Applied Surface Science*, Volume 711, 2025.
- [2] R. Liudvinavičius, A. Selskis, E. Stankevičius, titanium adhesion layer influence on the formation of hybrid lattice plasmon structures via laser-direct writing, *Optics & Laser Technology*, Volume 175, 2024.

### Padėka

Finansavimas gautas iš Lietuvos Mokslo Tarybos (LMT) (projekto numeris Nr. S-MIP-23-32).

**Žodinė sesija 4C**  
**(Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika)**

# Paviršinių plazmonų-fononų poliaritonų artimo lauko vaizdinimas legiruoto GaN puslaidininkio paviršiuje

## Near field imaging of surface plasmon phonon polaritons on the surface of doped GaN semiconductor

Vytautas Janonis<sup>1</sup>, Adrian Cernescu<sup>2</sup>, Irmantas Kašalynas<sup>1</sup>

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

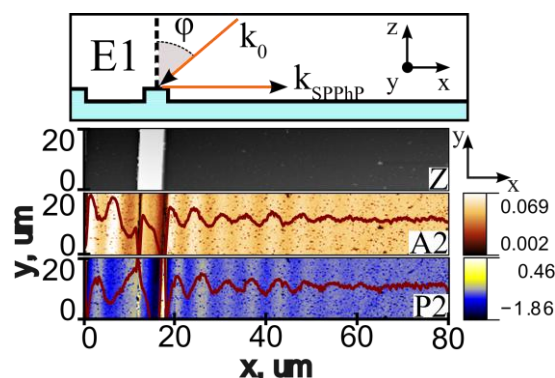
<sup>2</sup>Attocube Systems AG, 85540 Haar, Vokietija.

Modernių nanofotoninių technologijų progresą stipriai skatina galimybė kontroliuoti šviesos ir medžiagos sąveiką sub – bangos ilgio matmenų skalėje. Dažnu atveju tokie procesai vykdomi pasitelkiant plazmonines struktūras, savo savybėmis leidžiančias kontroliuoti šviesos ir medžiagos sąveiką dažnių juostoje nuo regimosios šviesos iki terahercų dažnių [1]. Nors paviršiniai plazmonų poliaritonai atveria naujas galimybes regimosios ir artimosios infraraudonosios šviesos srityse, nuo terahercų iki vidutinio infraraudonojo bangų diapazono, dėl santykinai didelių plazmonų nuostolių, reikalingas kitas metodas. Šiuo atveju pasitelkiami paviršiniai fononų poliaritonai (PFP), kurie pasižymi itin mažais nuostoliais polinio puslaidininkio Reštralo juostoje. Plazmoninių ir fononinių sužadinių sąveika stipriai legiruoto n-GaN kristalo paviršiuje leidžia stebėti hibridinės paviršiaus plazmon-fononų poliaritonų (PPFP) bangas, kurioms būdinga didelis erdvinis ir laikinis koherentiškumai (aukšta kokybė), o taip pat plati dažnių perderinimo juosta išnaudojant tiek plazmoninių tiek fononinių sužadinių ypatybes. [2,3]

Iki šiol atliktuose tyrimuose tik n-tipo legiruotose GaN puslaidininkinėse struktūrose buvo stebėti PPFP sužadiniai. [2] Tokie poliaritonai sužadinti sekliose paviršinėse gardelėse tolimajame lauke demonstravo siaurajuostį ir kryptingą spinduliuotės profilį, rodančius didelį erdvinį koherentiškumą, kuris, remiantis modeliavimo rezultatais, gali siekti net iki 9 mm atstumus. [3] Tokios savybės atveria naujas galimybes valdyti šviesą, perduoti informaciją struktūros paviršiumi. Be to buvo nustatytam jog dėl eksperimentinių ribojimų vien tolumo lauko tyrimai neleidžia tiksliai nustatyti tikslų poliaritoninės sistemos nuostolių ir išnaudoti poliaritoninės sistemos visų ypatumų. Tiksliam paviršinių procesų aprašymui reikalingi artimo lauko tyrimai, kuomet poliaritonai sužadiniami ir zonduojami tiesiai medžiagos paviršiuje.

Šiame darbe artimojo lauko vaizdų užrašymo metodais atlikome hibridinių SPPPh sklidimo tyrimus n-GaN kristalo paviršiuje [4]. Eksperimentams pasitelktas sklaidantis-skenuojantis artimojo lauko optinis mikroskopas (s-SNOM). Hibridinių SPPPh, sužadintų šalia seklios paviršinės gardelės, elektrinio lauko skirstiniai išmatuoti dviem pasirinktais dažniais: 920  $\text{cm}^{-1}$  ir 570  $\text{cm}^{-1}$ . Žadinimo geometrija, pagrindiniai bandinio topografijos (Z) ir išmatuoti sklaidyto lauko amplitudės (A2) bei fazės (P2) skirstiniai pateikti 1. Pav.

Eksperimentiniai duomenys palyginti su modeliavimo rezultatais, gautais panaudojant baigtinių skirtumų laiko skalėje (FDTD) metodą, išpildytą CST Studio Suite programoje. Eksperimentiškai nustatyta charakteringa poliaritonų gėsimio atstumo vertė apie 25  $\mu\text{m}$ , kuomet suskaičiuotos vertės siekė iki 105  $\mu\text{m}$ , žadinant 570  $\text{cm}^{-1}$  dažnio šviesa. Modeliavimu eigoje gautos PPFP dažnio ir slopinimo koeficiento dispersijos gerai sutampo su analitinėmis išraiškomis. Taip pat, pavyko įsivertinti naudoto s-SNOM metodo apribojimus ir poreiki tolimesniuose tyrimuose atsieti žadinimo ir zondavimo optines schemas. Manome, kad gauti rezultatai atvers kelią naujoms hibridinės poliaritonikos pritaikymo galimybėms, kurios taip pat gali būti integruotos su kitomis puslaidininkinėmis struktūromis.



1 pav. Viršuje: eksperimentinės PPFP žadinimo principinė schema. Apčioje: pateikiami s-SNOM rezultatai: bandinio topografija (Z), sklaidytos lauko amplitudės (A2) ir fazės (P2) skirstiniai išmatuoti paviršiuje šalia n-GaN periodinės gardelės. [4]

*Reikšminiai žodžiai: Paviršiniai plazmonų-fononų poliaritonai, artimo lauko spektroskopija, artimo lauko vaizdinimas.*

### Literatūra

- [1] D. N. Basov et al., "Polariton panorama," *Nanophotonics* **10**(1), 549–577 (2020).
- [2] V. Janonis et al., "Investigation of n -type gallium nitride grating for applications in coherent thermal sources," *Appl. Phys. Lett.* **116**(11), 112103 (2020).
- [3] V. Janonis et al., "Directive and coherent thermal emission of hybrid surface plasmon-phonon polaritons in n-GaN gratings of linear and radial shapes," *Opt. Mater. Express* **13**(9), (2023)
- [4] V. Janonis et al., "Near-Field Imaging of Hybrid Surface Plasmon-Phonon Polaritons on n-GaN Semiconductor," *Materials*, **18**, 2849, (2025)

## GaAsBi/(Al,Ga)As kvantinių duobių atkaitinimo tyrimas

### Investigation of the annealing effect on GaAsBi/(Al,Ga)As quantum wells

Evelina Dudutienė, Patricija Strumilaitė, Justas Žuvelis, Aivaras Špokas, Andrea Zelioli, Sandra Stanionytė,  
Bronislovas Čechavičius, Aurimas Čerškus, Renata Butkutė  
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius  
[evelina.dudutiene@ftmc.lt](mailto:evelina.dudutiene@ftmc.lt)

GaAsBi dėl savo savybių tokių, kaip staigus draustinių energijų tarpo ( $E_g$ ) sumažėjimas įvedus vos kelis procentus bismuto, didelė spin-orbitinio suskilimo energija ir mažas  $E_g$  jautrumas temperatūros pokyčiams, yra laikomas perspektyvia medžiaga aktyviosioms terpėms, skirtoms artimojo infraraudonojo spektro srities šviesos šaltiniams [1]. Tačiau, dideliu fotoluminescencijos (PL) intensyvumu pasižyminčias GaAsBi kvantines struktūras užauginti sudėtinga dėl itin žemos jų auginimo temperatūros lemiančios didelę nespindulinės rekombinacijos centrų koncentraciją struktūrose.

Siekiant pagerinti epitaksinių sluoksnių kokybę, dažnai taikomas jų atkaitinimas aukštesnėje temperatūroje nei naudota auginimo metu. Tačiau literatūroje pateikiami GaAsBi kvantinių struktūrų atkaitinimo poveikio tyrimų rezultatai yra prieštaringi – vieni autoriai fiksuoja pagerėjusias optines savybes [2], kiti – priešingai, jų suprastėjimą [3]. Be to, net keliuose darbuose buvo pademonstruota, kad atkaitinimas gali lemti Bi kvantinių taškų (QD) formavimąsi [4, 5]. Dėl to, šiame darbe buvo siekiama visapusiškai ištirti kaip po auginimo taikomas atkaitinimas paveikia GaAsBi daugybinių kvantinių duobių (MQW) struktūrų kokybę ir optines savybes.

Šiame darbe buvo tirtos įvairios molekulinį pluoštelių epitaksijos metodu užaugintos GaAsBi/(Al,Ga)As MQW. Bismuto koncentracija tirtose bandiniuose buvo 8 – 11 %. Struktūrų atkaitinimas buvo atliktas greito atkaitinimo (RTA) krosnyje azoto aplinkoje, 3 min palaikant 550, 600, 650, 700 ir 750 °C temperatūras.

Darbo metu nustatyta, kad GaAsBi MQW struktūrų su GaAs barjeriniais sluoksniais atkaitinimas visose tirtose temperatūrose lėmė kristalinių ir optinių savybių degradaciją. Tai galimai susiję su tuo, kad pakėlus struktūrų temperatūrą bismutas segreguoja iš GaAsBi sluoksnių į paviršių, dėl to yra suardoma tvarkinga GaAsBi/GaAs sluoksnių periodinė sandara. Tuo tarpu 650 °C ir 700 °C temperatūrose atkaitinus GaAsBi MQW struktūras turinčias AlGaAs barjerinius sluoksnius buvo stebėtas atitinkamai 42 ir 14 % PL intensyvumo padidėjimas, kas rodo ne tik pagerėjusią GaAsBi kristalinę kokybę, bet ir tai, kad AlGaAs efektyviai sulauko Bi kvantinės duobės sluoksnyje. Svarbu paminėti ir tai, kad AlGaAs barjeriniai sluoksniai kitaip nei GaAs, buvo auginti pakeliant padėklą temperatūra, kas galimai lėmė, kad šių GaAsBi MQW atkaitinimas iki 600 °C temperatūros nelėmė jokių emisijos pokyčių. Taip pat, nustatyta, kad aukštesnė nei 700 °C atkaitinimo temperatūra buvo per aukšta ir sukėlė visų tirtų GaAsBi MQW struktūrų optinių savybių degradaciją.

Visose tirtose GaAsBi MQW struktūrose atkaitintose aukštesnėje nei 600 °C temperatūroje buvo stebimas PL juostos energijos poslinkis į aukštesnes energijas, kas rodo Bi kiekio GaAsBi gardelėje mažėjimą. Tai dera su literatūroje pateikiamais duomenimis, kad atkaitinimo metu Bi išeina iš GaAsBi gardelės ir formuoja Bi QD [5]. Visgi, net itin žemose temperatūrose užregistruotuose GaAsBi/GaAs ir GaAsBi/AlGaAs MQW struktūrų PL spektruose emisija iš Bi QD nebuvo stebima, o PL spektrų forma prieš ir po atkaitinimo (išskyrus 750 °C temperatūroje) nepasikeitė visame tirtame temperatūrų intervale nuo 4 K iki 300 K. Tai reiškia, kad net jei po atkaitinimo Bi QD susiformavo, tinkamo dydžio Bi nanokristalitų kiekis yra nepakankamas, kad būtų galima užregistruoti emisiją iš Bi QD.

Finansinę paramą šiam darbui suteikė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarčių Nr. S-MIP-24-99 ir S-SV-25-203.

*Reikšminiai žodžiai:* GaAsBi, bismutas, kvantinės duobės, fotoluminescencija, molekulinį pluoštelių epitaksija, atkaitinimas, Rentgeno spindulių difrakcija.

#### Literatūra

- [1] R.D. Richards, N. J. Bailey, Y. Liu, T. B. O. Rockett, A.R. Mohamad, Phys. Status Solidi B, **259**, 2100330 (2022).
- [2] P. C. Grant, D. Fan, A. Mosleh, S.-Q. Yu, V. G. Dorogan, M. E. Hawkrigge, Y. I. Mazur, M. Benamara, G. J. Salamo; S. R. Johnson, J. Vac. Sci. Technol. B **32**, 02C119 (2014)
- [3] B. Čechavičius, R. Adomavičius, A. Koroliov and A. Krotkus, Semicond. Sci. Technol. **26**, 085033 (2011).
- [4] M. Wu, E. Luna, J. Puustinen, M. Guina, A. Trampert, Nanotechnology **25**, 205605 (2014).
- [5] R. Butkutė, G. Niaura, E. Pozingytė, B. Čechavičius, A. Selskis, M. Skapas, V. Karpus, A. Krotkus, Nanoscale Res. Lett. **12**, 436 (2017).

# Susitvarkusių GaAsBi bisimidų dielektrinė funkcija: spektroskopinis elipsometrinis tyrimas

## Dielectric Function of Ordered GaAsBi Bismides: Spectroscopic Ellipsometry Study

Aidas Mikalauskas<sup>1</sup>, Saulius Tumėnas<sup>1</sup>, Renata Butkutė<sup>1</sup>, Vaidas Pačebutas<sup>1</sup>, Vytautas Karpus<sup>1</sup>

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

[aidas.mikalauskas@ff.stud.vu.lt](mailto:aidas.mikalauskas@ff.stud.vu.lt)

Epitaksiniai  $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$  bismidai ( $x \sim 0.01\text{--}0.1$ ), užauginti MBE metodu ant  $\text{GaAs}(001)$  padėklų, pasižymi spontaniniu,  $\text{CuPt}_B$ -tipo, bismuto atomų susitvarkymu (intarpas pav. 1), – moduluotu atominių  $(1\bar{1}1)$  arba  $(\bar{1}11)$  plokštumų užpildymu Bi atomais ( $\text{CuPt}_B$ - arba  $\text{CuPt}_B^+$  tipo kristaline struktūra). Spontaninį bismidų susitvarkymą eksperimentiškai patvirtinta atominės sandaros STEM-EDX ir XRD tyrimai [1].

Atominis susitvarkymas sąlygoja reikšmingus bismidų elektroninės struktūros, kartu jų optinio atsako, pokyčius, – visų pirma, valentinės juostos suskilimą  $\Delta_{VB}$  (intarpas pav. 1) ir optinę poliarizacinę anizotropiją. Ankstesni optiniai moduliaciniai, poliarizuoto pralaidumo ir fotoliuminescijos tyrimai [2, 3] atskleidė ženkliai  $\Delta_{VB}$  vertes 40–100 meV (esant  $x \sim 0.02\text{--}0.08$ ) ir išreikštą fundamentinių optinių šuolių  $E_{0,1}$  ir  $E_{0,2}$  (žr. intarpą pav. 1) poliarizacinę priklausomybę. Optinius šuolius  $E_{0,1}$  indukuoja tik tiesinė  $\mathbf{E} \parallel [110]$  poliarizacija. Esant  $\mathbf{E} \parallel [1\bar{1}0]$  poliarizacijai, yra indukuojami ir  $E_{0,2}$  šuoliai iš atskilusios lh skylių juostos. Optinių šuolių kampinė priklausomybė seka teorinį  $\cos^2\varphi$  dėsnį, tiesiogiai patvirtinama bismidų kristalinės gardelės  $zb \rightarrow \text{CuPt}_B$  redukcija.

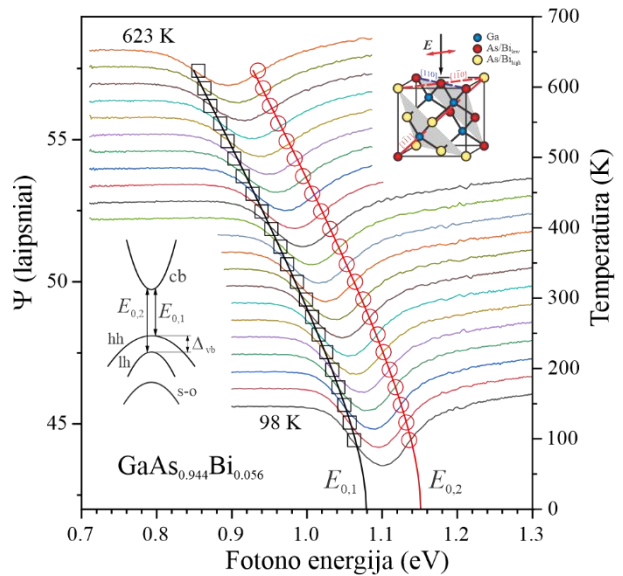
Šiame darbe buvo atlikti  $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$  bismidų spektroskopiniai elipsometriniai tyrimai. Kadangi epitaksinių susitvarkusių bismidų bandinių gardelė yra  $\text{CuPt}_B$ - ir  $\text{CuPt}_B^+$  pogardelių superpozicija, efektinė bandinių taškinė grupė yra  $C_{2v}$ . Todėl elipsometriniai matavimai, atlikti Miulerio matricos metodu, rezultatai buvo analizuojami efektinės ortorombinės bismidų gardelės rėmuose. Tai leido patikimai nustatyti efektinės dielektrinės funkcijos tenzorius komponentes  $\varepsilon_{[1\bar{1}0]} = \varepsilon(\omega) + \delta_{\perp}(\omega)$ ,  $\varepsilon_{[110]} = \varepsilon(\omega) - \delta_{\perp}(\omega)$  ir įvertinti  $\varepsilon_{[001]}$  komponentę.

Atskleista spektrinė anizotropijos parametro  $\delta_{\perp}(\omega)$  priklausomybė žemadažnėje, 0.7–1.4 eV, srityje rodo išreikštus kritinius optinius  $E_{0,1}$  ir  $E_{0,2}$  ypatumus, ir leidžia patikimai nustatyti valentinės juostos suskilimą  $\Delta_{VB}$  ir suskilusio fundamentinio sugerties krašto spektrinę eigą. Anizotropijos parametro  $\delta_{\perp}(\omega)$  vertės koreliuoja su bismuto atominės koncentracijos vertėmis ir susitvarkymo parametru  $\eta = \min[2x, 2(1-x)]$ .

Aukštadažnėje spektrinėje srityje anizotropijos parametro  $\delta_{\perp}(\omega)$  spektrai atskleidžia išreikštą, stiprų, optinį ypatumą ties  $\sim 2.5$  eV fotono energija. Spektrinis ypatumo svoris didėja augant atominei bismuto koncentracijai  $x$ , nors jo spektrinė padėtis nuo bismuto koncentracijos nepriklauso. Tai leidžia manyti, kad optinis  $\sim 2.5$  eV ypatumas gali būti sąlygotas Brijueno zonos redukcijos  $[1\bar{1}1]$  ašyje, juostų susilankstymo efektu.

Darbe atlikti temperatūriniai,  $T \in [98 \text{ K}, 623 \text{ K}]$ , elipsometriniai tyrimai žemadažnėje srityje atskleidė fundamentinių optinių šuolių  $E_{0,1}$  ir  $E_{0,2}$  raudonuosius poslinkius, kurie seka tipinę puslaidininkių draustinių energijų tarpo temperatūrinę priklausomybę (pav. 1), išlaikant pastovų valentinės juostos suskilimą  $\Delta_{VB} = E_{0,2} - E_{0,1}$ .

Reziumuojant, darbe atlikti spektroskopiniai elipsometriniai tyrimai atskleidžia spontaninio bismidų susitvarkymo įtaką fundamentiniams optiniams šuoliams, – leidžia nustatyti suskilusio fundamentinio sugerties krašto dispersiją ir suskilimo parametrų detales bei atskleidžia papildomą optinį ypatumą ties 2.5 eV fotonų energiją, kuris gali būti sąlygotas juostų susilankstymu.



1 pav. Elipsometrinio parametro  $\Psi$  spektrų temperatūrinė priklausomybė. Intarpai:  $\text{CuPt}_B$ - gardelės narvelis ir juostinės struktūros schema.

*Reikšminiai žodžiai: GaAsBi, bismidai, spontaninis  $\text{CuPt}_B$  susitvarkymas, Miulerio matricos elipsometrija.*

### Literatūra

- [1] T. Paulauskas, V. Pačebutas, R. Butkutė, B. Čechavičius, A. Naujokaitis, M. Kamarauskas, M. Skapas, J. Devenson, M. Čaplovičová, V. Vretenár, X. Li, M. Kociak, and A. Krotkus, *Nanoscale Res Lett* **15**, 121 (2020).
- [2] V. Karpus, B. Čechavičius, S. Tumėnas, S. Stanionytė, R. Butkutė, M. Skapas, and T. Paulauskas, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **54**, 504001 (2021).
- [3] T. Paulauskas, J. Devenson, S. Stanionytė, M. Skapas, V. Karpus, B. Čechavičius, S. Tumėnas, V. Strazdienė, B. Šebeka, and V. Pačebutas, *Semicond. Sci. Technol.* **37**, 065004 (2022).

## AlGaAs barjerų dizaino įtaka InGaAs kvantinių duobių optinėms savybėms

### Influence of AlGaAs barrier design on the optical properties of InGaAs quantum wells

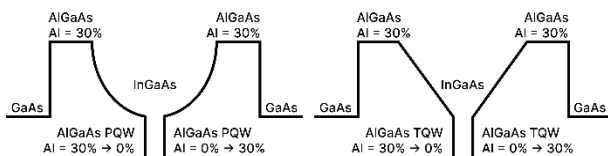
Justas Žuvelis<sup>1</sup>, Andrea Zelioli<sup>1</sup>, Monika Jokubauskaitė<sup>1</sup>, Aivaras Špokas<sup>1</sup>, Sandra Stanionytė<sup>1</sup>, Bronislovas Čechavičius<sup>1</sup>, Evelina Dudutienė<sup>1</sup>, Renata Butkutė<sup>1</sup>

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

[justas.zuvelis@ftmc.lt](mailto:justas.zuvelis@ftmc.lt)

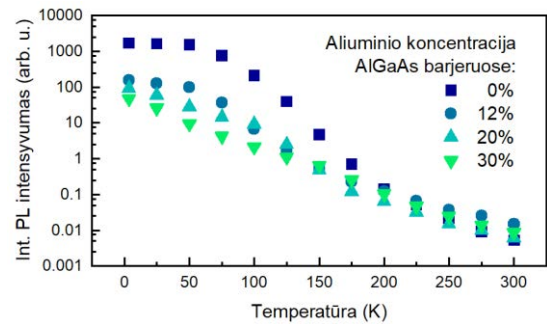
Augant optoelektroninių prietaisų, veikiančių artimajame infraraudonajame spektriniame ruože, poreikiui biomedicinos bei jutiklių technologijose, nuosekliai auga ir didelio našumo puslaidininkinių medžiagų paklausa. Viena iš tokių medžiagų, plačiai taikoma lazeriniuose dioduose, šviestukuose ir fotodetektoriuose yra InGaAs/GaAs kvantinės duobės (QW). Vis dėlto, žemas šios struktūros barjerų potencialas riboja temperatūrinį prietaisų stabilumą bei optinį stiprinimą [1]. Nors didesnę krūvininkų sąspraudą galima pasiekti GaAs pakeitus AlGaAs, tačiau tai reikalauja kruopštaus barjerų dizaino optimizavimo.

Šiame darbe buvo tiriama Al koncentracijos (0%, 12%, 20% ir 30%) pavienių InGaAs/AlGaAs stačiakampių kvantinių duobių (RQW) ir gradientinių AlGaAs barjerų dizaino (1 pav.) įtaka optinėms InGaAs QW struktūrų savybėms. Tirtų bandinių serijos buvo užaugintos molekulinį pluoštelį epitaksijos (MBE) būdu ant pusiau izoliuojančių GaAs padėklų. Indžio kiekis buvo įvertintas struktūras modeliuojant nextnano<sup>3</sup> programiniu paketu, o sluoksnių sąlyčio ribų kokybė įvertinta Rentgeno spindulių difrakcijos pagalba.



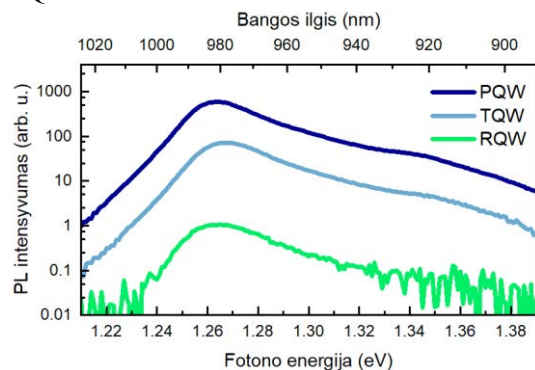
1 pav. InGaAs QW su gradientiniais AlGaAs barjeriais schemas: (a) parabolinė kvantinė duobė (PQW) ir (b) trikampė kvantinė duobė (TQW)

Iš RQW fotoluminescencijos (PL) matavimų 2 pav. matyti, kad žemose temperatūrose aukščiausią PL intensyvumą pasiekia InGaAs/GaAs QW struktūra. Tuo tarpu temperatūrose aukštesnėse nei 200 K intensyvesnė emisija stebima QW su AlGaAs barjeriais, o didžiausiu PL intensyvumu pasižymi struktūra, kurios barjeruose yra 12% Al. Šias tendencijas lemia du konkuruojantys veiksniai: nors aukštesnis AlGaAs potencialo barjeras efektyviau riboja terminę krūvininkų jonizaciją, tačiau didėjant Al koncentracijai kartu auga ir nespindulinės rekombinacijos centrų tankis. Dėl to, norint pasiekti optimalias InGaAs/AlGaAs RQW optines savybes, reikia rasti pusiausvyrą tarp efektyvios krūvininkų sąspraudos ir aukštos kristalinės kokybės.



2 pav. InGaAs/AlGaAs RQW integruoto PL intensyvumo priklausomybė nuo temperatūros esant skirtingoms Al koncentracijoms barjeruose.

Nustatyta, kad parabolinių ir trikampių AlGaAs barjerų naudojimas lemia padidėjusį emisijos iš InGaAs QW intensyvumą, lyginant su analogiškai augintomis InGaAs/GaAs RQW struktūromis (3 pav.). Gradientinių barjerų pranašumą galima susieti su didesne krūvininkų koncentracija, efektyvesniu jų pagavimu į kvantinę duobę bei geresniu elektronų ir skylių banginių funkcijų persiklojimu [2]. Tarpusavyje lyginant struktūras su gradientiniais AlGaAs barjeriais nustatyta, kad InGaAs PQW struktūra pasižymi didesniu emisijos efektyvumu nei TQW struktūra.



3 pav. InGaAs QW su gradientiniais AlGaAs ir stačiakampiais GaAs barjeriais kambario temperatūros PL spektrai.

*Reikšminiai žodžiai: InGaAs, AlGaAs barjerai, kvantinės duobės, fotoluminescencija*

#### Literatūra

- [1] D. Das, H. Ghadi, B. Tongbram, S. Singh, and S. Chakrabarti, Journal of Luminescence 192, 277–282 (2017)
- [2] Y. F. Wang, M. I. Niass, F. Wang, and Y. H. Liu, Chinese Physics B 29, 017301 (2020)

# GaN sluoksnyje esančių dislokacijų sumažinimas auginant ant profiliuoto safyro padėklo

## Dislocations reduction in GaN layer grown on patterned sapphire substrate

Karolina German<sup>1</sup>, Tadas Malinauskas<sup>1</sup>, Virginijus Bukauskas<sup>2</sup> ir Arūnas Kadys<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fotonikos ir Nanotechnologijų Institutas, Fizikos Fakultetas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Fizinių ir Technologijos Mokslų Centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

[karolina.german@ff.stud.vu.lt](mailto:karolina.german@ff.stud.vu.lt)

Galio nitridas (GaN), tai III-V grupės elementų derinys. Ši puslaidininkinė medžiaga yra tiesiatarpė, kurios draustinių energijų tarpas lygus 3,4 eV. Įterpus III grupės elementus, tokius kaip indį (In) ar aliuminį (Al), galima keisti draustinių energijų tarpą nuo 0,7 eV (InN) iki 6,2 eV (AlN), o kartu ir šviesos sugerties spektro sritį atitinkamai nuo infraraudonosios iki ultravioletinės apimant visus regimosios šviesos srities bangos ilgius [1]. Kadangi GaN draustinis energijų tarpas yra gana platus, tai nitridai plačiai naudojami ultravioletiniams, mėlyniams, žaliems ir raudoniems šviesos diodams gaminti. Nitridų pagrindu pagaminti prietaisai gali atlaikyti aukštas iki 600 °C temperatūras ir pasižymi geru atsparumu išoriniai radiacijai sukeltai protonų, neutronų, gama arba alfa spinduliuotės, todėl tinkami naudoti kosmoso industrijoje ir aukštos energijos dalelių detektoriuose [2].

GaN sluoksnis epitaksijos iš metalo-organinių garų fazės (angl. Metalorganic vapour phase epitaxy - MOVPE) metodu gali būti auginamas ant įvairių padėklų įskaitant safyrą ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), silicį (Si) ar silicio karbidą (SiC). SiC gardelės konstanta yra artima GaN (3,5 % nesutapimas), bet šis padėklas yra gana brangus. Tuo tarpu safyro padėklas yra pigus, bet gardelės konstanta su GaN nesutampa 16 %.

Auginant GaN ant safyro auginamame sluoksnyje formuojasi didelis kiekis taškinių ir tūrinių defektų. Tai lemia krūvininkų judrio ir gyvavimo trukmės sumažėjimą. Norint pagerinti sluoksnio kokybę naudojami skirtingi auginimo būdai. Pavyzdžiui, dvipakopis auginimas, dielektrinio sluoksnio kaukės naudojimas paviršiuje. Taip pat naudojami profiliuoti safyro padėklai (ang. Patterned sapphire substrates - PSS), kurių paviršiuje yra suformuoti kūgiai, piramidės ar pusapskritiniai. Šie padėklai pagerina pirminio GaN sluoksnio kokybę [3].

Šio darbo metu optimizavome GaN auginimo ant PSS padėklo MOVPE būdu technologinį procesą. Ištyrėme auginimo temperatūros įtaką GaN paviršiaus morfologijai ir kristalinei struktūrai. Rezultatai parodė, kad dislokacijų tankį galime sumažinti iki  $10^7 \text{ cm}^{-2}$ .

*Reikšminiai žodžiai:* MOVPE, GaN, dislokacijų tankis, PSS.

### Literatūra

- [1] S. Gnanaeswaran, *Study of energy band diagrams of group III-Nitride heterostructures* (2003).
- [2] A. Y. Polyakoc ir kt. *Radiation effects in GaN materials and devices* 1 p. 877-887 (Journal of Materials Chemistry 2012)
- [3] L. Shang ir kt. *The effect of nucleation layer thickness on the structural evolution and crystal quality of bulk GaN grown by a two-step process on cone-patterned sapphire substrate* 442 p. 89-94 (Journal of Crystal Growth 2016)

**Žodinė sesija 5A**  
**(Elektronika ir optoelektronika, Kvantinė optika ir**  
**kvantinė informacija)**

# Didelės dielektrinės skvarbos HfO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>, Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, TiO<sub>2</sub>, Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> ir Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> plėvelių tyrimas GaN MOS struktūrose

## Investigation of high-*k* HfO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>, Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, TiO<sub>2</sub>, Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, and Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> films on GaN MOS structures

Roland Tomašiūnas<sup>1</sup>, Ignas Dailidėnas<sup>1</sup>, Ignas Reklaitis<sup>1</sup>, Martin Mandl<sup>2</sup>, Sebastian Taeger<sup>2</sup>, Martin Strassburg<sup>2</sup>, Riina Ritasalo<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Institute of Photonics and Nanotechnology, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup> OSRAM Opto Semiconductors GmbH, Leibnizstr. 4, 93055 Regensburg, Germany

<sup>3</sup> Picosun Oy, Tietotie 3, 02150 Espoo, Finland

[rolandas.tomasiunas@ff.vu.lt](mailto:rolandas.tomasiunas@ff.vu.lt)

Low interface trap density is a critical factor determining the performance of high-frequency electronic devices. In GaN-based MOSCAPs and MOSFETs, the key focus is the metal–oxide–semiconductor (MOS) interface. To date, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>- and SiO<sub>2</sub>-based MOS devices have dominated the development of GaN electronics. However, intrinsic material limitations have driven the search for alternative high-*k* transition metal oxides. High-dielectric constant materials such as HfO<sub>2</sub>, Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, SrTiO<sub>3</sub>, Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, TiO<sub>2</sub>, Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, and ZrO<sub>2</sub> are highly attractive candidates for GaN MOSCAPs.

Previously, we investigated HfO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>, Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, TiO<sub>2</sub>, Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, and Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> films deposited on silicon by atomic layer deposition (ALD), focusing on crystallization kinetics and resistance to electrical breakdown [1]. Building on this work, we extended the study to the same oxides deposited on GaN epitaxial layers.

In this study, we present results on the selective crystallization of HfO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>, Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, TiO<sub>2</sub>, Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, and Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ALD films deposited on MOCVD (metalorganic vapour-phase deposition)-grown GaN epitaxial layer, and compare with analogous films on silicon [2]. A key finding is that most oxides remained amorphous up to 400°C annealing, demonstrating thermal robustness compatible with GaN device processing. For HfO<sub>2</sub> films deposited on GaN at 125°C using water as the oxidant, we observed stabilization of metastable orthorhombic and cubic phases at 800°C, in contrast to films on silicon, where the stable monoclinic phase dominated crystallization. We also report new data on nanocrystallite size from grazing incidence X-ray diffraction (GIXRD) and relate these results to surface roughness measured by atomic force microscopy (AFM). Most crystallized oxides on GaN exhibited sub-nanometer rms roughness, a key requirement for multilayer device fabrication.

Capacitance–voltage (C–V) and GaN band-edge photoluminescence measurements were used to probe the MOS interface. We found that the total interface trap density correlates with non-radiative recombination of photoexcited carriers: the lowest trap density yielded the strongest photoluminescence signal. The average total interface trap density of  $\sim 10^{13}$  cm<sup>-2</sup> obtained for these high-*k* oxides is only two to three times higher than that of conventional oxides. Nevertheless, this result leaves

significant room for further interface optimization and provides a strong basis to challenge the dominance of conventional oxides.

Finally, we analyzed GaN near-band photoluminescence under selective excitation of near-interface and subsurface regions using picosecond and nanosecond laser pulses at different wavelengths. We interpret the observed band bending and barrier modulation as the main mechanisms governing photoexcited carrier trapping and non-radiative recombination.

R.T. and I.D. acknowledge the „Universities‘ Excellence Initiative“ programme by the Ministry of Education, Science and Sports of the Republic of Lithuania under the agreement with the Research Council of Lithuania (project No. S-A-UEI-23-6).

*Keywords: MOS, GaN, transition metal oxide, ALD, interface traps, band bending.*

### Literatūra

- [1] I. Reklaitis, E. Radiunas, T. Malinauskas, S. Stanionytė, G. Juška, R. Ritasalo, T. Pilvi, S. Taeger, M. Strassburg, and R. Tomašiūnas. *Surf. Coat. Technol.* 399, 126123 (2020).
- [2] R. Tomašiūnas, M. Mandl, I. Reklaitis, T. Malinauskas, S. Stanionytė, D. Paipulas, R. Ritasalo, S. Taeger, M. Strassburg, and K. Sakoda. *Surf. Interfaces* 60, 105982 (2025).
- [3] R. Tomašiūnas, I. Dailidėnas, I. Reklaitis, T. Pilvi, M. Mandl, S. Taeger, M. Strassburg, and R. Ritasalo. 25<sup>th</sup> Int. Conf. on Transparent Optical Networks, ICTON'25, July 6-10, 2025, Barcelona, Spain. *IEEE Proc.*, 2025. DOI: 10.1109/ICTON67126.2025.11125397

# Stibidų technologinės platformos su kvantinių kaskadų lazeriais ir plazmoniniais emiteriais kūrimas viduriniojo IR diapazono jutikliams

## Developing an Antimonide Technology Platform with Quantum Cascade Lasers and Plasmonic Emitters for Mid-Infrared Sensing

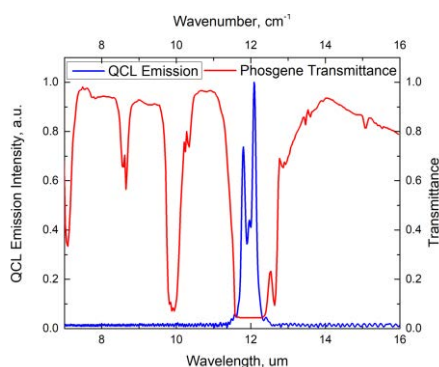
Jan Devenson<sup>1</sup>, Karolis Galvanauskas<sup>1</sup>, Karolis Stašys<sup>1</sup>, Giedrė Čepurnaitė<sup>1</sup>, Viktorija Nargelienė<sup>1</sup>, Jaunius Berškys<sup>1</sup>, Vytautas Jakštas<sup>1</sup>

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

[jan.devenson@ftmc.lt](mailto:jan.devenson@ftmc.lt)

Vidurinioji infraraudonosios (IR) spinduliuotės spektro sritis (~3–20  $\mu\text{m}$ ) yra itin svarbi moksliniams ir technologiniams taikymams dėl unikalios sąveikos su molekuliniais virpesiais. Ši sritis, dažnai vadinama „molekuliųjų pirštų atspaudų“ sritimi, leidžia aptikti ir analizuoti įvairias chemines medžiagas, todėl yra nepakeičiama dujų jutiklių, aplinkos stebėsenos, medicininės diagnostikos ir pramoninių procesų kontrolės srityse. Fizinių ir technologijos mokslų centre (FTMC) vystome nuoseklią stibidų pagrindu sukurtą technologinę platformą, apimančią koherentinius (kvantinių kaskadų lazerius, KKL) ir nekoherentinius (plazmoninius šiluminius emiterius) viduriniojo IR spinduliuotės spektro šaltinius bei fotodetektorius, siekdami sukurti pažangias spektroskopines ir sensorines sistemas.

Mūsų sukurti KKL pasižymi bangos ilgio lankstumu, didele galia ir gebėjimu veikti kambario temperatūroje, todėl idealiai tinka didelės skiriamosios gebos spektroskopijai. Viena iš svarbių taikymo sričių yra itin toksiškų dujų aptikimas. Sukūrėme InAs/AlAsSb kvantinių kaskadų lazerį, kurio emisijos smailė ties 12  $\mu\text{m}$  tiksliai atitinka fosgeno ( $\text{COCl}_2$ ) dujų absorbcijos langą, taip sudarant prielaidas jautriam šios pavojingos medžiagos aptikimui (1 pav.). Kitas pavyzdys – aukštoje temperatūroje veikiantys KKL, skirti metano dujų nuotėkio jutikliams aviacijos ir kosmoso pramonėje. Šie prietaisai demonstruoja stabilų veikimą iki 120  $^{\circ}\text{C}$  temperatūros ir pasiekia ~1 W optinę impulsinę galią.

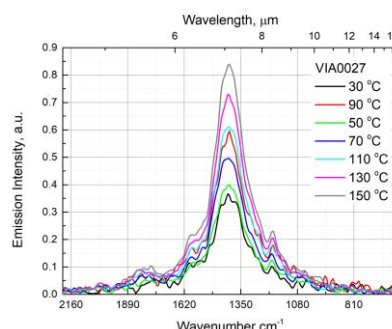


1 pav. Sukurto KKL emisijos spektras (mėlyna kreivė) ir fosgeno dujų pralaidumo spektras (raudona kreivė), parodantis puikų bangos ilgių atitikimą dujų aptikimui

Kartu su fiksuoto emisijos bangos ilgio kvantinių

kaskadų lazeriais mūsų laboratorijoje yra kuriami ir derinamo bangos ilgio KKL lazeriai bei jų pagrindų veikiančios spektroskopinės sistemos.

Be lazerinių šaltinių, taip pat kuriame naujoviškus nekoherentinius šaltinius – bemetaisus, epitaksinius plazmoninius šiluminius emiterius. Šiuose įrenginiuose, pasitelkiant paviršinius plazmonus-poliaritonus, pasiekama siaurajuostė (~50  $\text{cm}^{-1}$ ), derinamo bangos ilgio viduriniojo IR ruožo spinduliuotė, tinkama kompaktiškomis sensorinėms sistemoms. Ypač svarbi šių emiterių savybė, kurią pademonstruojame matavimų rezultatais (2 pav.), yra išskirtinis emisijos bangos ilgio stabilumas kintant temperatūrai, kas yra kritiškai svarbu prietaisų patikimumui.



2 pav. Plazmoninio šiluminio emiterio (pavyzdys VIA0027) emisijos spektras, išmatuotas skirtingose temperatūrose nuo 30  $^{\circ}\text{C}$  iki 150  $^{\circ}\text{C}$ . Matyti, kad emisijos smailės padėtis išlieka stabili.

Apibendrinant, FTMC vystoma stibidų technologinė platforma apima platų pažangių optoelektroninių prietaisų spektrą. Sujungdami didelės galios KKL, naujoviškus plazmoninius emiterius ir jautrius fotodetektorius, siekiame sukurti integruotas sistemas, kurios praplės viduriniojo IR diapazono fotonikos galimybes praktiniuose taikymuose.

*Reikšminiai žodžiai: kvantiniai kaskadų lazeriai, vidurinis infraraudonasis diapazonas, stibidai, plazmonika, dujų jutikliai.*

### Literatūra

- [1] K. Stašys, A. Gežutis, J. Devenson, Journal of Semiconductors **45**(2), 022101 (2024).

# Siauro spektro kvantinių defektų kūrimas heksagoniniame boro nitride

## Manufacturing Narrowband Fluorescent Defects in Hexagonal Boron Nitride

J. Janušonis<sup>1</sup>, V. Šilys<sup>1</sup>, I. Bibi<sup>1</sup>, M. Maciaszek<sup>2</sup>, L. Razinkovas<sup>1</sup>, E. Markauskas<sup>1</sup>, D. Rutkauskas<sup>1</sup>, T. Paulauskas<sup>1</sup>

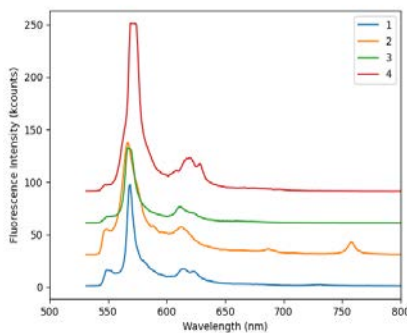
<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

Varšuvos Technologijos Universitetas, Varšuva, Lenkija

julius.janusonis@ftmc.lt

Kvantiniai defektai medžiagose pasižymi optinėmis ir paramagnetinėmis savybėmis, leidžiančiomis juos naudoti tiek kaip vieno fotono šaltinius, tiek ir kaip jutiklius. Jutiklių taikymams svarbios defektų paramagnetinės savybės, tokios, kaip išskirtinai ilgas sukinio būsenos koherencijos laikas, paprastai yra siejamos su deimantuose aptinkamais defektais [1].

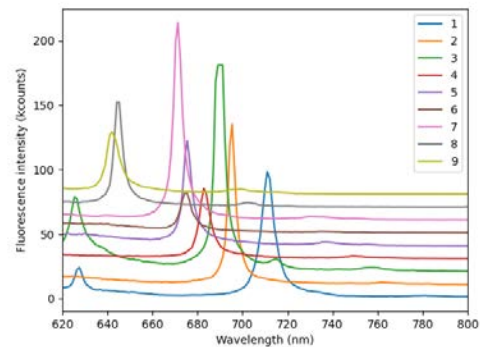
Gerai vieno fotono šaltiniai tuo tarpu reikalauja kitokių fizikinių savybių – trumpų fluorescencijos gyvavimo laikų, mažos nespindulinės relaksacijos tikimybės ir trumpai gyvuojančių būsenų nespindulės relaksacijos kanaluose. Dėl šių savybių pasiekiamas didelis kvantinis efektyvumas ir palankios sąlygos fotonų generavimui „pagal poreikį“.



1 pav. Fluorescuojantys defektai hBN, indukuoti femtosekundine lazerine spinduliuote: „geltonoji“ grupė

Didelio kvantinio efektyvumo vienfotoniai šaltiniai paskutiniuoju metu intensyviai tiriama dvimatėse medžiagose [2]. Viena iš populiariausių medžiagų yra heksagoninis boro nitridas (hBN), pasižymintis plačiu draustinės juostos tarpu, ir todėl galintis turėti gilius defektus. Defektai hBN pasižymi siauru spektru, silpna elektron-fononine sąveika, trumpais sužadinimo gyvavimo laikais ir dideliu ryškiu. Fluorescuojantys taškiniai defektai stebimi plačiame spektro ruože, nuo 400 nm iki 800 nm.

Siauras vienfotonio šaltinio spektras gali būti labai naudingas generuojant neatskiriamus fotonus kvantinės optikos taikymams, o taip pat išvengiant dispersijos efektų optinėse sistemose. Nepaisant to, iki šiol hBN defektų panaudojimas realiems taikymams vis dar lieka ribotas, ir viena iš svarbių priežasčių yra ta, kad išskyrus keletą defektų [3], jų cheminė struktūra ir susidarymui palankios sąlygos yra nepakankamai suprastos.



2 pav. Fluorescuojantys defektai hBN: „raudonoji“ grupė, pasižyminti silpna elektron-fononine sąveika

Šiame darbe mes suformavome kelias skirtingas fluorescuojančių defektų grupes tiesioginio lazerinio rašymo būdu (1-2 pav.) hBN pavyzdžiuose. Charakterizavimas fluorescencijos mikroskopijos metodais ir teoriniai skaičiavimai leido nustatyti panašių defektų grupę ~650nm–700nm spektro diapazone, kuriai būdinga silpna elektronų ir fononų sąveika, ir pasiūlyti hipotezę apie jų cheminę struktūrą.

*Reikšminiai žodžiai: vienfotoniai šaltiniai, kvantinės technologijos.*

### Literatūra

- [1] F. Jelezko, and J. Wrachtrup. Physica status solidi (a) 203.13 (2006): 3207-3225.
- [2] F. Hayee, F., Yu, L., Zhang et. al., Nature materials, 19(5), (2020) 534-539.
- [3] M. Mackoit-Sinkevičienė et al. "Carbon dimer defect as a source of the 4.1 eV luminescence in hexagonal boron nitride." Applied Physics Letters 115.21 (2019).

# Didelio elektronų judrio tranzistorių su struktūriniais užtūros elektrodais taikymas terahercų spinduliuotės detekcijai

## Modified edge-gating geometry of high-electron-mobility transistors for terahertz detection

Maxim Moscotin<sup>1</sup>, Justinas Jorudas<sup>1</sup>, Mirosław Saniuk<sup>1</sup>, and Irmantas Kašalynas<sup>1</sup>

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

maxim.moscotin@ftmc.lt

Terahertz (THz) technology has shown immense potential across various fields — including imaging, spectroscopy, and communication systems — but its full exploitation depends on the development of detectors. Terahertz antenna-coupled field-effect transistors (TeraFETs) have emerged as promising candidates for terahertz detection [1]. In these devices, resonant detection is achieved by exciting plasma waves within the transistor channel. The two-dimensional electron gas present in the channel acts as a plasmonic cavity, where interference of plasma waves results in resonant frequencies determined by the channel length and carrier density [2]. A critical challenge, however, is edge scattering. One promising approach to address this issue is to narrow the effective channel width electrically [3].

In this work, we developed TeraFETs based on AlGaIn/GaN high-electron-mobility transistor (HEMT) structures with an electrically controllable effective channel width. Three gate configurations are implemented: (i) an edge-configuration (EdgeFET), where two gate electrodes approach the channel from two sides; (ii) a modified edge-configuration (m-EdgeFET), in which the two side-approaching gates are interconnected by a small bridge overlapping the channel; and (iii) a reference configuration (FinFET) with a solid gate electrode fully covering the channel. Both gate and source-drain electrodes were implemented as perpendicular THz antennas, allowing operation of the detector in two regimes: direct channel coupling and capacitive coupling via gate electrodes.

Compared to the reference FinFET, the m-EdgeFET geometry exhibits an order-of-magnitude reduction in gate leakage current and a similar magnitude of THz response. Furthermore, compared to the conventional EdgeFET, the m-EdgeFET shows a significantly lower threshold voltage of -3 V — an important factor for practical applications. The m-EdgeFET THz detector demonstrates room-temperature responsivity to 300 GHz, peaking at 13 V/W (Fig. 1).

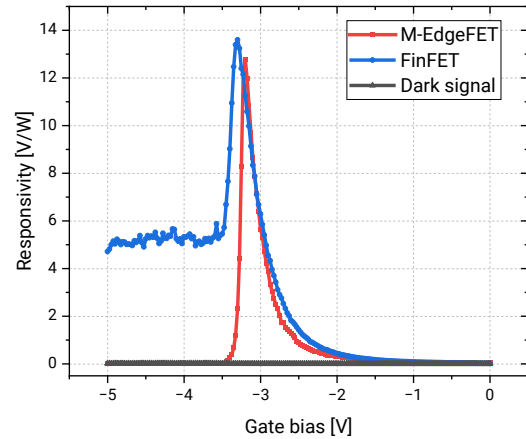


Fig. 1. Room-temperature responsivity to 300 GHz for an m-EdgeFET detector (red curve) and FinFET detector (blue curve) in an ohmic coupling regime.

*Acknowledgement:* the work received funding from LMT through the project: „Tyrimas bekausių žaliųjų technologijų GaN ir Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> galios įrenginiams gaminti naudojant lazerinį mikroapdorojimą“ (P-LT-TW24-1).

*Keywords:* terahertz detection, AlGaIn/GaN, TeraFET, FinFET, EdgeFET, m-EdgeFET, plasma waves, two-dimensional electron gas (2DEG).

### References

- [1] W. Knap et al., "Resonant detection of subterahertz and terahertz radiation by plasma waves in submicron field-effect transistors", *Applied Physics Letters*, vol. 81, no. 24, pp. 4637–4639, Dec. 2002.
- [2] Zhang Y. et al., "Resonant THz detection by periodic multi-gate plasmonic FETs", *Frontiers in Physics*, vol. 11, 1170265, 2023.
- [3] P. Sai et al., "AlGaIn/GaN field effect transistor with two lateral Schottky barrier gates towards resonant detection in sub-mm range", *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 34, 024002, 2019.

**Žodinė sesija 5B**  
**(Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų**  
**technologijos)**

## A3-B5-Bi kvantinių darinių inžinerija taikymams puslaidininkiniuose artimosios infraraudonosios srities šaltiniuose: technologiniai iššūkiai ir dizaino strategija

### Engineering of A3-B5-Bi quantum structures for applications in near infrared semiconductor sources: technological challenges and design strategies

Aivaras Špokas<sup>1</sup>, Andrea Zelioli<sup>1</sup>, Paulina Žyprė<sup>1</sup>, Andrius Bičiūnas<sup>1</sup>, Bronislovas Čechavičius<sup>1</sup>, Evelina Dudutienė<sup>1</sup>, Aistė Štaupienė<sup>1</sup>, Augustas Vaitkevičius<sup>2</sup>, Aurimas Čerškus<sup>1</sup>, Lena Golubewa<sup>1</sup>, Yaroslav Padrez<sup>1</sup>, Arnas Naujokaitis<sup>1</sup>, Sandra Stanionytė<sup>1</sup>, Martynas Skapas<sup>1</sup>, Martynas Talaikis<sup>1</sup>, Mindaugas Kamarauskas<sup>1</sup>, Virginijus Bukauskas<sup>1</sup>, Justinas Glemža<sup>3</sup>, Sandra Pralgauskaitė<sup>3</sup>, Jonas Matukas<sup>3</sup>, Gabrielius Kontenis<sup>4</sup>, Darius Gailevičius<sup>4</sup>, Janis Spigulis<sup>5</sup>, Yi-Jen Chiu<sup>6</sup>, Renata Butkutė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

<sup>3</sup>Vilniaus universitetas, Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

<sup>4</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, 10223 Vilnius

<sup>5</sup>University of Latvia, Raina Blvd. 19, 1586 Riga, Latvia

<sup>6</sup>National Sun Yat-Sen University, Lianhai Rd.70, Gushan District, 804 Kaohsiung, Taiwan

[renata.butkute@ftmc.lt](mailto:renata.butkute@ftmc.lt)

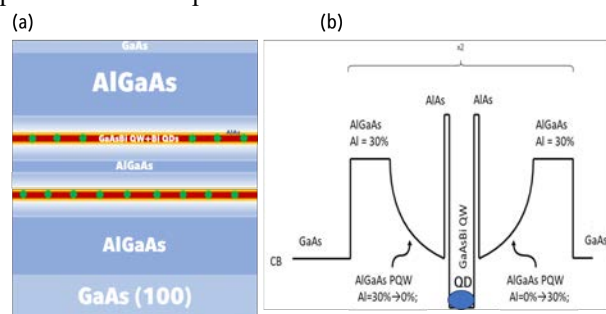
Pastaruoju metu puslaidininkiniai prietaisai apima ne tik atskirų komponentų dydžio mažinimą, bet ir glaudų jų integravimą. Aukštam sistemų našumui jau neužtenka vieno kvantinės sąspraudos mechanizmo. Dažnas komponentas savyje jų talpina bent keletą: pavyzdžiui, lazeriai aktyviojoje terpėje veikia kvantinių taškų duobėje pagrindu, o jų rezonatoriai turi gradientinės sudėties sluoksnius. Be to, naujausi taikymai kelia skirtingų optimizuotų sistemų parametrų poreikį. Kalbant apie emiterius, jie su kitais sistemos komponentais turi ne tik gerai derėti dydžiu ir svoriu, bet vis dažniau pasižymėti labai siaura linija, koherentiniu pluoštu bei specifine išėjimo galia. Nors mokslininkai šiam tikslui pasitelkia įvairius protokolus, naujų medžiagų paieška ir technologijų inžinerija yra vis dar labai aktuali.

Jau porą dešimtmečių junginiai, kurių gardelės yra suderintos su GaAs sulaukė didžiulio dėmesio. Moksliniai tyrimai parodė, kad įvedus Bi į A3B5 (bismidai arba GaAsBi) galima lengviau pasiekti ilgesnes bangas. Unikali bismidų savybės, tokios kaip spartus draustinių energijų tarpo mažėjimas bei silpnė temperatūrinė priklausomybė, leidžia šias struktūras pritaikyti našesniuose lazeriuose su mažesnėmis energijos sąnaudomis. Jie galėtų būti labai perspektyvūs taikymams biomedicinoje, kuriant spektroskopinius ir biologinius jutiklius neinvaziniam ligų atpažinimui ir vizualizavimui, maisto pramonėje bei aplinkos taršos matavimui, aptinkant mažas dozes toksiškų bioproduktų, krašto apsaugoje, stebint oro erdvę ir identifikuojant sprogmenis, kosmoso misijose ir ryšio technologijose ir pan.

Studijos tikslas buvo išvystyti bismidinių kvantinių nanodarinių, duobių ir taškų, molekulinį pluoštelį epitaksiją, skirtą taikyti artimosios infraraudonosios spinduliuotės bangų ruože (1,0–1,5 μm) kambario temperatūroje veikiantiems lazeriams ir šviestukams.

Vykdamas veiklą buvo įgyvendinti du medžiagų inžinerijos būdai: draustinių energijų juostos ir kvantinių struktūrų dizaino projektavimo optimizavimas, taikant skirtingus epitaksinius procesus, tradicinę molekulinį

pluoštelį epitaksiją ir migracijos sustiprintą epitaksiją, *in-situ* ir *ex-situ* kaitinimus ir t.t. Optimizavus technologijas buvo pagaminti lazeriniai diodai ir optiškai kaupinami VECSEL tipo mikrolazeriai, kurių aktyviojoje terpėje įveiktos daugybinės GaAsBi kvantinės duobės (žr. 1 pav.). Kambario temperatūroje užregistruotas spinduliuotės bangos ilgis siekė 1144 nm. Pastebėta, kad parabolinio profilio barjeriniai sluoksniai sumažina slenkstinę srovę iki dešimties kartų (eilės 100 mA) ir apie 10 kartų padidina išėjimo galią (šimtai mW) [1]. Nustatyta, kad VECSEL, užaugintų 12 kvantinių duobių pagrindu, išdėstytų poromis ir atskirtų storesniais barjeriais, suteikia kompaktiškumo lazeriui, jis pasižymi geresniu šilumos nuvedimu ir efektyvesniu kaupinimu. Kvantinės duobės su gryno Bi kvantiniais taškais buvo pritaikytos plačiajuosčiuose emisijos šviestukuose [2]. Svarbu pažymėti, kad temperatūriniai testai patvirtino jog visų komponentų spektrinės charakteristikos silpnai priklauso nuo temperatūros.



1 pav. GaAsBi kvantinių duobių su paraboliniiais barjeriniais sluoksniais struktūros, skirtos aktyviajai emiterio terpei, schema (a) ir laidumo juostos profilis (b).

Darbas dalinai finansuotas iš LMT projekto S-LLT-23-3.

*Reikšminiai žodžiai:* A3-B5-Bi, kvantinis darinys, puslaidininkinis lazeris, artimoji infraraudonoji spinduliuotė.

#### Literatūra

[1] A. Špokas et al, Micromachines, 16, 506 1-10 (2025).

[2] A. Vaitkevičius et al., Surfaces and Interfaces, V68, 106586 (2025).

# Singuletinės generacijos valdymas tripletiniuose anihiliatoriuose siekiant efektyvesnės fotonų konversijos

## Tuning singlet yield in triplet-triplet annihilation for enhanced photon upconversion

Karolis Kazlauskas<sup>1</sup>, Manvydas Dapkevičius<sup>1</sup>, Justas Lekavičius<sup>1</sup>, Steponas Raišys<sup>1</sup>, Edvinas Radiunas<sup>1</sup>, Lukas Naimovičius<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Photonics and Nanotechnology, Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Department of Chemistry and Biochemistry, University of California San Diego, La Jolla, CA 92093, USA

[karolis.kazlauskas@ff.vu.lt](mailto:karolis.kazlauskas@ff.vu.lt)

Sensitized triplet-triplet annihilation (TTA) within organic systems comprising tailored sensitizer and annihilator species can generate a noticeable fraction of high-energy singlets, a phenomenon known as photon upconversion (UC, Fig. 1). [1] Notably, optimized TTA-UC systems can sustain this energy conversion even under low-intensity, milliwatt-power incoherent irradiation, enabling operation at solar-level excitation. [2] Provided the singlet generation yield is substantial, these characteristics render TTA-UC attractive for applications that benefit from harnessing low-energy photons, including but not limited to photovoltaics, targeted drug delivery, in vivo bioimaging, and 3D printing. [1,3]

However, a central constraint on UC efficiency, especially in the technologically important far-red/NIR-to-visible range, lies in the limited yield of singlet state generation via TTA. [4] This limitation, quantified by the spin-statistical factor ( $f$ ), typically remains well below 20% for common annihilators (Fig. 2). Existing approaches for improving  $f$ , such as triplet-state engineering or molecular geometry control, have provided only incremental improvements, and predictive control remains a challenge.

In this work, we discuss non-radiative losses of the  $2\times T_1$  to  $T_2$  states within the framework of the energy-gap law, and introduce controlled aggregation as a new strategy for tuning  $f$ . Using TES-functionalized anthradithiophene (TES-ADT) as the annihilator and palladium phthalocyanine as the sensitizer, we systematically vary annihilator concentration to induce a transition from monomeric to aggregated states. Our spectroscopic and X-ray diffraction measurements, supported by DFT calculations, reveal that concentration-driven dimerization reshapes the annihilator's energy landscape, enabling access to higher-energy triplet states and accelerating spin conversion.

This approach results in a 3-fold enhancement in singlet yield, increasing  $f$  from 20% to 60%—a level rarely achieved in far-red/NIR annihilators. The effect is also observed in neat TES-ADT films, confirming aggregation as the key factor. Our findings unveil aggregation-enhanced singlet generation via TTA, providing valuable insights for designing more efficient UC systems by tailoring energy landscapes through molecular packing.

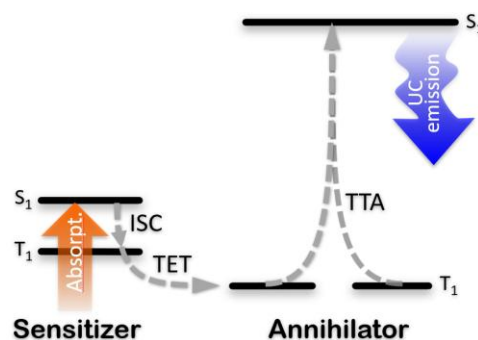


Fig. 1. TTA-UC energy scheme showing the key sequential processes: photon absorption, intersystem crossing (ISC), triplet energy transfer (TET), triplet-triplet annihilation (TTA), and UC emission

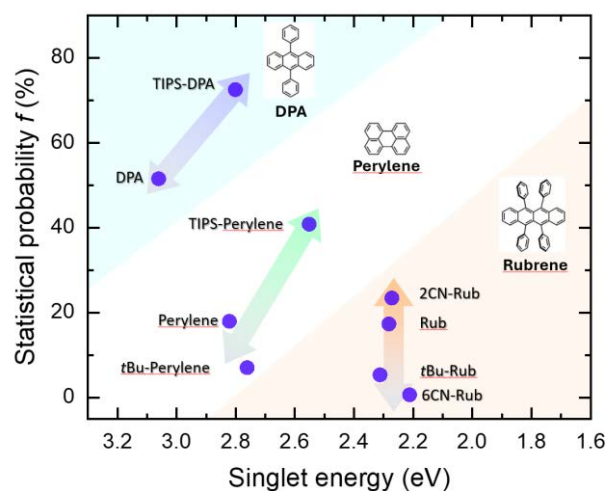


Fig. 2. Tunability of the statistical factor through functionalization of model annihilators

**Keywords:** photon upconversion, triplet-triplet annihilation, photophysics

### References

- [1] L. Zeng, L. Huang, J. Han, G. Han, *Acc. Chem. Res.* **55**, 2604 (2022).
- [2] P.J. Zhou, Q. Liu, W. Feng, Y. Sun, F. Li, *Chem. Rev.* **115**, 395 (2015).
- [3] S. N. Sanders, T. H. Schloemer, M. K. Gangishetty, D. Anderson, M. Seitz, A. O. Gallegos, R. C. Stokes, D. N. Congreve, *Nature* **604**, 474 (2022).
- [4] L. Naimovičius, A. B. Pun, *Trends in Chemistry* **7**, 171 (2025).

# Hibridinis manganito–grafeno jutiklis magnetinio srauto tankio ir krypties matavimui

## Hybrid Manganite–Graphene Sensor for Measurement of Magnetic Flux Density Magnitude and Direction

Nerija Žurauskienė<sup>1</sup>, Voitech Stankevič<sup>1</sup>, Skirmantas Keršulis<sup>1</sup>, Vilius Vertelis<sup>1</sup>, Mykola Koliada<sup>1</sup>, Vakaris Rudokas<sup>1</sup>, Martynas Skapas<sup>1</sup>, Milita Vagner<sup>1</sup>, Valentina Plaušinitienė<sup>1</sup>, Asta Guobienė<sup>2</sup>, Šarūnas Meškiniš<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas  
[nerija.zurauskiene@ftmc.lt](mailto:nerija.zurauskiene@ftmc.lt)

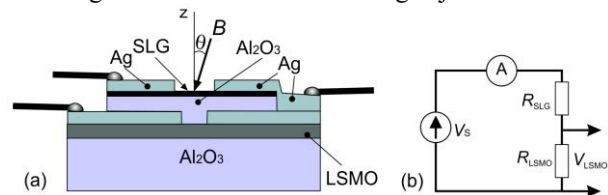
Tikslus magnetinių laukų aptikimas ir matavimas yra itin svarbus daugelyje technologinių ir mokslinių sričių, įskaitant navigacijos sistemas, pramoninę automatiką, biomedicininis diagnostikos metodus bei fundamentinius tyrimus kietojo kūno fizikoje. Tradiciniai magnetovaržiniai jutikliai, paremti anizotropinės magnetovaržos (AMR), tunelinės magnetovaržos (TMR) ar gigantinės magnetovaržos (GMR) [1] efektais, plačiai naudojami dėl didelio jautrio silpnuose magnetiniuose laukuose. Vis dėlto šie jutikliai turi esminį trūkumą – jų magnetovarža įsisotina silpnuose laukuose, todėl jie nėra tinkami, kai reikalingas platus matavimų diapazonas.

Pastaraisiais metais pažanga magnetinių laukų generavimo technologijose išplėtė jų taikymo ribas [2], sudarydama sąlygas naudoti tiek silpnus, tiek stiprius laukus įvairiose srityse. Dėl to atsirado poreikis kurti jutiklius, kurie būtų ne tik jautrūs, bet ir kompaktiški bei stabilūs plačiuose magnetinio lauko stiprio ir temperatūros ruožuose. Be to, daugelyje praktinių taikymų svarbu ne tik nustatyti lauko vertę, bet ir jo kryptį. Įprasti magnetovaržiniai ar Holo efekto jutikliai yra jautrūs lauko kryptčiai, todėl dažnai reikia naudoti tris ortogonaliai išdėstytus jutiklius, siekiant išmatuoti visas magnetinio lauko vektoriaus komponentes [3]. Tai didina sistemos sudėtingumą, dydį ir kainą.

Šiame darbe siūloma ir tiriama nauja hibridinio jutiklio architektūra, integruojanti nanostruktūrizuotą manganito sluoknį su vieno sluoksnio grafenu (SLG) elementu. Manganito (La-Sr-Mn-O) sluoksnis, optimizuotas absoliutinio magnetinio lauko stiprio matavimui. Tuo tarpu grafeno sluoksnis, pasižymintis išskirtiniu elektriniu laidumu ir dvimatės struktūros ypatybėmis, suteikia kryptinį jautrį, reaguodamas į magnetinio lauko orientaciją jutiklio plokštumos atžvilgiu. Tokia hibridinė konfigūracija leidžia vienu metu nustatyti tiek stiprį, tiek kryptį, nereikalaujant kelių atskirų jutiklių, taip sumažinant sistemos sudėtingumą ir matmenis.

Jutiklio konstrukcija ir veikimo principas pavaizduoti 1 pav., kuriame pateikiama hibridinio jutiklio struktūra ir atitinkama elektrinė grandinė. Jutiklis veikia, matuojant La-Sr-Mn-O (LSMO) sluoksnio ir grafeno komponentų varžos pokyčius. Manganito sluoksnio varža ( $R_{LSMO}$ ) proporcinga absoliutiniui lauko stipriui, o grafeno sluoksnio varža ( $R_{SLG}$ ) kinta priklausomai nuo lauko stiprio ir jo orientacijos. Sukurta speciali matavimo

sistema, užtikrinanti realaus laiko duomenų įrašymą ir analizę, leidžianti apskaičiuoti magnetinio lauko vektorių ir pateikti momentinį atsaką taikymams, kuriems reikalinga dinaminė kontrolė ar navigacija.



1 pav. Hibridinio jutiklio skerspjūvio diagrama (a) ir elektrinė grandinė (b).  $R_{SLG}$  ir  $R_{LSMO}$  žymi atitinkamai vieno sluoksnio grafeno ir manganito varžas.  $V_S$  – maitinimo įtampa, o  $V_{LSMO}$  – jutiklio atsako signalas (įtampa krentanti manganito sluoksnyje).

Eksperimentiniai rezultatai parodė, kad hibridinis jutiklis pasižymi padidintu jautriu plačiame magnetinių laukų ruože (nuo 0,03 T iki daugiau nei 20 T), išlaikydamas tiesišką atsaką ten, kur įprasti jutikliai įsisotina. Be to, galimybė išgauti kryptinę informaciją iš vieno kompaktiško įrenginio yra reikšmingas žingsnis magnetinių jutiklių technologijų raidoje. Tokie jutikliai ypač tinkami robotikos, autonominių transporto priemonių ir medicininės vizualizacijos srityse, kur būtinas tikslus erdvinis suvokimas ir integracija į mažas sistemas.

Apibendrinant, siūlomas hibridinis manganito–grafeno jutiklis yra perspektyvus sprendimas, įveikiantis esamus magnetovaržinių technologijų trūkumus. Derinant LSMO ir grafeno savybes, pasiekiamas jutiklio daugiafunkciškumas bei patikimumas, atveriantis kelią naujos kartos magnetinio lauko matavimo sistemoms.

### Literatūra

- [1] C. Zheng, K. Zhu, S. Cardoso de Freitas et al., IEEE Trans. Magn. **55**, 0800130 (2019).
- [2] R. Battesti, J. Beard, S. Böser et al., Phys. Rep. **765–766**, 1–39 (2018).
- [3] J. Shiogai, K. Fujiwara, T. Nojima et al. Commun. Mater. **2**, 102 (2021).
- [4] N. Žurauskienė, V. Stankevič, S. Keršulis et al. Sci. Rep. **15**, 9100 (2025).

## Daugiasluoksnių metalo-dielektrinių dangų kūrimas labai jautriems biologinės sąveikos jutikliams

### Development of multilayer metal-dielectric coating for highly sensitive biological interactions sensor

Alexandr Belosludtsev<sup>1</sup>, Tomas Rakickas<sup>1</sup>, Edita Voitechovic<sup>1</sup>, Ignas Bitinaitis<sup>1</sup>, Viktor Reshetnyak<sup>2</sup>, Anatoly Suprun<sup>2</sup>, Liudmyla Shmeleva<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Center for Physical Sciences and Technology, Savanoriu ave. 231, LT-02300

<sup>2</sup>Taras Shevchenko National University of Kyiv, Volodymyrska Street 64/13, 01601 Kyiv, Ukraine  
Alexandr.Belosludtsev@ftmc.lt

Surface plasmon resonance (SPR) technique for the monitoring of the biomolecule interactions have been established in the end of 20th century. The significant improvement of SPR method was made by the incorporation of the laser and camera into SPR setup. That let acquire, besides label free and real time analysis, the image of the analysed surface. Our work is devoted to the improvement of the null-ellipsometry<sup>1</sup> based imaging SPR setup.

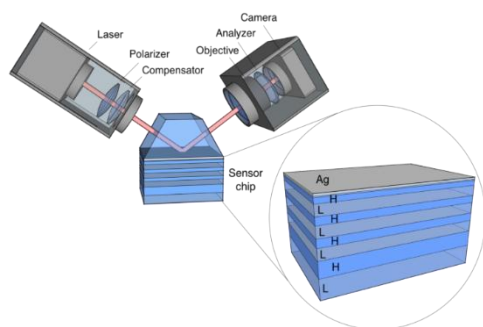


Fig 1. Experimental scheme

In the work, we suggest to use plasmon-waveguide resonance sensor instead of a classical – gold-covered glass slide for the investigations of the organic molecule interactions. Our novel metal-dielectric multilayer coating let effectively rearrange the electric field distribution and significantly increase the sensor sensibility. Previously<sup>2</sup>, we have optimized the deposition of nanoscale Ag layers, and in a current study we combine it with dielectric layers.

In the research, we have done the theoretical calculation of the electric field distribution, optimization of layer thickness. Then controllably coated the optical chip. Finally, the chip was used as a biosensor to investigate the response to a low concentration liquid. As the conclusion, it was shown optimized mode of measurements and sensitivity.

**Keywords:** *Plasmonics, biophotonics, Optical coatings, Laser.*

#### Refereces

- [1] V. Stankevicius, T. Rakickas, G. Raciukaitis. Journal of Laser Micro Nanoengineering **11**, 53 (2016)
- [2] A. Belosludtsev, A. Sytchkova, N. Kyžas, I. Bitinaitis, R. Simniškis, R. Drazdys, Vacuum, **195**, 110669 (2022).

#### Acknowledgment

This project has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement S-LU-24-3.

## Metallų hidridų susidarymo sferinėse struktūrose plėtra ir detali skaitmeninė hidrinimo proceso analizė.

### The Development of Metal Hydrides formation on Spherical Structures and an In-Depth Numerical Analysis of the Hydrogenation Process.

Zulfiqar Khalil<sup>1</sup>, Haider Ali<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Plasma Processing Laboratory, Lithuanian Energy Institute, Breslaujos Str. 3, LT-44403 Kaunas, Lithuania

<sup>2</sup>Vilnius Gediminas Technical University, LT-10223 Vilnius, Lithuania

[zulfiqar.khalil@lei.lt](mailto:zulfiqar.khalil@lei.lt), [haider.ali@stud.vilniustech.lt](mailto:haider.ali@stud.vilniustech.lt)

Hydrogen's distinctive features render it a viable energy carrier that can substitute fossil fuels. However, a pressing necessity persists to create safe and practical storage solutions before their extensive implementation. In this context, metal hydrides have gained increasing interest as hydrogen storage materials due to their potential to attain high volumetric energy densities, hence mitigating costs and safety concerns. The wide variations in thermodynamic characteristics across different material classes render them exceptionally adaptable. Three-dimensional spherical metal hydrides present a promising avenue due to their distinctive properties, especially the elevated surface area and volume-to-surface ratio they can achieve. The characteristics render spherical structures exceptionally suitable for compact and reversible hydrogen storage, positioning them as significant contenders for applications such as fuel cells, portable energy devices, and renewable energy storage.

This study investigates the structural and chemical modifications occurring in titanium (Ti) and zirconium (Zr) thin coatings on aluminium hydroxide (AlO<sub>3</sub>) granules before and after hydrogenation. The materials undergo hydrogenation at 400 °C and 5 atm of hydrogen pressure for 2 hours, with a hydrogen flow rate of 0.8 L/min. SEM studies revealed notable morphological alterations, such as surface roughening, grain boundary separation, and microcrack formation, signifying the generation of metal hydrides. EDS analysis indicated a reduction in Ti and Zr concentration during hydrogenation, presumably attributable to hydride production. XRD studies verified the existence of hydride phases, with shifts in diffraction peaks signifying structural alterations induced by hydrogen absorption. FTIR analysis indicated dihydroxylation, which is characterised by eliminating surface hydroxyl groups and establishing new metal–hydride bonds, corroborating the structural modifications. The emergence of additional peaks in the 1100–1200 cm<sup>-1</sup> range indicates metal hydride production, suggesting hydrogen incorporation. Mathematical modelling utilising the experimental values was conducted to assess hydride production and hydrogen diffusion rates. The hydride conversion rates for Ti- and Zr-coated AlO<sub>3</sub> granules were 3.5% and 1.6%, respectively. The hydrogen penetration depths for Ti- and Zr-coated AlO<sub>3</sub> granules after 2 hours were approximately 1200 nm and 850 nm, respectively. These findings align with the experimental data. This study

highlights the impact of hydrogenation on the microstructure and chemical composition of Ti- and Zr-coated AlO<sub>3</sub>, offering insights into prospective uses in hydrogen storage and associated domains.

**Keywords:** Metal Hydrides, Hydrogen Storage, Mathematical modeling.

## **Žodinė sesija 5C**

**(Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos; Energetikos fizika ir technologijos; Instrumentai ir matavimai)**

# Didelio ploto ir spartos atominių jėgų mikroskopija našioms paviršių tyrimams nanometrų lygmenyje

## Large area and high speed atomic force microscopy for high-throughput investigation of surfaces on the nanoscale

Šarūnas Vaitekoniš<sup>1</sup>, Viktor Novičenko<sup>2</sup>, Agnė Vailionytė<sup>1</sup>, Artūras Ulčinas<sup>1</sup>

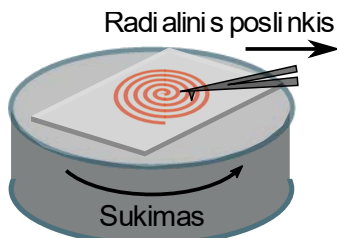
<sup>1</sup>Nanoinžinerijos skyrius, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

<sup>2</sup>Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio pr. 3, LT-10257 Vilnius

[arturas.ulcinas@ftmc.lt](mailto:arturas.ulcinas@ftmc.lt)

Atominių jėgų mikroskopija (atomic force microscopy, AFM) yra tapusi esmine nanometrų lygmens paviršiaus tyrimo technologija, plačiai taikoma moksliniams tyrimams ir gamybinių procesų kontrolei tokiose srityse, kaip medžiagų mokslas, biologija, puslaidininkių technologija ir t.t. Vienas svarbių vis dar esančių AFM taikymo apribojimų yra susijęs su ribota duomenų išeiga, kurią galima įvertinti kaip laiką, reikalingą gauti tam tikro paviršiaus ploto vaizdą pageidaujama erdvine skyru. Šis apribojimas kyla iš nuosekliojo (taškas-po-taško) duomenų registracijos būdo zondui skenuojant paviršių, ir labiausiai sietinas su elektromechaninės sistemos (skenerio), skirtos zondui skenuoti erdvėje (X, Y ir Z koordinatėse) paviršiaus atžvilgiu, ribotu dažnių juostos plokščiu. Žadinant skenerį didesniu nei rezonansinis dažniu, sužadintos nepageidaujamos mechaninės vibracijos, kurių pasekmė – nenuspėjama skenerio erdvinė padėtis ir didelė skenerio sugadinimo tikimybė. Dabartinės pažangiausios didelės spartos AFM sistemos iki šiol koncentravosi į skenavimo greičio didinimą didinant skenuojančios struktūros standumą, tuo būdu padidinant rezonansinį dažnį. Nors šis būdas leidžia gauti labai didelę vaizdų generavimo spartą (iki 1000 kadrų per sekundę), jis ženkliai sumažina galimą skenuoti plotą.

Mes sukūrėme ir išvystėme didelio ploto našią AFM sistemą, taikančią nerastrinio sukimo skenavimo metodą [1] ir inovatyvų adaptyvaus valdymo algoritmą [2], ir leidžiančią pasiekti didesnę nei 3 cm/s linijinio skenavimo greitį ir didesnę nei 1 mm<sup>2</sup> skenavimo plotą. 1 pav. parodyta sukimo skenavimo principo diagrama. 2 pav. parodyta sistemos eksperimentinio stendo nuotrauka.



1 pav. Sukimo skenavimo principo diagrama

Sukurtoji sistema leidžia tirti tiek kieto kūno (pvz., puslaidininkių technologijoje taikomus) paviršius, tiek mechaniškai atsparius biologinės prigimties paviršius (pvz., fiksuotos ląstelės, dantys, ir t.t.). Pranešime pateiksime sistemos taikymo pavyzdžius ir aptarsime

perspektyvas.



2 pav. Našios AFM sistemos eksperimentinis stendas

*Reikšminiai žodžiai: atominių jėgų mikroskopija, adaptyvus valdymas.*

### Literatūra

- [1] A. Ulčinas, Š. Vaitekoniš, Rotational scanning atomic force microscopy, *Nanotechnology* **28**, 10LT02 (2017).
- [2] Š. Vaitekoniš, V. Novičenko, A. Ulčinas, Fast tilt compensation in non-raster rotation-scanning atomic force microscopy for improved force control and extended scanning range, *Measurement* **253**, 117552 (2025).

# Liuminescencinių YAG:Ce<sup>3+</sup> 3D mikrostruktūrų lazerinis spausdinimas

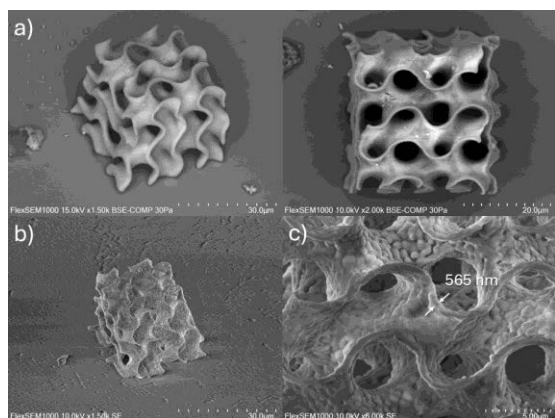
## Laser Printing of Luminescent YAG:Ce<sup>3+</sup> 3D Microstructures

Robertas Virkėtis<sup>1</sup>, Artūr Harnik<sup>2</sup>, Dominykas Dapšys<sup>2</sup>, Dimitra Ladika<sup>2</sup>, Greta Merkininkaitė<sup>1</sup>, Simas Šakirzanovas<sup>1</sup>, Mangirdas Malinauskas<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas, Vilnius LT-03225, Lietuva

<sup>2</sup>Lazerinių tyrimų centras, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Vilnius LT-10223, Lietuva  
[robertas.virketis@chgf.vu.lt](mailto:robertas.virketis@chgf.vu.lt)

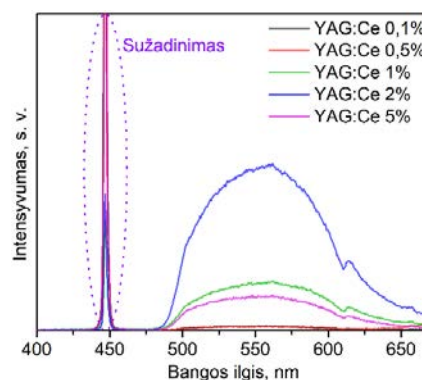
Itrio aliumino granatas (YAG) pasižymi dideliu kietumu, stabilumu aukštesnėse temperatūrose ir optiniu pralaidumu regimajai šviesai [1] ir yra jau 60 metų naudojamas kaip lazerio aktyvioji terpė [2]. Čochralskio metodas yra pagrindinis YAG monokristalų gamybos būdas, o polikristaliniams YAG gauti yra sukurta daugybė sintezės metodų. Tačiau ne vienas iš šių metodų nėra tinkamas YAG 3D mikrostruktūroms gaminti. Daugiafotonės polimerizacijos metodas leidžia pagaminti mikrometrų eilės polimerinius 3D darinius, kuriuos po to temiškai apdorojus yra gaunami keraminiai objektai [3]. Šiuo tyrimu yra įrodoma, kad naudojant dvifotonę polimerizaciją ir atspausdintų 3D objektų kalcinaciją galima gauti laisvos formos YAG:Ce<sup>3+</sup> 3D mikrostruktūras, pasižyminčias liuminescencinėmis savybėmis [4].



1 pav. a) Dvifotonės polimerizacijos metodu atspausdinta polimerinė 3D mikrostruktūra, b) YAG:Ce<sup>3+</sup> 3D mikrostruktūra po kalcinacijos 1500 °C, c) priartintas kalcinuotos mikrostruktūros vaizdas

Naudojant „NanoFactory“ (UAB „Femtika“) femtosekundinio lazerio litografinę sistemą ir dvifotonės polimerizacijos 3D spausdinimo metodą buvo pagamintos YAG:Ce<sup>3+</sup> pirmtakų 3D mikrostruktūros. Spausdinimui buvo naudojamas 517 nm bangos ilgio ir 144 fs impulsų lazeris. Norint nustatyti optimalius nustatymus dariniams gaminti, buvo spausdinami „nervų“ masyvai keičiant spinduliuotės galią ir skenavimo greitį. Po polimerizacijos 3D mikrostruktūros buvo ryškinamos etanolyje, pašalinant nesupolimerizuotą dervą. Išryškintus objektus jie buvo kalcinuojami ore pirmiausia 1000 °C temperatūroje 1 valandą pašalinant organinius junginius ir elementinę anglį, po to 1600 °C 1 valandą siekiant suformuoti gryną

kristalinę YAG:Ce<sup>3+</sup> fazę ir galiausiai redukciniėje (95 % N<sub>2</sub> + 5 % H<sub>2</sub>) atmosferoje 1000 °C 1 valandą norint suredukuoti Ce<sup>4+</sup> iki Ce<sup>3+</sup>, pagerinant darinių liuminescencines savybes. Po kalcinacijos buvo pasiekta submikroninė darinių raiška. Monokristalinės rentgeno spindulių difrakcijos analizės metodas patvirtino, jog po kalcinacijos buvo gautas vienfazis grynas YAG:Ce<sup>3+</sup>. Atlikus YAG:Ce<sup>3+</sup> 3D mikrostruktūrų liuminescencijos matavimus (sužadinimui naudotas 450 nm bangos ilgis) nustatyta, kad intensyviausia emisija pasižymi YAG:Ce<sup>3+</sup> mikrostruktūra (kalcinuota 1600 °C), kurios legiravimo laisvnis yra 2 %.



2 pav. YAG legiruoto 0,1 %, 0,5 %, 1 %, 2 %, 5 % Ce<sup>3+</sup> 3D mikrostruktūrų (kalcinuotų 1600 °C) emisijos spektrai, kai sužadinimui naudotas 450 nm bangos ilgis

*Reikšminiai žodžiai: dvifotonė polimerizacija, 3D mikrostruktūros, kalcinacija, liuminescencija*

### Padėka

Šis tyrimas buvo atliktas pagal Lietuvos Respublikos švietimo ir mokslo ministerijos programą „Universitetų meistriškumo iniciatyva“ („Universities Excellence Initiative“) pagal sutartį su Lietuvos mokslo taryba (projekto Nr. S-A-UEI-23-6) ir finansuotas Vilniaus universiteto Mokslo skatinimo fondo (projekto Nr. MSF-JM-10/2024).

### Literatūra

- [1] Y. Zhang, J. Liu, Y. Zhang, H. Yang, Y. Yu, Q. He, X. Liang, Y. Liu, W. Xiang, J. Alloys Compd. **488**, 638–642, (2009).
- [2] Zac, “Is It Time To Invest In A Cutera YAG Laser?”, laserresell, May 16 2022, <https://laserresell.com/buying-used-equipment/cutera-yag-laser/>, (Accessed: 28 August 2025).
- [3] Skliutas, E., Merkininkaitė, G., Maruo, S. *et al.* Multiphoton 3D lithography. *Nat Rev Methods Primers* **5**, 15 (2025).
- [4] A. Harnik and et. Al., „Laser 3D micro-/nano-structurization of luminescent materials”, *Adv. Opt. Mater.* **13**, 25000316 (2025).

# Planariai suplerlaidūs YBCO mikrozonatoriai didelio jautrumo elektronų sukinių rezonansui

## Superconducting YBCO planar microresonators for conventional high sensitivity ESR

G. Usevičius<sup>1</sup>, O. W. Kennedy<sup>2</sup>, I. Pocius<sup>1</sup>, P. Hogan<sup>2</sup>, A. V. R. de Temino<sup>2</sup>, J.-B. Verstraete<sup>2</sup>, G. A. Jacob<sup>2</sup>, J. Alexander<sup>2</sup>, V. Kalendra<sup>1</sup>, J. Banys<sup>1</sup>, John J.L. Morton<sup>2,3</sup>, M. Šimėnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universiteto Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva

<sup>2</sup>London Centre for Nanotechnology, University College London, London WC1H 0AH, UK

<sup>3</sup>Dept. of Electronic & Electrical Engineering, University College London, London WC1E 7JE, UK  
gediminas.usevicius@ff.vu.lt

Electron spin resonance (ESR) is a powerful spectroscopic technique with applications covering structural biology [1], spin-based quantum technologies [2,3], solid-state physics [4], and other important fields [5]. Despite its versatility, the relatively low sensitivity of conventional ESR poses a significant challenge for studying volume-limited systems, as standard ESR resonators often require samples of microliter volume to achieve detectable spin signals (13). To overcome these limitations, considerable effort has been directed toward the development of planar microwave microresonators of various designs.

Here, we introduce a high-temperature superconducting yttrium barium copper oxide (YBCO) microresonator design (Fig. 1A) along with a simple approach to microresonator coupling via a standard 3D ESR resonator, which together offer the advantages of high-spin number sensitivity with the ability to be readily deployed within any typical ESR laboratory. The microresonator features a spiral geometry designed for X-band (9.5 GHz) ESR with a mode volume of about 7 nL. We also used microfluidic channels to limit the sample volume to 1.6 nL, which provides a 1,000 fold (Fig. 2) increase in a spin number sensitivity over a traditional 3D resonator. Such an increase in sensitivity provides an immense 1,000,000 fold reduction in measurement time for a volume-limited samples, or in other words, a measurement that would take a year to measure can now be measured in less than a minute.

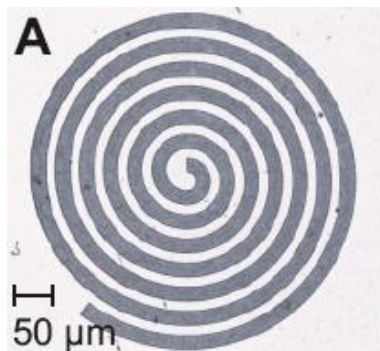


Fig. 1: (A) Fabricated planar YBCO spiral microwave microresonator.

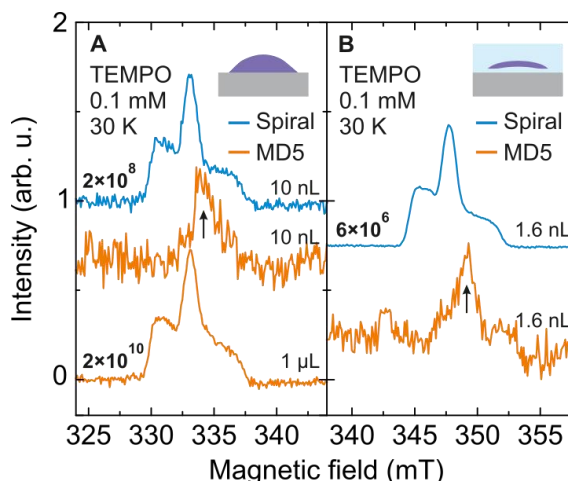


Fig. 2: Echo-detected field sweeps of TEMPO nitroxide radical sample measured using spiral microresonator and a standard Bruker MD5 resonator. (A) shows measurements performed with a sample droplet on top of the spiral and (B) a microfluidic structure. Spin number sensitivities are written in bold and in units of spins/G/ $\sqrt{\text{Hz}}$ .

*Reikšminiai žodžiai: elektronų sukinių rezonansas, elektronų paramagnetinis rezonatorius, mikrozonatoriai, YBCO, spektroskopija, jautrumas.*

### Literatūra

- [1] G. Jeschke, DEER Distance Measurements on Proteins. *Annu. Rev. Phys. Chem.* **63**, 419–446 (2012).
- [2] J. M. Zadrozny, J. Niklas, O. G. Poluektov, D. E. Freedman, Millisecond Coherence Time in a Tunable Molecular Electronic Spin Qubit. *ACS Cent. Sci.* **1**, 488–492 (2015).
- [3] A. Gaita-Arino, F. Luis, S. Hill, E. Coronado, Molecular spins for quantum computation. *Nat. Chem.* **11**, 301–309 (2019).
- [4] G. D. Watkins, EPR of defects in semiconductors: Past, present, future. *Phys. Solid State* **41**, 746–750 (1999).
- [5] M. M. Roessler, E. Salvadori, Principles and applications of EPR spectroscopy in the chemical sciences. *Chem. Soc. Rev.* **47**, 2534–2553 (2018).

## Vandenilis transporte: kodėl tai nėra klimato sprendimas

### Hydrogen in Transportation: Why it is Not a Climate Solution

Benas Gabrielis Urbonavičius, Matas Bašinskas

Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas  
[benas.urbonavicius@ktu.lt](mailto:benas.urbonavicius@ktu.lt)

Transporto sektorius yra vienas didžiausių šiltnamio efektą sukeliančių dujų (ŠESD) šaltinių – pavyzdžiui, Lietuvoje 2023 m. jam teko net 34,4 % visų emisijų. Iš jų 97,5 % susidaro kelių transporte, kur didžiausią dalį sudaro lengvieji automobiliai (53,8 % visų transporto emisijų) [1]. Pastaraisiais dešimtmečiais svarstyti įvairūs alternatyvūs sprendimai: elektromobiliai, biodegalai, sintetiniai e-degalai ir vandenilio kuro elementų technologijos. Vandenilis, naudotinas kuro elementuose automobiliams varyti, ilgą laiką buvo pristatomas kaip „švarus“ pakaitalas benzinui ar dyzelinui. Vis dėlto sukaupta analizė rodo, kad lengvajame transporte vandenilio technologija nėra efektyvi klimato kaitos mažinimo priemonė.

Pagrindiniai vandenilio kritikos argumentai: menkas energinis efektyvumas, infrastruktūros bei eksploatacinių kaštų iššūkiai, sisteminis konkurencingumo trūkumas lyginant su tikraisiais elektromobiliais.

Tikrųjų elektromobilių, vandenilinių automobilių (FCEV) ir sintetinių e-degalų vidaus degimo automobilių energinio efektyvumo palyginimas (nuo energijos šaltinio iki galutinio nuvažiuoto atstumo), darant prielaidą, kad naudojama 100 % atsinaujančių šaltinių elektros energija. Tikrieji elektromobiliai (kairėje) paverčia ~73 % pradinės elektros energijos į ridą, vandeniliniai – tik ~22 %, o sintetinius degalus naudojančius automobiliai – apie 13 %

Skirtingai nuo elektromobilių, kurie gali naudotis jau esamu elektros tinklu ir įkrovimo taškais, vandenilio ekonomikos sukūrimui reikėtų visiškai naujos degalų tiekimo infrastruktūros. Pasak MIT Energetikos iniciatyvos tyrėjų, net ir įgyvendinus elektromobilių plėtrai reikalingus iššūkius (papildomą elektros gamybą ir plačiai išdėstytus įkrovimo taškus), tai yra mažesnis iššūkis nei sukurti visiškai naują vandenilio tiekimo grandinę [2]. Analitinė BloombergNEF apžvalga apskaičiavo, kad norint iki 2030 m. išvystyti bent minimalią vandenilio kuro elementų transporto industriją, pasauliniu mastu reikėtų apie 100 mlrd. eurų subsidijų – ir vis tiek dauguma lengvųjų transporto priemonių bei autobusų tuo metu greičiausiai bus elektriniai [3]. Visoje Europoje 2024 m. veikė 294 vandenilio pildymo stotys, daugiau nei trečdalis jų – Vokietijoje (113 stotelių), dar 65 Prancūzijoje, 25 Nyderlanduose [4]. 2025-09-01 Europoje veikiančių stotelių yra 155 pagal h2live realaus laiko duomenis.

Ekonominiu požiūriu, vandeniliniai automobiliai išlieka brangesni tiek įsigyti, tiek eksploatuoti nei alternatyvos. Šiuo metu rinkoje teturime kelis lengvųjų FCEV modelius (Toyota Mirai, Hyundai Nexo), kurių kaina Europoje yra 70-80 kEur – gerokai daugiau nei

vidutinio automobilio ar net populiaraus elektromobilio. Be to antrinėje rinkoje FCEV patiria nuvertėjimą siekiantį iki 90% pradinės vertės per pirmus 5 metus. 100 km įveikimo kaštai skirtingomis kuro rūšimis pateikti 1 lentelėje.

1 lentelė. Kelionių kaštai skirtingomis kuro rūšimis.

|                                | Europa | JAV   | Japonija |
|--------------------------------|--------|-------|----------|
| Vandenilio kaina Eur/kg        | 12-16  | 32-34 | 9-10     |
| 100 km kaina, Eur (vandenilis) | 20,00  | 42,50 | 12,50    |
| 100 km kaina, Eur (benzinas)   | 11,07  | 17,32 | 10,92    |
| 100 km kaina, Eur (dyzelinas)  | 8,36   | 16,72 | 11,20    |
| 100 km kaina, Eur (elektra)    | 6,22   | 10,11 | 7,62     |

Lietuvos vandenilio sektoriaus plėtros studijoje pažymima, kad siekiant sukurti vandenilio ekonomikos pagrindus iki 2030 m., šaliai reikės apie 994 mln. eurų investicijų [6]. Tai didelė suma, turint omenyje, kad prognozuojamas vandenilio naudotojų skaičius transporte sieks tik iki 1% ir tik sunkiajame transporte.

Su dabartinėmis technologijomis vandenilis lengvajame transporte – daugiau aklavietė nei klimato sprendimas.

*Reikšminiai žodžiai: vandenilis, vandenilio ekonomika, vandenilinis automobilis, vandenilio kuro elementai.*

#### Literatūra

- [1] Lietuvos Respublikos aplinkos ministerija. (2025, Balandžio 1). Lietuva mažina šiltnamio efekto sukeliančių dujų išmetimą: 2023 m. jų išmesta 3 procentais mažiau nei 2022 m. Pagal am.lrv.lt
- [2] Moseman, A. (2023, Rugsėjo 11). Why have electric vehicles won out over hydrogen cars (so far)? MIT Climate. Pagal <https://climate.mit.edu/ask-mit/why-have-electric-vehicles-won-out-over-hydrogen-cars-so-far>
- [3] BloombergNEF (Bloomberg Finance L.P.). (2020, Kovo 30). Hydrogen Economy Outlook: Key Messages
- [4] Ludwig-Bölkow-Systemtechnik GmbH. (2025, Vasario 11). Milestone reached: over 1,000 hydrogen refuelling stations in operation worldwide in 2024. Pagal <https://www.h2stations.org/press-release-2025-milestone-reached-over-1000-hydrogen-refuelling-stations-in-operation-worldwide-in-2024/>
- [5] Amber Grid. (2022, Birželio 30). Lietuva gali tapti reikšminga vandenilio plėtros ir transportavimo grandimi Europoje. Pagal <https://ambergrid.lt/lietuva-gali-tapti-reikšminga-vandenilio-pletros-ir-transportavimo-grandimi-europoje>

## **Stendinė sesija 1**

Elementariųjų dalelių, atomų ir branduolių fizika, materijos sandara, Statistinė fizika, Teorinė ir skaičiuojamoji fizika, Cheminė fizika, Lazerių fizika ir šviesos technologijos, Fizikos istorija, terminija ir mokslo politika, Fizikos edukologija ir sklaida

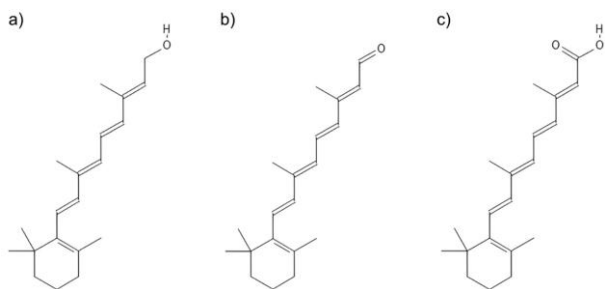
# Retinolio izomerų elektroninio sužadinimo energijų skaičiavimas moderniais teorinės chemijos metodais

## Calculating electronic excitation energies of retinol isomers using modern computational chemistry methods

Julius Ažukas<sup>1</sup>, Žyginta Murnikova<sup>1</sup>, Kęstutis Aidas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius  
[julius.azukas@ff.stud.vu.lt](mailto:julius.azukas@ff.stud.vu.lt)

Retinoidai – vitaminui A giminingų junginių klasė – dalyvauja daugelyje žmogaus organizmui gyvybiškai reikalingų procesų, tokių kaip rodopsino atsinaujinimo ciklas, kuriuo pagrįsta rega, ir ląstelių augimas bei diferenciacija, yra naudojami farmacijoje, kosmetikoje, medicinoje [1]. Dėl plataus paplitimo ir svarbos, šių junginių, ypač retinolio, retinalio bei retinoinės rūgšties, fizikinės ir cheminės savybės yra plačiai tiriamos. Dėl atliekamo vaidmens regos procesuose, itin domina šių molekulių sąveika su šviesa, elektroninis sužadinimas ir sugerties spektrai, kurie dažniausiai išmatuojami eksperimentiškai, kaip ir retinolio atveju [2].



1 pav. Retinoidų struktūrinės formulės – a) all-*trans*-retinolis, b) all-*trans*-retinalis, c) all-*trans*-retinoinės rūgštis

Norint detaliai tirti biologines molekules, ypač tirpikliuose, pastaruoju metu plačiai taikomi pažangūs teoriniai ir skaičiavimo metodai. Teoriniai skaičiavimai jau yra sėkmingai panaudoti analizuojant karotenoidų elektroninės sugerties spektrus [3], tačiau naudojant įprastus tankio funkcionalo teorijos (DFT) metodus, kol kas nėra pavykę to atkartoti su retinoidais. Pasitelkiant modernius kompiuterinius skaičiavimus, galima atlikti teorinius tyrimus, kurių metu junginiai nagrinėjami molekulinėje lygmenyje. Tokia metodika suteikia galimybę stebėti molekulės sąveiką su tirpikliu ir struktūrinius pokyčius, kurie daro įtaką elektroninės sugerties spektrui.

Šiame darbe siekta apskaičiuoti etanolyje ištirpusių all-*trans*- ir 11-*cis*- retinolio izomerų elektroninio sužadinimo energijas ir įvertinti naudotų metodų tikslumą. Įvertinta tirpiklio įtaką skirtingų retinolio izomerų sužadinimo energijai, naudojant molekulinės dinamikos (MD) simuliacijas bei jungtinius kvantinės mechanikos/molekulinės mechanikos (QM/MM) skaičiavimus.

Rasta, kad 11-*cis*- ir all-*trans*- retinolio sužadinimo

energijos priklauso nuo molekulinės aplinkos aprašymo – naudojant poliarizuojamą jėgų lauką stebimas sužadinimo energijos sumažėjimas. Taip pat, plečiant kvantinės mechanikos metodais aprašomą sistemos dalį pastebėta, kad van der Valso sąveikų įtraukimas į skaičiavimus neturi didelės įtakos retinolio konjuguotai sistemai ir elektroninio sužadinimo energijoms. Buvo pasiektas atitikimas tarp teorinio ir eksperimentinio 11-*cis*- ir all-*trans*- retinolio sužadinimo energijų skirtumo.

*Reikšminiai žodžiai:* elektroninis sužadinimas, elektroninės sugerties spektras, tankio funkcionalo teorija, MD simuliacijos, QM/MM.

**Padėka:** Darbe aprašyti skaičiavimai vykdyti atviros prieigos skaičiavimo centro „HPC Saulėtekis“ aukšto našumo superkompiuteriu Vilniaus universiteto Fizikos fakultete.

Tyrimas atliktas Lietuvos mokslo tarybos rengiamos studentų vasaros praktikos metu, projekto nr. P-SV3-25-233.

### Literatūra

- [1] E. H. Choi, A. Daruwalla, S. Suh, H. Leinonen, and K. Palczewski, *Journal of Lipid Research* **62**, 100040 (2021)
- [2] M. Macernis, J. Sulskus, S. Malickaja, B. Robert, and L. Valkunas, *The Journal of Physical Chemistry A* **118**, 1817-1825 (2014)
- [3] M. A. Kane and J. L. Napoli, *Methods in Enzymology* **123**, 112-124 (1986)

# Skersaryšinami naftaleno diimido akceptoriai saulės elementams

## Cross-linkable naphthalene diimide acceptors for photovoltaics

Lauryna Monika Svirskaitė<sup>1</sup>, Aiste Jegorovė<sup>1</sup>, Vytautas Getautis<sup>1</sup>, Tadas Malinauskas<sup>1</sup>, Vygtas Jankauskas<sup>2</sup>, Romualdas Jonas Čepas<sup>2</sup>, Egidijus Kamarauskas<sup>2</sup>, Alytis Gruodis<sup>2</sup>, Kristijonas Genevičius<sup>2</sup>

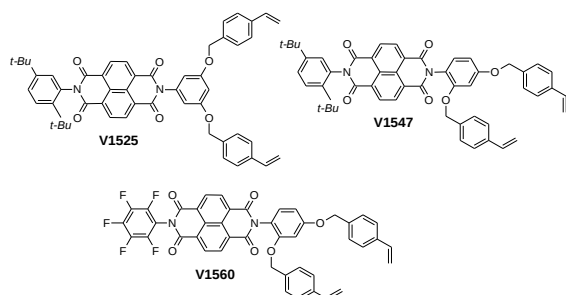
<sup>1</sup>Kauno technologijos universitetas, Organinės chemijos katedra, Radvilėnų pl. 19, LT-50254 Kaunas

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

[romualdas.cepas@ff.vu.lt](mailto:romualdas.cepas@ff.vu.lt)

Skersaryšintos organinės medžiagos pasižymi didesniu atsparumu tirpikliams, aukštesniu terminiu stabilumu ir ilgesne eksploatacine trukme, todėl jos plačiai naudojamos kaip skylių pernašos sluoksniai perovskitiniuose saulės elementuose[1]. Tuo tarpu elektronus pernešančių organinių puslaidininkių, gebančių sudaryti skersaryšintas struktūras, iki šiol yra labai nedaug ir jų savybės tebėra menkai ištirtos[2]. Šiame darbe pristatomi naujai sukurti naftaleno diimidų (NDI) dariniai pasižymintys terminiu skersaryšinimusi bei efektyvia elektronų pernaša.

Susintetinti nauji dariniai (pav. 1) pasižymėjo pakankamai dideliu terminiu stabilumu – jų skaidymosi temperatūra siekė 359–403 °C. Optiniai bei ciklinės voltametrijos matavimai parodė, kad LUMO lygmenys (–4.11 iki –4.26 eV) gerai dera su perovskitų bei Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> absorbuojančių sluoksnių laidumo juostomis, o aukšti HOMO lygmenys (< –7 eV) gali efektyviai blokuoti skylių injekciją.



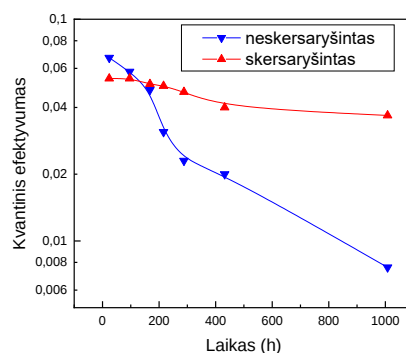
1 pav. NDI darinių cheminės struktūros.

Skersaryšinimo įtaka grynų medžiagų plėvelėse buvo nedidelė – elektronų judrumas beveik nekito, tai parodo, kad įvykę molekuliniai persitvarkymai yra minimalūs. Kaip parodė DSC matavimai, grynose NDI medžiagose vyksta tik dalinis - linijinis skersaryšinimasis. Siekiant pasiekti pilną trimatį tinklinimą ir tuo pačiu užtikrinti bipolinę krūvininkų pernašą, V1525 buvo maišoma su skylių pernašos skersaryšinama medžiaga V1179 [3]. Mišinyje buvo stebimas tiek elektronų, tiek skylių judėjimas, skersaryšinimas ir šiuo atveju nesumažino krūvininkų judrio: elektronų padidėjo 2–3 kartus, o skylių judrumas išliko beveik nepakitęs.

Į V1525+V1179 sistemą papildomai įvedus chromoforą FBR, abiejų krūvininkų judriai po skersaryšinimo kiek sumažėjo, tačiau skersaryšinimas sumažino gilių prilipimo lygmenų formavimąsi, kuris buvo pastebėtas sendintuose neskersaryšintuose dariniuose. Tai buvo galima stebėti kvantinio našumo

pokyčiuose (2 pav.), skersaryšintuose mėginiuose jis išliko stabilus viso stebėjimo laikotarpiu.

3D tinklinės struktūros susidarymą V1525+V1179 patvirtino molekulinio modeliavimo ir tirpumo bandymai. NDI akceptoriai, derinami su skersaryšinamu donoriniu komponentu, sudaro patvarius tinklinius sluoksnius, kurie pasižymi pagerintomis elektronų pernašos savybėmis bei ženkliai didesniu ilgalaikiu stabilumu.



2 pav. V1525+V1179+FBR (1:1:1) neskersaryšinto ir skersaryšinto mėginių fotogeneracijos kvantinio našumo priklausomybės nuo sendinimo trukmės esant  $E = 5 \cdot 10^5 \text{ V/cm}$  (skersaryšinimas atliktas 200 °C temperatūroje 1 val.).

Molekulinis modeliavimas atskleidė, kad steriniai veiksniai, pakaitų orientacija ir mišinio sudėtis lemia molekulių pakavimąsi ir skersaryšinimo efektyvumą; tam tikros konfigūracijos palankios tvarkingesnių tinklų formavimuisi. Apibendrinus, vinilbenzilo grupėmis funkcionalizuoti naftalendiimidai (NDI) yra perspektyvios n tipo krūvio pernašos medžiagos, pasižyminčios efektyvia elektronų pernaša, kontroliuojama morfologija ir patvariais skersaryšintais tinklais.

*Reikšminiai žodžiai: organiniai akceptoriai, skersaryšinimas, elektronų pernaša, naftaleno diimidas, krūvininkų pernaša.*

### Literatūra

- [1] Vaitukaitytė D, Al-Ashouri A, Daškevičienė M, et al.. Solar RRL. 2021;5(1).
- [2] Wang H, Zhang C, Yao Y, Cheng C, Wang K.. Small. John Wiley and Sons Inc. 2024;20(43)
- [3] Kamarauskas E, Jegorovė A, Čepas RJ, et al.. Chem Phys. 2024;579:112183.

# Špinelio ir perovskito nanodariniai kvantiniam skaidymui

## Spinel and perovskite nanocompounds for quantum-cutting

Vilius Čirgelis<sup>1,2</sup>, Simona Streckaitė<sup>1</sup>, Mariusz Stefanski<sup>3</sup>, Vitalii Boiko<sup>3</sup>, Vidmantas Gulbinas<sup>1</sup>,  
Dariusz Hreniak<sup>3</sup>, Lena Golubewa<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Center for Physical Sciences and Technology, Sauletekio Ave. 3, 10257 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio Ave. 9, 10222 Vilnius, Lithuania

<sup>3</sup>Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences, Okolna 2, 5-422 Wrocław,  
Poland  
[vilius.cirgelis@ftmc.lt](mailto:vilius.cirgelis@ftmc.lt)

Nanocrystal (NC) materials are known for their exceptional quantum confinement properties, high photoluminescence quantum yields (PL QY), and tunable bandgaps [1]. These unique characteristics make them highly versatile for a wide range of applications, from biomedicine to optoelectronics [1]. Doping NCs with lanthanide ions introduces additional optical functionalities, such as narrowband and long-lived emission [ref]. One of the most fascinating dopants is ytterbium ( $\text{Yb}^{3+}$ ). When paired, it has the remarkable ability to convert the energy of one UV-VIS photon absorbed by the host into two NIR photons through a process known as quantum-cutting (QC) [2]. QC could be exploited to overcome the Shockley-Queisser limit in single-junction solar cells, to improve their overall energy conversion efficiency [3]. Chemically inert and biocompatible NCs, exhibiting QC, can enable deep-tissue bio-imaging, due to  $\text{Yb}^{3+}$  ion emission matching the second biological window. In this study, spinel NCs for potential bio-imaging applications and perovskite NCs for potential solar cell efficiency improvement applications will be synthesized and their structural and optical properties will be investigated.

In this study Zinc gallate (ZGO) spinel NCs were synthesized hydrothermally and via sol-gel synthesis from metal nitrate precursors. Perovskite (Pe) NCs were synthesized by treating metal chloride precursors with octadecene, oleylamine and oleic acid, resulting in a colloidal suspension. Structural and morphological properties of the obtained NCs were characterized by XRD, Raman, FTIR, and TEM, while optical properties were studied with steady-state and time-resolved PL spectroscopy.

To stabilize ZGO NCs, negative surface charge on the shell ligand layer was obtained with addition of  $\text{OH}^-$  ions to the precursor solution. With increasing concentration of  $\text{OH}^-$  ions, the size of ZGO NCs decreased from 100 nm to 5 nm. TEM reveals that 5 nm ZGO NCs are agglomerated, while 100 nm ZGO NCs are scattered. ZGO NCs, independently of the synthesis procedure, have the same PL spectrum, with a maximum at 450 nm and an average fluorescence lifetime of 1.5 ns. Soon,

ZGO NCs will be doped with  $\text{Yb}^{3+}$  and  $\text{Cr}^{3+}$  ions for high-quality deep-tissue imaging, due to  $\text{Cr}^{3+}$  and  $\text{Yb}^{3+}$  ion emissions in the first and second biological windows.

Our synthesized lead-halide PeNCs, depending on the halide content, have different photoluminescence spectra with peaks at 410, 470 (PL QY = 100%), and 530 nm (PL QY = 80%) (Fig. 1). The average fluorescence lifetimes for these samples range from about 2 to 25 ns. For doping purposes, adding  $\text{Yb}^{3+}$  to the precursor solution does not result in PeNCs with NIR emission. A thorough examination of the synthesis process revealed that this is due to the presence of oleylamine, which is essential for successful NC synthesis. Other PeNC doping possibilities will be investigated further.

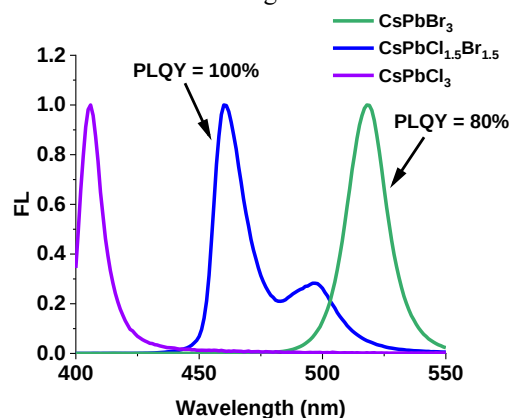


Fig. 1. Photoluminescence spectra with PL QY values of lead halide PeNCs.

*Keywords: lead halide perovskites, spinel, nanocrystals, quantum-cutting.*

### References

- [1] Maria Ibanez, et al., ACS Nano **1024**, (2025).
- [2] Duan Gao, et al., Light: Science & app. **13**, 17, (2024).
- [3] Gang Yang, et al., Journ. of All. and Comp. **921**, 166097, (2022)

*Acknowledgments: this research was funded by Polish-Lithuanian research project DAINA-3, agreement No [S-LL-24-11].*

# Tetrapeptido BMR spektrų ir struktūrinių savybių joninių skysčių ir vandens mišiniuose teorinis tyrimas

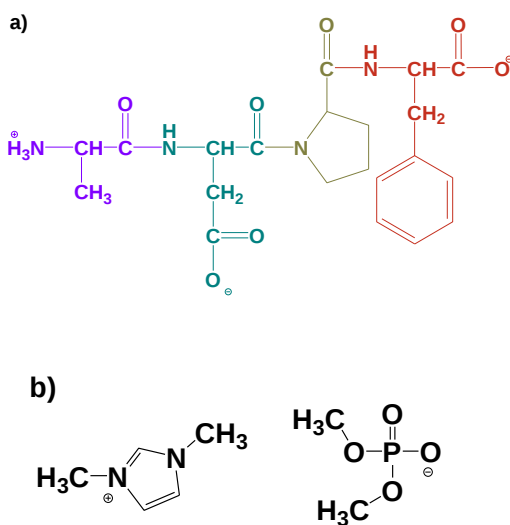
## Computational study of NMR spectra and structural properties of tetrapeptide in ionic liquid mixtures with water

Amina Elkady<sup>1</sup>, Žyginta Murnikova<sup>2</sup>, Kęstutis Aidas<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas, Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius

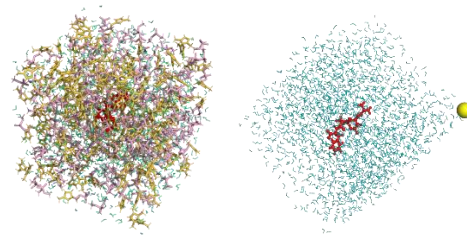
<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius  
amina.elkady@chgf.stud.vu.lt

Joniniai skysčiai (JS) yra žinomi kaip biologiškai suderinami tirpikliai, o jų galimos biologinės paskirtys apima lengvesnį jų prasiskverbimą pro membranas, fermentų katalizinio aktyvumo keitimą, taip pat įvairių baltymų stabilizavimą ar destabilizavimą [1]. Sąveikas tarp baltymų ir JS sudėtinga tirti ir vertinti dėl baltymų dydžio ir sudėtingos struktūros, todėl kaip modelinės sistemos dažnai naudojami mažesni peptidai, turintys aminorūgščių sekas, būdingas baltymams, siekiant nustatyti, kaip skirtingi JS sąveikauja su šiais peptidais ir keičia jų struktūrą vandeniniuose tirpaluose. Branduolių magnetinio rezonanso (BMR) spektroskopija yra tinkamiausias metodas tiek tarpmolekulinių sąveikų, tiek vidumolekulinių struktūrinių pokyčių identifikavimui, kadangi atomų, ypač vandenilio, cheminiai poslinkiai yra labai jautrūs pokyčiams artimoje molekulės aplinkoje.



1 pav. a) peptido Ala-Asp-Pro-Phe, b) 1,3-dimetilimidazolio dimetilfosfato struktūrinės formulės

Šiame darbe Ala-Asp-Pro-Phe tetrapeptidas buvo tirtas taikant molekulinės dinamikos (MD) simuliacijas ir kvantinės mechanikos/molekulinės mechanikos (QM/MM) skaičiavimus tiek vandeninėje terpėje, tiek JS/vandens mišinyje. Pasirinktas joninis skystis (JS) buvo sudarytas iš imidazolio pagrindu sukurto katijono 1,3-dimetilimidazolio ir įprasto JS anijono dimetilfosfato [Mmim][DMP].



3, 4 pav. Peptido sistemos vandeninėse terpėse

Teoriniai peptido vandenilio atomų cheminiai poslinkių skirtumai buvo palyginti su eksperimentiniais rezultatais [2], leidusiais įvertinti įvairias sąveikas, vykstančias peptido/JS/vandens sistemose. Tuo tarpu MD simuliacijų trajektorijos atskleidė struktūrinius pačio peptido pokyčius bei pokyčius jo artimiausioje aplinkoje.

*Reikšminiai žodžiai:* joniniai skysčiai, peptidas, BMR spektroskopija, molekulinės dinamikos (MD) simuliacijos, QM/MM skaičiavimai

### Padėka

Darbe aprašyti skaičiavimai vykdėti atviros prieigos skaičiavimo centro HPC "Saulėtekis" aukšto našumo superkompiuteriu Vilniaus universiteto Fizikos fakultete. Tyrimas finansuotas Lietuvos mokslo tarybos, grantu nr. S-MIP-22-74.

### Literatūra

- [1] Gomes, J. M., Silva, S. S. & Reis, R. L. Biocompatible ionic liquids: fundamental behaviours and applications. *Chemical Society Reviews* **48**, 4317–4335 (2019).
- [2] Richardt, A., Mrestani-Klaus, C. & Bordusa, F. Impact of ionic liquids on the structure of peptides proved by HR-MAS NMR spectroscopy. *Journal of Molecular Liquids* **192**, 9–18 (2014).

# Transformerių neuroninių tinklų taikymas DFT molekulinėms struktūroms optimizavimui

## Using transformer neural networks to speed up molecular structure optimization at DFT level

Rokas Garbačas, Stepas Toliautas

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

[rokas.garbacas@ff.stud.vu.lt](mailto:rokas.garbacas@ff.stud.vu.lt)

Transformerių neuroniniai tinklai yra santykinai nauja inovacija mašininio mokymo srityje [1], kuri leido sukurti pastaruoju metu labai išpopuliarėjusius didžiulius kalbos modelius (ChatGPT, LLaMA ir kt.) bei pasiekti puikių rezultatų vertimo ir vaizdų generavimo srityse. Ši architektūra su tam tikromis modifikacijomis taip pat puikiai prognozuoja baltymų struktūrą iš amino rūgščių sekos [2]. Pagrindinė transformerių NT stiprybė yra duomenų užkodavimas juos aprašančiais skaitiniais vektoriais bei dėmesio mechanizmas, kuris leidžia modeliui atpažinti net labai subtilias koreliacijas tarp duomenų.

Šio tipo tinklai puikiai tinka modeliuoti vienmates, t. y. išrikiuojamas, sistemas. Kita vertus, efektyvus jų taikymas duomenims daugiamatėje erdvėje yra aktyviai nagrinėjamas klausimas. Molekulių struktūra dažniausiai optimizuojama trimatėje erdvėje, tad efektyvus šios architektūros pritaikymas molekulių struktūrai modeliuoti yra netrivialus uždavinys. Taip pat atviras klausimas yra ir cheminės informacijos kodavimas vektoriniuose deskriptoriuose bei dėmesio mechanizme.

Ivairūs neuroniniai tinklai jau naudojami kvantinės chemijos skaičiavimuose ir leidžia atlikti molekulių struktūrų optimizaciją, skaičiuoti jėgas bei dipolinius momentus su asmenine įranga žymiai sparčiau nei atliekant tankio funkcionalo teorijos (DFT) skaičiavimus superkompiuterių mazguose [3, 4]. Pagrindiniai neuronų tinklais grįstų metodų trūkumai lyginant su DFT skaičiavimais yra empirinės, variacinio principu neparemtos energijos vertės, „juodosios dėžės“ efektas bei santykinai prastas duomenų generavimas molekuliniams junginiams, nepatenkantiems į mokymo duomenų rinkinį.

Šio tyrimo metu su transformerių neuroninių tinklų architektūra siekiame įvertinti, ar pavyksta naudojant egzistuojančių kvantinės mechanikos skaičiavimų rezultatų rinkinį gauti DFT tikslumo molekulinės struktūros pagrindinėje energijos būsenoje, naujų struktūrų skaičiavimams sunaudojant tik dalį įprastai reikalingų resursų (1 pav.).

Kaip atskaitos tašką pasirinkę atviros prieigos duomenų rinkinį [4], turintį apie 3.9 milijono molekulių struktūrų, optimizuotų B3LYP 6-31G(d) DFT metodu, išvalėme iš jo vienatomes ir nesąveikaujančias dviatomes sistemas, sugeneravome šių molekulių SMILES ir SELFIES deskriptorius ir taškinės simetrijos grupes pasinaudodami SOFI [5] algoritmu su tam tikromis modifikacijomis. Taip pat šiais duomenimis apmokėme transformerių neuroninį tinklą nuspėti

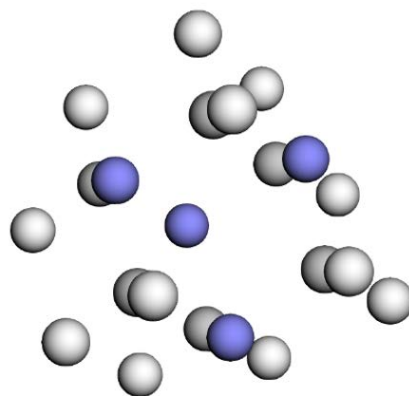
molekulių taškinės simetrijos grupės bei kitoms geometrinėms savybėms, pvz., plokštumui ir veidrodinei simetrijai.

```
[H] [C] [Branch1] [C] [H] [N] [C] [Branch1] [C] [H] [Branch1] [C] [H] [N]
[C] [Branch1] [C] [H] [Branch1] [C] [H] [N] [Ring1] [O] [C] [Branch1]
[C] [H] [Branch1] [C] [H] [N] [Branch1] [Branch2] [C] [Ring1] [=C]
[Branch1] [C] [H] [H] [C] [Ring1] [=N] [Branch1] [C] [H] [H]
```



Molekulė priklauso Td simetrijos grupei

| Atomai | x     | y     | z     |
|--------|-------|-------|-------|
| C      | -0.73 | 0.98  | 1.16  |
| C      | -0.94 | 0.72  | -1.20 |
| C      | -1.19 | -1.17 | 0.23  |
| C      | 1.19  | 1.17  | -0.23 |
| C      | 0.94  | -0.72 | 1.20  |
| C      | 0.73  | -0.98 | -1.16 |
| N      | -1.48 | 0.27  | 0.10  |
| N      | 0.72  | 0.74  | 1.10  |
| N      | 0.51  | 0.47  | -1.34 |
| N      | 0.25  | -1.48 | 0.14  |
| H      | -1.11 | 0.65  | 2.14  |
| H      | -0.92 | 2.06  | 1.07  |
| H      | -1.13 | 1.79  | -1.31 |
| H      | -1.47 | 0.19  | -2.00 |
| H      | -1.72 | -1.71 | -0.56 |
| H      | -1.57 | -1.52 | 1.20  |
| H      | 2.27  | 0.98  | -0.31 |
| H      | 1.02  | 2.25  | -0.34 |
| H      | 0.58  | -1.06 | 2.18  |
| H      | 2.02  | -0.92 | 1.14  |
| H      | 1.81  | -1.18 | -1.24 |
| H      | 0.22  | -1.52 | -1.96 |



1 pav. Tyrimo idėja. Molekulių struktūrų ir jų parametrų generavimas iš vienmačių identifikatorių pasitelkiant transformerių neuroninį tinklą

*Reikšminiai žodžiai: tankio funkcionalo teorija (DFT), molekulių struktūros optimizacija, mašininis mokymas, transformerių architektūra, dirbtiniai neuroniniai tinklai*

### Literatūra

- [1] Vaswani et al., *Attention is All you Need*, Advances in Neural Information Processing Systems (2017).
- [2] Jumper et al., *Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold*, Nature (2021).
- [3] Unke et al., *PhysNet: A Neural Network for Predicting Energies, Forces, Dipole Moments, and Partial Charges*, Journal of Chemical Physics and Computation (2019).
- [4] Xu et al., *Molecule3D: A Benchmark for Predicting 3D Geometries from Molecular Graphs*, arXiv (2021).
- [5] Gunde et al., *SOFI: Finding point group symmetries in atomic clusters as finding the set of degenerate solutions in a shape-matching problem*, The Journal of Chemical Physics (2024).

# Sviesto rūgšties struktūrinė analizė teoriniu DFT ir eksperimentiniu matricinės izoliacijos FTIR spektriniu metodu

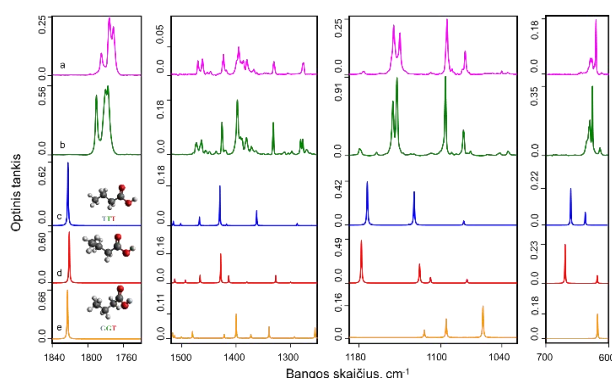
## Structural analysis of butyric acid by means of theoretical DFT and experimental matrix isolation FTIR spectroscopic method

Jogilė Mačytė<sup>1</sup>, Klaudija Pukalskaitė<sup>1</sup>, Justinas Čeponkus<sup>1</sup>, Valdas Šablinskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius  
[jogile.macyte@ff.vu.lt](mailto:jogile.macyte@ff.vu.lt)

Sviesto rūgštis dar kitaip vadinama butano rūgštimi ( $C_4H_8O_2$ ) yra apibūdinama kaip tiesi, trumpagrandė monokarboksirūgštis, kuri dėl savo struktūrinės sandaros gali turėti kelias konformacijas. Alifatinėje rūgšties grandinėje yra galimas sukimasis apie bet kurią viengubą C-C jungtį. Esant tam tikriems pasisukimo kampams molekulė yra stabili ir tai yra jos pagrindinė konformacinė įvairovės priežastis. Šios konformacinės struktūros gali skirtis tam tikromis fizikinėmis ir cheminėmis savybėmis, lemiančiomis jų reaktyvumą bei sąveikas skirtingose aplinkose [1]. Konformacinė įvairovė gali keisti šios molekulės reaktyvumą, bei tarpmolekulines sąveikas įvairiose cheminėse bei biologinėse aplinkose, o tai gali būti svarbu aiškinantis molekulės elgseną tirpaluose, dujinėje fazėje ar biologinėse sistemose. Šių konformerų struktūrinių ir energetinių skirtumų supratimas yra esminis jų taikymui tiek cheminėse, tiek biologinėse sistemose [2,3].

Pagrindinis šio darbo tikslas - nustatyti galimas konformacijas (žr. pav.1), naudojant matricinės izoliacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopiją kartu su teoriniais skaičiavimais.



1 pav. Sviesto rūgšties izoliuotos Argono 3 K (a) ir Neono 3 K (b) matricioje, FTIR sugerties spektrai kartu su teoriniais: (c) TTT, (d)  $G^\pm TT$ , (e)  $G^\pm G^\pm T$  konformerų IR sugerties spektrais. Skaičiavimai atlikti naudojant *MP2/cc-pVTZ*.

Žemos temperatūros matricinės izoliacijos metodas leidžia izoliuoti molekules nuo aplinkos sąveikų jas patalpinant į inertinių dujų molekulinis kristalus. Tokio bandinio infraraudonosios sugerties spektrai pasižymi siauromis spektrinėmis juostomis, leidžiančiomis identifikuoti skirtingas molekulių struktūras.

Teoriniai skaičiavimai buvo atlikti dviem skirtingais metodais. Pirmiausia buvo atlikti DFT skaičiavimai naudojant B3LYP funkcionalą su *cc-pVTZ* bazinių funkcijų rinkinį. Toliau skaičiavimai buvo tęsiami naudojant MP2 -Møller-Plesset plėtinį taikant tokį pat bazinių funkcijų rinkinį. Virpesinės modos buvo skaičiuojamos tiek harmoniniais, tiek anharmoniniais artiniais.

Teoriniai skaičiavimai prognozuoja tris stabilias sviesto rūgšties konformacijas. Tačiau atlikti eksperimentai argono ir neono matricose eksperimentiškai patvirtino tik dvi stebimas konformacijas. Taip pat, anharmoniniai skaičiavimai padėjo paaiškinti iki šiol neinterpretuotas eksperimentinių IR sugerties spektrų Fermi rezonanso juostas ir leido tiksliau priskirti virpesines modas C=O valentinių virpesių srityje.

Skaičiavimai atlikti Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto superkompiuterio "VU HPC" resursais.

*Reikšminiai žodžiai: sviesto rūgštis, matricinė izoliacija, FTIR, konformacijos.*

### Literatūra

- [1] I. Goldberg, J.S. Rokem, Organic and Fatty Acid Production, Microbial, in Encyclopedia of Microbiology, 3rd ed., M. Schaechter (Ed.), Academic Press, 2009, pp. 421–442.
- [2] Z. Xu, L. Jiang, 3.20 - Butyric Acid, in Comprehensive Biotechnology, 2nd ed., M. Moo-Young, Ed. (Academic Press, 2011), pp. 207–215.
- [3] M. Dwidar, J.-Y. Park, R.J. Mitchell, B.-I. Sang, The Future of Butyric Acid in Industry, The Scientific World Journal (2012), pp. 1–10.

# Cholino glicinato joninio skysčio ir vandens mišinių struktūrinių parametrų modeliavimas molekulinės dinamikos metodais

## Modelling the structural parameters of water and choline glycinate ionic liquid mixtures via molecular dynamics

Benjaminas Malmiga<sup>1</sup>, Dovilė Lengvinaitė<sup>1,2</sup>

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

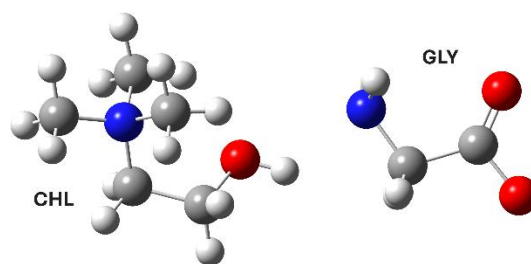
<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Cheminės fizikos institutas

[benjaminas.malmiga@ff.stud.vu.lt](mailto:benjaminas.malmiga@ff.stud.vu.lt)

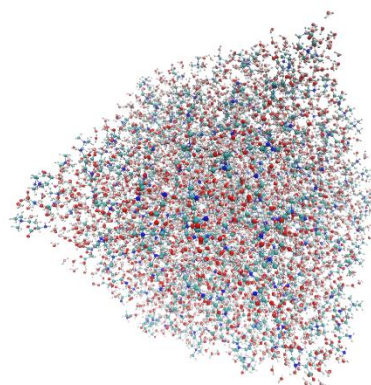
Joniniai skysčiai, kaip cholino glicinatas, yra druskos, kurioms būdinga skysta agregatinė būsena žemesnėje nei 100 °C temperatūroje[1]. Joniniai skysčiai yra labai plati junginių grupė, kadangi randama daug joninių porų kombinacijų, parenkant jas pagal pritaikymui reikalingas savybes, pavyzdžiui, gebėjimą pagerinti kitų molekulių tirpumą vandenyje, t.y. hidrotropinės savybės, netoksiškumas organizmams norint pritaikyti joninius skysčius medicinoje[2]. Įvertinant šių medžiagų neįprastų fizikinių savybių kilmę, tenka tirti tirpaluose vykstančias tarpmolekulinės sąveikas ir susidarančias artimąsias struktūras[3,4]. Šiame darbe, siekiant įvertinti cholino glicinato joninio skysčio ir vandens mišinių struktūrinius ypatumus pasitelkiami molekulinės dinamikos (MD) simuliacijų metodai.

Šiame darbe tiriama joninio skysčio joninė pora sudaryta iš katijono – cholino ir anijono – glicino, jonų geometrijos sukonstruotos naudojant GaussView 6, optimizuotos HF/6-31G\* baze pasitelkiant Gaussian 16 programą. Jėgų lauko parametrizavimui suskaičiuoti taškiniai krūviai, pasitelkiant RESP metodu. MD simuliacijos vykdytos Amber paketu, naudotas GAFF jėgų laukas, Tip4pew vandens modelis, simuliacijos dėžutės sukurtos Packmol programa. Atlikus MD simuliacijas atliekama struktūrinė analizė – paskaičiuojamos radialinės pasiskirstymo funkcijos.

Radialinė pasiskirstymo funkcija – nuo atstumo tarp cheminių grupių/atomų priklausanti funkcija, kurios vertės atitinka santykinę tikimybę atrasti pasirinktus atomus/grupes tam tikru atstumu nuo stebimo atomo/grupės – skaičiuodami šias funkcijas sąveikauti linkusioms grupėms, kaip glicino karboksi-grupė – galime įvertinti susidarančias artimąsias struktūras mišinyje, besiformuojančias jonines poras, vandenilinio ryšio sąveikas ir kt. Cholinui apskaičiuojamos RDF hidroksi bei ketvirtinio amonio grupėms, o glicinui skaičiuojamos amonio ir karboski grupių RDF – stebimos šių molekulių tarpusavio sąveikos bei sąveikos su vandens molekulėmis. Tokiu būdu sužinomi sistamai būdingi molekulių išsidėstymai, jų tendencingumas kintant tirpalo koncentracijai.



1 pav. cholino ir glicinato (CHL ir GLY) jonai



2 pav CHL-GLY simuliacijos dėžutė (0,1 M koncentracija)

*Reikšminiai žodžiai: joniniai skysčiai, modeliavimas, molekulinė dinamika*

### Literatūra

- [1] Aparicio and M. Atilhan., The Journal of Physical Chemistry B, 2012, 116, 9171–9185. PMID: 22738425.
- [2] Tanzi, M. Nardone, P. Benassi, F. Ramondo, R. Caminiti, and L. Gontrani, Journal of Molecular Liquids, 2016, 218, 39–49.
- [3] J. Booth, S. Abbott, and S. Shimizu, The Journal of Physical Chemistry B, 2012, 116, 14915–14921.
- [4] Gupta A., Kaur S., Kashyap H. K., Journal of Physical Chemistry B, 2019, 123, 2057–2069

## Impact of the Protein Environment on the Excited States of the Pigments in Photosynthetic Complexes

Gabrielė Rankelytė<sup>1</sup>, Jevgenij Chmeliov<sup>1,2</sup>, Andrius Gelžinis<sup>1,2</sup>, Leonas Valkūnas<sup>1,2</sup>

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

<sup>2</sup> Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, LT-10222, Vilnius  
gabriele.rankelyte@ftmc.lt

Pirmoji fotosistema (PSI) yra pati našiausia šviesą į energiją paverčianti sistema. Beveik visa fotonų energija yra panaudojama krūvių atskyrimo procesui reakcijos centruose vykdyti, taigi PSI kvantinis našumas yra beveik lygus vienetui [1]. Viena iš būtinų sąlygų tokiame aukštam našumui pasiekti yra labai greitai sužadinimo energijos pernaša tarp pigmentų (chlorofilų ir/ar karotenoidų) fotosistemos šviesorankos antenoje (LHCI). Sužadinimo energijos pernašai LHCI antenoje didelę įtaką turi tarp dviejų arba daugiau pigmentų susidarančios krūvio pernašos (CT) būsenos [2]. Žinomos CT būsenos ne iki galo paaiškina pirmosios fotosistemos sugerties ir emisijos spektruose stebimus reiškinius [3].

Pirmoji fotosistema sugeria ir fluorescuoja šviesą prie ilgiausių bangos ilgių, lyginant su kitais šviesorankos kompleksais. Augaluose PSI šviesorankos antena susideda iš keturių Lhca subkompleksų, kurie pasižymi panašia erdvine struktūra, tačiau demonstruoja skirtingas spektrines savybes.

Pigmentai šviesorankos antenoje yra apsupti kitų pigmentų bei baltymo. Norint nuodugniai išanalizuoti tiek eksitoninę, tiek ir krūvio pernašos būsenas lemiančią sąveiką tarp chlorofilo molekulių bei suprasti, kas lemia skirtumus tarp minėtųjų Lhca subkompleksų sugerties ir fluorescencijos spektrų, yra būtina įskaityti aplinkos molekulių daromą įtaką pigmentų sužadintosioms būsenoms.

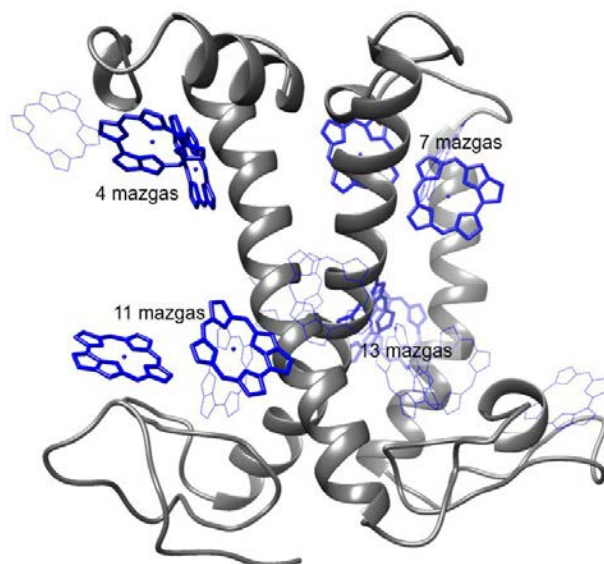
LHCI antenos erdvinė struktūra buvo gauta laisvai prieinamoje baltymų duomenų bazėje PDB [4], pasilikant PSI superkomplekso 1-4 grandines. Chlorofilo dimerai, kuriuose susidaro CT būsenos (keli jų pavaizduoti 1 pav.), ir juos supanti baltyminė aplinka buvo nagrinėjami dviem būdais. Pirmuoju metodu CT būsenos aptinkamos dimeruose atliekant TD-DFT sužadintųjų būsenų skaičiavimus vakuume. Siekiant įskaityti aplinkos molekulių įtaką šioms būsenoms, baltymas bei pigmentai aprašomi daliniais atominiais krūviais. Galiausiai, energijos poslinkis dėl aplinkos elektrostatinės įtakos apskaičiuojamas CDC metodu [5] pagal (1) formulę:

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

Čia  $\epsilon_{\text{eff}}$  yra aplinkos efektinė dielektrinė skvarba,  $m$  žymi tiriamąjį dimerą,  $q_i^{(m)}(s, s)$  ir  $q_i^{(m)}(0, 0)$  yra šio dimero atitinkamai sužadintosios ir pagrindinės būsenos daliniai krūviai.  $q_j^{(\eta)}(0, 0)$  yra tiriamąjį dimerą supančių

pigmentų ir baltymo daliniai krūviai.  $R_i^{(m)}$  ir  $R_j^{(\eta)}$  yra atitinkamai tiriamojo dimero ir aplinkos dalelių koordinatės.

Taikant antrąjį metodą TD-DFT skaičiavimai sužadintosioms būsenoms atliekami krūvių apsuptyje, kur kiekvienam baltyminei aplinkos atomui yra priskiriama krūvio vertė. Abiejų metodų taikymo atvejais rezultatai parodo galimybę antenoje susidaryti žemos energijos CT būsenoms. Rezultatus, gautus šiais dviem metodais galima palyginti tarpusavyje bei įvertinti jų validumą lyginant su LHCI antenos fluorescencinėmis savybėmis.



1 pav. Keturių dimerų mazgų pozicijos Lhca subkompleksuose baltymo grandinės atžvilgiu.

*Reikšminiai žodžiai:* Pirmoji fotosistema, krūvio pernašos būsenos, fotosintezė, baltyminė aplinka.

### Literatūra

- [1] R. Croce and H. Van Amerongen, Photosynth. Res. 116, 153-166 (2013).
- [2] M. Tros, V. I. Novoderezhkin, R. Croce, R. van Grondelle, and E. Romero, Phys. Chem. Chem. Phys. 22, 25720-25729 (2020).
- [3] T. Morosinotto, M. Mozzo, R. Bassi, and R. Croce, J. Biol. Chem. 280, 20612-20619 (2005).
- [4] Y. Mazar, A. Borovikova, I. Caspy, and N. Nelson, Nat. Plants 3 (2017).
- [5] J. Adolphs, F. Müh, M. E.-A. Madjet, and T. Renger, Photosynth. Res. 95, 197-209 (2008).

# Van der Valso sąveikos tarp resveratrolio ir heksagoninio boro nitrido spektroskopinis tyrimas

## Spectroscopic investigation of van der Waals interaction between resveratrol and hexagonal boron nitride

Paulius Rindzevičius<sup>1,2</sup>, Martynas Talaikis<sup>2</sup>, Andrej Dementjev<sup>2</sup>, Patrizia Lamberti<sup>3</sup>, Jevgenij Chmeliov<sup>2,4</sup>, Maksim Shundalau<sup>3,5</sup>, Ivan Halimski<sup>2</sup>, Renata Karpicz<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius, Lithuania

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

<sup>3</sup>Department of Information and Electrical Engineering and Applied Mathematics, University of Salerno, via Giovanni Paolo II 132, 84084 Fisciano, Italy

<sup>4</sup>Institute of Chemical Physics, Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

<sup>5</sup>Faculty of Physics, University of Warsaw, ul. Pasteura 5, 02-093 Warsaw, Poland

[paulius.rindzevicius@ftmc.lt](mailto:paulius.rindzevicius@ftmc.lt)

Hexagonal boron nitride (hBN) is a 2D material that is promising in a variety of applications, such as photoelectronics, photonics and medicine [1]. hBN can form van der Waals (vdW) complexes with various molecules, e.g., *trans*-stilbene [2] and porphyrin [3]. Recent works show that vdW interaction between hBN and organic molecules manifests in electronic and vibrational spectroscopy [2].

In this work, we studied the spectroscopic manifestation of vdW interaction between hBN and another organic compound – *trans*-resveratrol (RSV). RSV is a naturally occurring phenolic compound found in various plants, known for its anticancer, anti-inflammatory, antibacterial, antioxidant and neuro-protective properties [4].

RSV calculations, performed using B3LYP density functional and cc-pVTZ basis set, revealed vibrational modes of RSV molecule, their activity in vibrational spectra and other molecular quantities, such as dipole moment. Possible spectroscopic manifestations of interaction between RSV and hBN were calculated using pure exchange-correlation functional BPW91+d and cc-pVDZ basis set.

For spectroscopy experiments (IR, Raman, UV/Vis, and time-resolved fluorescence), RSV and hBN complexes were formed by preparing drop-cast films of pure RSV and RSV/hBN with different mass ratios.

Fluorescence (FL) spectra contain a peak at 390 nm. FL kinetics can be approximated with 2 exponents. Changes in FL spectra and kinetics are negligible, which indicates that the interaction between hBN and RSV is very weak. Measured excitation spectra showed that fluorescence of RSV/hBN samples at 390 nm is relatively more intense compared to a pure RSV.

Raman spectra of RSV and RSV/hBN samples contain 3 red-shifted Raman bands that are related to ring and –OH functional groups vibrations, which confirms a weak vdW interaction between RSV and hBN (Fig. 1). The possible explanation for the observed red shifts is the opposite signs of the excess charges on RSV and the hBN surface. The reason behind a very weak spectroscopic manifestation of vdW interaction compared to previously studied molecules, e.g., *trans*-stilbene [2], might be the

direction of RSV dipole moment. Total calculated dipole moment of RSV molecule is 1.88 D, however, its component that is perpendicular to a ring plane is only  $2 \cdot 10^{-3}$  D.

Further investigation of RSV and hBN complex formation should be conducted using different spectroscopic and microscopic approaches in order to evaluate not only the spectroscopic manifestation of vdW interaction, but also the morphology of the complex.

**Acknowledgments.** This work was supported by the Horizon Europe FLORIN project (No. 101086142). PR and IH additionally acknowledges Research Council of Lithuania (LMT; student's summer practice No. P-SV3-25-652).

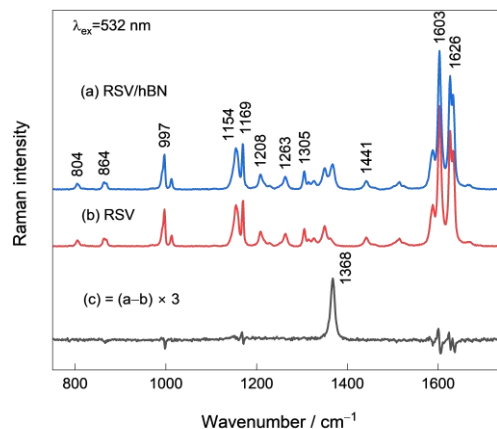


Fig. 1. Experimental Raman spectra of RSV and RSV/hBN complex.

**Key words:** resveratrol, boron nitride, van der Waals interaction, Raman spectra, fluorescence

### Literature

- [1] L. H. Li, Y. Chen. *Adv. Funct. Mater.* **26**, 2594 – 2608 (2016).
- [2] I. Halimski, et al., *Langmuir*. **41**, 7364-7375 (2025)
- [3] V. V. Korolkov, et al., *ACS Nano*. **9**, 10347-10355 (2015)
- [4] X. Liu, et al., *Molecules*. **30**, 23 (2025).

# Karbamido vandens tirpalų modeliavimas kvantinėms technologijoms

## Modeling urea water solutions for quantum technologies

Juozas Šulskus<sup>1</sup>, Vytautas Bubilaitis<sup>1</sup>, Jonas Franulevičius<sup>1</sup>, Raimundas Steponavičius<sup>2</sup>, Goda Bankovskaitė<sup>1</sup>, Mindaugas Mačernis<sup>1</sup>

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

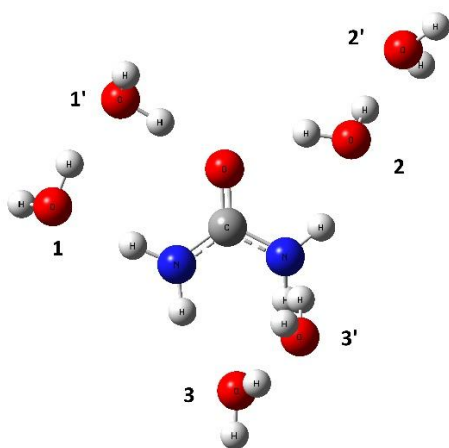
<sup>2</sup>UAB „Sprana“, Mokslininkų g. 6A, LT-08412 Vilnius

[juozas.sulskus@ff.vu.lt](mailto:juozas.sulskus@ff.vu.lt)

Kuriant spektroskopinės koncentruotų „neidealiųjų“ tirpalų realaus laiko artimosios infra-raudonosios (AIR) spektrometrijos analizatorius būtina suprasti, kokie molekulių kompleksai gali susidaryti tirpaluose, kokios yra šių vandenilinių ryšių pagrįstų kompleksų gyvavimo trukmės, kokie jų virpesinių spektrų ypatumai AIR srityje. Vandenilinių ryšių modeliavimas pats savaime yra sudėtinga užduotis [1].

Darbe buvo tiriami karbamido, biureto ir vandens molekulių kompleksai, kurie gali susidaryti vandens tirpale, ir šių kompleksų santykinis stabilumas ir sužadinti virpesiniai spektrai AIR spektrinėje srityje (12500–4000 cm<sup>-1</sup>).

Norint apskaičiuoti virpesinį spektrą šioje srityje, reikia tirti sužadinimus, susijusius su virpesiniais virštoniais ir sudėtiniais dažniais, įskaitant 3-ios ir 4-os eilės modų sužadinimus. 1 pav. pavaizduota urea molekulė ir 6 vandens molekulės vandenilinių ryšių sudarančios susietą kompleksą. 1, 1' 2, 3 ir 3' vandens molekulės sudaro stipriausius vandenilinius ryšius su urea, o 2' molekulė jau formuoja tolimesnį vandenilinių ryšių tinklą.



1 pav. Karbamido ir šešių vandens molekulių kompleksas.

Įvertinant susidarančių molekulinį kompleksų stabilumą, jų kompleksų geometrinius parametrus ir sužadintus virpesinius spektrus, kompiuteriniai skaičiavimai buvo atliekami naudojant Gaussian 16 [2] ir Gamess US [3] programas. Sužadintos virpesinės būsenos buvo skaičiuojamos normalinių modų bazėje konfigūracijų superpozicijos, trikdžių teorijos ir suderintinio virpesinio lauko metodais [2, 3].

Paskutinio dešimtmečio darbai rodo, kad kvantinės chemijos metodai leidžia apskaičiuoti vandens molekulės sužadintų virpesių dažnius didesniu kaip 1 cm<sup>-1</sup> tikslumu naudojant tikslus ICMRCI metodus ir aug-cc-pCVnZ bazines funkcijas [4] iki 15000 cm<sup>-1</sup> virpesinių būsenų energijų. Mūsų tikslas buvo ištirti, kiek tiksliai AIR srityje galima apskaičiuoti virpesinius spektrus naudojant paprastesnius tankio funkcionalo metodus.

Vandens molekulės skaičiavimai parodė (1 lentelė), kad CAM-B3LYP/aug-cc-pvtz metodas leidžia nustatyti virpesinius dažnius 3 ir aukštesnių sužadinimų modams maždaug 3% tikslumu (skirtumas nuo eksperimentinių rezultatų siekia apie 300 cm<sup>-1</sup>).

1 lentelė. Vandens molekulės vakuume skirtingais, metodais ([1] ir [2]) apskaičiuoti sužadintų virpesių dažniai (cm<sup>-1</sup>).

| Virpesinė<br>būsenos (sim.,<br>deform.,<br>antisim.) | Harm. ir<br>aukštesnių<br>sužadinimų,<br>[2], [3] | Anharm.,<br>[2] | VSCF, [3] | Exp. [4] |
|------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|-----------------|-----------|----------|
| (100)                                                | 3833.9                                            | 3668.7          | 3767.7    | 3657.05  |
| (010)                                                | 1620.8                                            | 1566.8          | 1614.8    | 1594.74  |
| (001)                                                | 3936.3                                            | 3758.3          | 3688.6    | 3755.92  |
| (200)                                                | 7667.8                                            | 7257.4          | 7333.1    | 7201.54  |
| (020)                                                | 3241.6                                            | 3095.3          | 3368.0    | 3151.63  |
| (002)                                                | 7872.5                                            | 7425.3          | 7482.5    | 7445.04  |
| (101)                                                | 5454.7                                            | 5221.4          | 5275.9    | 5234.97  |
| (110)                                                | 7770.2                                            | 7270.8          | 7510.8    | 7249.81  |
| (011)                                                | 5557.1                                            | 5308.0          | 5365.4    | 5331.26  |
| (301)                                                | 15569.2                                           | 16047.2         | 14320.4   | 13830.93 |
| (310)                                                | 13358.0                                           | 13907.9         | 12038.4   | 12139.31 |

Skaičiavimai atlikti naudojant Vilniaus universiteto „VU HPC“ Saulėtekio superkompiuterio išteklius Fizikos fakultete. Darbas yra Lietuvos mokslo tarybos Eureka tinklo Taikomųjų kvantinių technologijų projekto Nr. 10-052-P-01-012 dalis.

*Reikšminiai žodžiai:* AIR spektrometrija, vandenilinių ryšių kompleksai, kvantinės mechanikos skaičiavimai.

## Literatūra

- [1] M. Macernis, B.P. Kietis, J. Sulskus, S. H. Lin, M. Hayashi, L. Valkunas, Chem. Phys. Lett. **446**, 223–226 (2008)
- [2] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, et al., Gaussian 16, Revision C.01. (Gaussian Inc.: Wallingford CT, 2016).
- [3] M. W. Schmidt, K. K. Baldridge, J. A. Boatz, S. T. Elbert, M. S. Gordon, J. H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K.A. Nguyen, S. Su, et al., J. Comput. Chem. **14**, 1347 (1993).
- [4] O. L. Polyansky, R. I. Ovsyannikov, A. A. Kyuberis, L. Lodi, J. Tennyson, N. F. Zobov, J. Phys. Chem. A **117**, 9633 (2013).

# Daugiafunkciniai anglies pagrindo kvantiniai taškai aplinkosaugos ir medicinos taikymams

## Multifunctional carbon-based quantum dots for environmental and medical applications

Martynas Zalieckas,<sup>1</sup> Hanna Maltanova<sup>2</sup>, Nikita Belko<sup>2</sup> and Polina Kuzhir<sup>2</sup>, Katsiaryna Charniakova<sup>1</sup>  
Renata Karpicz<sup>1</sup>

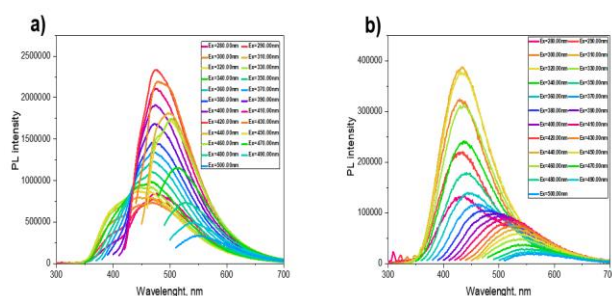
<sup>1</sup> Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio Ave. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania.

<sup>2</sup> Department of Physics and Mathematics, University of Eastern Finland, FI-80100 Joensuu, Finland.

[martynas.zalieckas@ftmc.lt](mailto:martynas.zalieckas@ftmc.lt)

Chinonų pagrindu sukurti vaistai, tokie kaip doksorubicinas (DOX), daunorubicinas ir kiti, plačiai taikomi vėžio chemoterapijoje, pasižymi reikšmingu šalutiniu poveikiu, įskaitant išsiplėtusią kardiomiopatiją ir širdies nepakankamumą [1,2]. Siekiant sumažinti šias nepageidaujamas pasekmes, intensyviai plėtojamos kontroliuojamos nanonešiklių pagrindu veikiančios vaistų tiekimo sistemos, užtikrinančios tikslingą preparatų išlaisvinimą specifiniuose audiniuose. Pastaruoju metu vis daugiau dėmesio sulaukia sunkiųjų metalų neturintys anglies pagrindo kvantiniai taškai, tokie kaip grafeno kvantiniai taškai (GQD), anglies kvantiniai taškai (CQD) bei anglies nitrido kvantiniai taškai (CNQD). Šie nanostruktūriniai junginiai, pasižymintys pažangiomis paviršiaus funkcionalizavimo bei luminescencinėmis savybėmis, suteikiančiomis galimybę kontroliuoti nanonešiklio–vaisto kompleksų lokalizaciją ląstelės viduje, laikomi perspektyvia teranostikos platforma, galinčia vienu metu atlikti diagnostinę ir terapinę funkciją.

Teranostiniams agentams keliami keli esminiai reikalavimai: jie privalo užtikrinti tikslinį vaisto pristatymą, būti tirpūs vandenyje, stabilūs fiziologinėmis sąlygomis bei biologiškai suderinami. Be to, itin svarbu, kad jų farmakodinamika ir kaupimasis navikiniame audinyje būtų sekami optiniais metodais. [3].



1 pav. Nuo žadinimo bangos ilgio priklausanti fluorescencija: **a)** iš urėjos gautų ir **b)** iš tiourėjos gautų CNQDs

Šiame tyrime daugiausia dėmesio buvo skiriama anglies nitrido kvantinių taškų (CNQD) stabilumo ir optinių savybių bei jų junginių su priešvėžinėmis molekulėmis charakterizavimu, taikant spektroskopinius metodus.

CNQD buvo sintetinti hidroterminės sintezės būdu, naudojant urėją/tiourėją ir citrinos rūgštį. Gauti mėginiai buvo ištirti registruojant sugerties bei fluorescencijos

spektus, fluorescencijos gesimo laikus, Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių (FT-IR) bei rentgeno fotoelektroninės spektroskopijos (XPS) duomenis. Taip pat buvo ištirta CNQD sąveika su doksorubicinu, keičiant pH aplinką.

Nustatyta, kad gautų bandinių kvantinis našumas siekia apie 10 %. FT-IR ir XPS tyrimai patvirtino anglies nitrido struktūros susidarymą, o nuo žadinimo bangos ilgio priklausoma fluorescencija pademonstravo kvantiniams taškams būdingą charakteringą elgseną. Mišiniuose su doksorubicinu buvo užfiksuotas šiam vaistui būdingas pH jautrumas, leidžiantis kontroliuoti vaisto išsiskyrimą keičiant aplinkos pH bei reguliuojant mišinio komponentų santykį.

*Reikšminiai žodžiai: Anglies pagrindo kvantiniai taškai, anglies nitridas, spektroskopija, fluorescencija, doksorubicinas. nanonešikliai.*

### Literatūra

1. Kaushik, N., Borkar, S. B., Nandanwar, S. K., Panda, P. K., Choi, E. H., & Kaushik, N. K. (2022). Nanocarrier cancer therapeutics with functional stimuli-responsive mechanisms. In *Journal of Nanobiotechnology* (Vol. 20, Issue 1, p. 152). BioMed Central Ltd. <https://doi.org/10.1186/s12951-022-01364-2>
2. Kciuk, M., Gielecińska, A., Mujwar, S., Kołat, D., Kałuzińska-Kołat, Z., Celik, I., & Kontek, R. (2023). Doxorubicin-An Agent with Multiple Mechanisms of Anticancer Activity. <https://doi.org/10.3390/cells12040659>
3. Azam, N., Ali, N., & Khan, T. J. (n.d.). *Carbon Quantum Dots for Biomedical Applications: Review and Analysis*. <https://doi.org/10.3389/fmats.2021.700403>

# $\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D^{*0} K^-$ skilimo klasifikavimas taikant mašininio mokymosi algoritmą XGBoost ir SHAP požymių svarbos analizę

## Classification of $\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D^{*0} K^-$ decay using the machine learning algorithm XGBoost and SHAP feature contribution analysis

Neilas Beniušis<sup>1</sup>, Mindaugas Šarpis<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius  
neilas.beniušis@ff.stud.vu.lt

LHCb eksperimente atrastos pentakvarkų būsenos  $P_c$  žymi reikšmingą pažangą hadronų spektroskopijoje. 2015 m. atlikus  $\Lambda_b^0 \rightarrow J/\psi K^- p$  skilimo amplitudės analizę,  $J/\psi p$  invariantinės masės skirstinyje buvo aptiktos dvi rezonansinės struktūros, kurios tapo pirmuoju aiškiu barioninių pentakvarkų įrodymu [1]. Vėlesnis tyrimas su didesnėmis duomenų imtimis patikslino šiuos atradimus, identifikuodamas tris skirtingas ir palyginti siauras būsenas:  $P_c(4312)$ ,  $P_c(4440)$  ir  $P_c(4457)$  [2]. Šie rezultatai patvirtina egzotinių hadronų egzistavimą ir skatina toliau tirti jų savybes bei susidarymo mechanizmus.

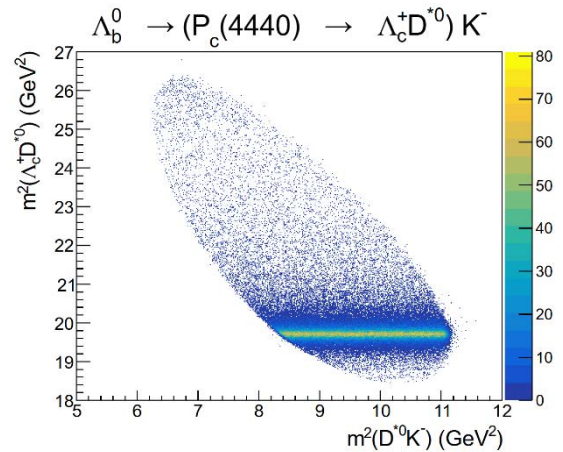
Šiame darbe tiriama  $\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D^{*0} K^-$  skilimo kanalas, remiantis simuliuotais LHCb detektoriaus duomenimis. Monte Carlo imtys generuojamos naudojant RapidSim, greitų simuliacijų įrankį, sukurtą hadronų skilimų tyrimams. Skilimo produktų kinematiniai skirstiniai nagrinėjami Dalitz diagramomis, kurios leidžia tiesiogiai vizualizuoti su pentakvarkų būsenomis siejamas rezonansines struktūras (1 pav.). Tai sudaro pagrindą taikyti klasifikavimo metodus, siekiant atskirti signalo indėlį nuo nerezonansinio  $\Lambda_c^+ D^{*0} K^-$  fono.

Toliau analizėje taikomas XGBoost algoritmas, kuris yra vis dažniau naudojamas didelės energijos dalelių fizikos analizėje [3]. Šis metodas tinka atvejams, kai reikia analizuoti daug tarpusavyje koreliuojančių kinematinų dydžių, nes algoritmas gali apdoroti didelius ir sudėtingus duomenų rinkinius be aiškių prielaidų apie kintamųjų nepriklausomumą. Sujungiant duomenis iš invariantinių masių, spirališkumo (helicity) kampų ir judesio kiekio pasiskirstymų, metodas leidžia aptikti signalui būdingus dėsningumus, kurie neatsiskleidžia vieno kintamojo projekcijose. Tai leidžia nustatyti fazės erdvės sritis, kuriose signalas dominuoja, ir efektyviau slopinti foną nei taikant paprastus slenksčio kriterijus.

Modelio veikimas bus kiekybiškai įvertintas naudojant ROC kreives ir susijusius statistinius rodiklius, o siekiant interpretuoti klasifikatoriaus rezultatus bus taikomas SHAP (SHapley Additive exPlanations) metodas. Šis modelis priskiria svarbos reikšmę kiekvienam įvesties kintamajam [4]. Tai leidžia stebėti, kaip stipriai konkretus kintamasis prisideda prie signalo ir fono atskyrimo tiek pavieniauose įvykiuose, tiek visoje imtyje. SHAP leidžia tiesiogiai susieti klasifikatoriaus rezultatų patikimumą su tiriamais kintamaisiais. Šis metodas parodo, ar modelis daugiausiai remiasi invariantine mase, kampiniu pasiskirstymu ar judesio

kiekiu. Tokiu būdu analizė užtikrina, kad pasirinktas klasifikavimo metodas būtų pagrįstas fiziškai prasmingais kintamaisiais, sumažina klaidingų koreliacijų įtaką ir gali suteikti papildomų įžvalgų apie nagrinėjamų skilimo procesų dinamiką.

Šiuo tyrimu siekiama parodyti, kaip Dalitz diagramų integravimas su šiuolaikiniais mašininio mokymosi metodais gali suteikti nuoseklią struktūrą pentakvarkų savybių tyrimams  $\Lambda_b^0$  skilimo procesuose. Tokia metodologija gali pagerinti būsimų tyrimų jautrumą ir suteikti platesnį supratimą apie egzotinių barioninių rezonansų pasireiškimą sudėtinguose skilimo kanaluose.



1 pav. Dalitz diagrama, vaizduojanti simuliuotą  $\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D^{*0} K^-$  skilimą su rezonansine juosta, atitinkančia  $P_c(4440)$  būseną.

*Reikšminiai žodžiai: pentakvarkai, Dalitz diagrama, Monte Carlo, XGBoost, SHAP, RapidSim*

### Literatūra

- [1] R. Aaij et al. (LHCb Collaboration), *Observation of  $J/\psi p$  resonances consistent with pentaquark states in  $\Lambda_b^0 \rightarrow J/\psi K^- p$  decays*, Phys. Rev. Lett. 115, 072001 (2015).
- [2] R. Aaij et al. (LHCb Collaboration), *Observation of a narrow pentaquark state,  $P_c(4312)^+$ , and of the two-peak structure of the  $P_c(4450)^+$* , Phys. Rev. Lett. 122, 222001 (2019).
- [3] A. Radovic et al., *Machine learning at the energy and intensity frontiers of particle physics*, Nature 560, 41–48 (2018).
- [4] S. Lundberg and S.-I. Lee, *A unified approach to interpreting model predictions*, Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), 30, 4765–4774 (2017).

## TMVA ir giluminio neuroninio tinklo klasifikatorių palyginimas signalo ir fono atskyrimui

$$\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D^{*0} K^- \text{ skilime LHCb eksperimente CERN'e}$$

## Comparison of TMVA and deep neural network classifiers for signal–background separation

$$\text{in } \Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D^{*0} K^- \text{ decays with the LHCb experiment at CERN}$$

Eliza Holvoet<sup>1</sup>, Mindaugas Šarpis<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Vilnius, Lietuva

El. paštas: eliza.holvoet@ff.stud.vu.lt

Pentakvarkai yra egzotinės hadroninės būsenos, kurias tikimasi rasti kanaluose, tokiuose kaip  $\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D^{*0} K^-$ . Atliekant pentakvarkų paieškas ir tyrimus, svarbu patikimai atskirti signalą nuo triukšmo. Kinematiniai atrankos kriterijai, taikomi tokiems kintamiesiems kaip skersinis judesio kiekis  $p_T$ , invariantinė masė ar sunkiojo bario skilimo taško koordinatų atkūrimo raiška. Taikant šiuos kriterijus galima sumažinti triukšmą, tačiau nėra atsižvelgiama koreliacijas tarp kintamųjų. Ši problema sprendžiama, naudojant multivariacinius metodus, kurie leidžia pagerinti signalo ir triukšmo atskyrimą vienu metu atsižvelgdami į daug kintamųjų bei ryšius tarp jų.

ROOT yra CERN sukurta, dalelių fizikoje bei kitose mokslo srityse plačiai naudojama atviro kodo duomenų analizės platforma, jos posistemė TMVA (Toolkit for Multivariate Analysis) suteikia galimybę naudoti skirtingus mašininio mokymosi algoritmus tokius kaip BDT (Boosted Decision Tree) ar MLP (Multi-Layer Perceptron) duomenų analizei ir pateikia lengvai interpretuojamus rezultatus.

Giluminiai neuroniniai tinklai (DNN) yra lankstūs modeliai, gebantys modeliuoti sudėtingas netiesines priklausomybes tarp požymių. Skirtingai nuo klasikinių metodų, tokių kaip BDT ar MLP, jie turi daugelį paslėptų sluoksnių, kuriuose neuronai leidžia tinklui išmokyti vis sudėtingesnius ryšius tarp kintamųjų. Todėl jie tinkami užduotims, kai kintamieji stipriai yra stipriai koreliuoti.

Tyrime palyginti mašininio mokymosi klasifikatoriai TMVA BDT, TMVA MLP ir gilusis neuroninis tinklas (DNN), skirti skilimo  $\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D^{*0} K^-$  signalui atskirti nuo kombinatorinio triukšmo naudojant Monte Carlo simuliaciją. Šiam duomenų rinkiniui naudotas RapidSim, generavimo įrankis, sukurtas greitai skilimų simuliacijai dalelių fizikoje. Pasirinktas  $pK\pi K$  fonas, atitinkantis tą pačią galutinę būseną kaip ir signalas, bet galintis kilti iš kitų, su skilimu nesusijusių įvykių. Sugeneruotiems įvykiams taikytas detektoriaus rezoliucijos modeliavimas (smearing), imituojantis matavimo netikslumus, bei įtraukta LHCb detektoriaus geometrija, apribojanti registruojamų dalelių impulsus ir kryptis pagal realaus detektoriaus savybes.

Sugeneruoti duomenys ROOT aplinkoje buvo saugomi TTree struktūroje. Iš jos išgauti požymiai, naudoti klasifikatorių treniravimui: motininės dalelės  $\Lambda_b^0$  judesio kiekis  $p$  ir skersinis judesio kiekis  $p_T$ , taip pat galutinių dalelių judesio kiekiai ( $p, K^-, \pi^+$ )  $p$  ir skersiniai judesio kiekiai  $p_T$ .

Pagrindinis rodiklis klasifikatorių palyginimui yra ROC (receiver operating characteristic) kreivės plotas AUC (area under curve), nusakantis bendrą gebėjimą atskirti signalą nuo fono nepriklausomai nuo slenksčio. Taip pat vertinamas signalo efektyvumo ir fono atmetimo kompromisas, t. y. kiek signalo įvykių išlaikoma maksimaliai sumažinant foną. Analizuotas modelių stabilumas: ar naudoja platų požymių rinkinį, ar tik kelias akivaizdžias kombinacijas. Taip pat tikrinta generalizacija, t. y. ar klasifikatoriai lieka efektyvūs ne tik su treniravimo, bet ir su naujais (nepriklausomais) duomenimis ir ar nėra per-treniruojami prie treniruočių imties.

Tikimasi, kad tiek TMVA metodai (BDT ir MLP), tiek giluminiai neuroniniai tinklai (DNN) parodys aukštą signalo ir fono atskyrimo tikslumą. DNN analizėje numatoma tirti skirtingas architektūras ir hiperparametrus, siekiant nustatyti, ar giluminio mokymosi technikos suteikia papildomą vertę šio tipo uždaviniams, o palyginimas su TMVA metodais leis įvertinti, ar klasikiniai algoritmai išlieka pakankami, ar DNN gali pasiūlyti geresnį veikimą sudėtingose analizėse.

*Reikšminiai žodžiai:* pentakvarkai, LHCb, RapidSim, TMVA, BDT, MLP, klasifikacija, giluminiai tinklai.

### Literatūra

- [1] R. Aaij et al. (LHCb Collaboration), *Observation of  $J/\psi p$  resonances consistent with pentaquark states in  $\Lambda_b^0 \rightarrow J/\psi K^- p$  decays.*
- [2] R. Aaij et al. (LHCb Collaboration), *First observation of the  $\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D_s^- K^+ K^-$  decay and search for pentaquarks in the  $\Lambda_c^+ D_s^-$  system.*

# Teoriniai sudėtingų daugiakrūvių volframo jonų spinduliuotės spektrai

## Theoretical emission spectra of complex multicharged tungsten ions

Rasa Karpuškienė, Romas Kisielius, Šarūnas Mikolaitis

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

[rasa.karpuskiene@tfai.vu.lt](mailto:rasa.karpuskiene@tfai.vu.lt)

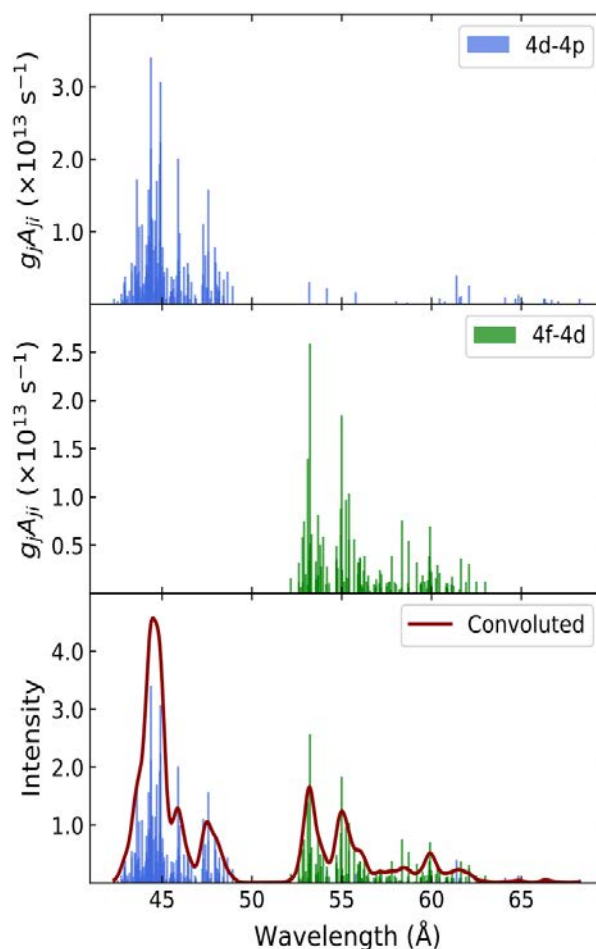
Dėl savo specifinių savybių volframas yra sistemingai ir plačiai naudojamas šiuolaikiniuose termobranduolinės sintezės įrenginiuose, tokiuose kaip dabar veikiančiuose JET, MAST ar vystomame ITER bei numatomame statyti DEMO. Jeigu reaktorių projektavimo fazėje buvo planuojama volframą naudoti kaip divertoriaus vidinių paviršių dangos medžiagą, tai palaipsniui pereinama prie idėjos volframą taikyti ir paties reaktoriaus vidinių paviršių dangai. Kadangi termobranduolinės sintezės metu pasiekama labai aukšta plazmos temperatūra, tiek reaktoriuje, tiek ir divertoriuje gali susidaryti įvairių jonizacijos laipsnių sužadinti volframo jonai, kurie dalį energijos išspinduliuoja į aplinką, taip sukeldami tam tikrus energijos nuostolius. Todėl reikia modeliuoti skirtingų volframo jonų spinduliuotę, tam pritaikant teoriškai nustatytus atominius parametrus.

Šiame tyrime mes naudojame VU TFAI išvystytą kvazireliatyvistinį Hartrio ir Foko artinį (QRHF) sudėtingų daugiakrūvių volframo jonų spektriniam parametrui nustatyti. Detaliau šio artinio išskirtinės savybės aprašytos [1] bei jame pateikiamuose šaltiniuose. QRHF artinys buvo pritaikytas visiems volframo jonams, pagrindinėje konfigūracijoje turintiems atvirą 4d elekt-ronų sluoksnį, t.y.  $W^{37+}$  –  $W^{28+}$  jonams. Buvo nustatytos jonų lygmenų energijos ir gyvavimo laikai, multipolinių (E1, E2, E3, M1, M2) radiacinių šuolių parametrai bei kitos spektroskopinės charakteristikos, ypatingą dėmesį skiriant šuoliams tarp žemiausių trijų konfigūracijų lygmenų bei įvertinant tų šuolių parametrų tikslumą. Pagrindiniai tyrimo rezultatai pateikti [2] ir šioje publikacijoje esančiuose šaltiniuose.

Dėl didelės ištirtų atominių spektroskopinių duomenų apimties nėra įmanoma publikuoti pilnus skaičiavimo rezultatų rinkinius, nors visi šie duomenys yra reikalingi ir naudojami kitų tyrėjų. Norint padaryti turimus duomenis kuo plačiau prieinamus ir tinkamus spektrų modeliavimo reikmėms, VU TFAI buvo sukurta ir nuolat vystoma bei papildoma naujais duomenimis atominių duomenų bazė astrofizikinei, technologinei ir laboratorinei plazmai modeliuoti ADAMANT [3]. Šioje duomenų bazėje greta kitų cheminių elementų atominių parametrų mes talpiname visus nustatytus spektroskopinius parametrus volframo jonams, neapsiribodami tik stipriausiomis linijomis. Sukurta grafinė vartotojo sąsaja leidžia vartotojui pasirinkti dominantą cheminį elementą, reikalingą parametrai bei diapazoną, norimą skaičiavimo metodą, taip pat ir skirtingą duomenų išvedimo formatą.

Mes demonstruojame savo tyrimų apibendrinimą, pateikdami  $W^{35+}$  jono elektrinių dipolinių šuolių

emisijos tikimybes  $g_j A_{ji}$  (atskirai 4d – 4p bei 4f – 4d šuolių grupėms) bei galutinį spinduliuotės intensyvumo spektrą, gautą taikant Gauso tipo profilį (linijos plotis  $\sigma=0.2$  Å).



1 pav. Volframo jono  $W^{35+}$  elektrinių dipolinių šuolių tikimybės ir spinduliavimo intensyvumai 42 – 68 Å bangų ilgių diapazone.

*Reikšminiai žodžiai: termobranduolinės sintezės energija, radiacinių šuolių tikimybės, spinduliuotės spektras, duomenų bazės, kvazireliatyvistinis artinys.*

### Literatūra

- [1] P. Bogdanovich, R. Kisielius, At. Data Nucl. Data Tables. 98, 557 (2012).
- [2] R. Karpuškienė, R. Kisielius, At. Data Nucl. Data Tables. 161, 101693 (2025)
- [3] <http://www.adamant.tfai.vu.lt/database>

# ANTROSIOS EILĖS RELĖJAUS-ŠRĖDINGERIO TRIKDYMŲ TEORIJA GRASP2018 PROGRAMINIAM PAKETUI: TRIJŲ DALELIŲ FEINMANO DIAGRAMOS ĮTAKA KAMIENO- VALENTINĖMS KORELIACIJOMS

## Second-order Rayleigh-Schrödinger perturbation theory for the GRASP2018 package: three-particle Feynman diagram contribution to core-valence correlations

Gediminas Gaigalas<sup>1</sup>, Pavel Rynkun<sup>1</sup>, Laima Kitovienė<sup>1</sup> ir Mantas Kučinskas

<sup>1</sup>Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Vilnius, Lietuva  
mantas.kucinskas@ff.stud.vu.lt

Šiame darbe pateikiama antrosios eilės Relėjaus-Šrėdingerio trikdymų teorijos (RSMBPT) [1] tolesnė plėtra GRASP2018 programiniam paketui, pagrįstam daugiakonfigūraciniu Dirako, Hartio ir Foko (MCDHF) metodu ir reliatyvistiniu konfigūracijų sąveikos (RCI) metodu. RSMBPT metodas buvo išplėstas įtraukiant trečio ir ketvirto tipo kamieno-valentines koreliacijas, kurios aprašomos trijų dalelių Feinmano diagrama. Naujas papildymas prisideda jau prie ankstesniuose G. Gaigalo, P. Rynkun ir L. Kitovienės darbuose [2-6] minėtų kamieno-valentinių (KV), kamieno (K), kamieno-kamieno (KK) ir valentinių-valentinių (VV) koreliacijų.

Kadangi šios kamieno-valentinės koreliacijos yra aprašomos trijų dalelių Feinmano diagrama, papildomai buvo atlikti pakeitimai ir išplėtimai Grasp programos bibliotekoje librang, leidžiantys apskaičiuoti šios diagramos sukinines-kampines dalis. Šiame darbe, išplėtotas metodas buvo pritaikytas atrinkti svarbiausias konfigūracinių būsenų funkcijas. Darbe, kaip metodo taikymo pavyzdys, pateikiami Ne II energijos struktūros ir gyvavimo trukmės skaičiavimai.

Mes apskaičiavome dvylika energijos žemiausių lygmenų, priklausančių  $2s2p^6, 2s^22p^4[3s, 3d]$  konfigūracijoms su  $J=1/2$  ir  $2s^22p^5, 2s^22p^43p$  konfigūracijoms su  $J=1/2, 3/2$  ir gyvavimo trukmę  $2s2p^6^2S_{1/2}$  būsenai.

Reikia paminėti, jog pasirinktas išeitinių konfigūracijų rinkinys turi orbitales su skirtingais pagrindiniais kvantiniais skaičiais  $n=2, 3$ . Šiam rinkiniui priklausančių konfigūracijų orbitalių radialiosios funkcijos buvo skaičiuojamos standartiniu MCDHF metodu. Vėlesni MCDHF skaičiavimai, įtraukia KV+K+KK+VV koreliacijas. Juose viengubi ir dvigubi pakeitimai yra leidžiami iš  $1s$  kamieno ir iš  $2s, 2p, 3s, 3p, 3d$  valentinių orbitalių į virtualių orbitalių rinkinius (VOR):  $VOR_1 = [4s, 4p, 4d, 4f], -VOR_5 = [8s, 8p, 8d, 8f, 8g]$ .

Konfigūracinių būsenų erdvė RSMBPT metode suskirstoma į tris poerdvius:  $F, F'$  ir  $G$  [2]. Sluoksnis  $1s$  yra apibrėžiamas kamieniu ir atitinka  $F$  poerdvį,  $2s, 2p, 3s, 3p, 3d$  sluoksniai yra apibrėžiami valentiniais ir atitinka  $F'$  poerdvį. Virtualios orbitalės nuo  $VOR_1$  iki  $VOR_5$  yra priskiriamos  $G$  poerdviui. Toks paskirstymas atitinka standartinius GRASP2018 skaičiavimuose naudojamus terminus.

Lentelėje pateiktas energijos lygmenų apskaičiuotų su RSMBPT metodu palyginimas su NIST duomenų bazėje rekomenduojamomis vertėmis.

1. lentelė. Energijų ( $\text{cm}^{-1}$ ) palyginimas tarp NIST duomenų bazės rekomenduojamų verčių ir apskaičiuotų RSMBPT metodu.

| Būsena                | $E_{NIST}$ | $(E_{NIST} - E_{RSMBPT})/E_{NIST}, \%$ |
|-----------------------|------------|----------------------------------------|
| $2s^22p^5^2P_{3/2}$   | 0          | 0                                      |
| $2s^22p^43p^4P_{3/2}$ | 246415     | -0.08                                  |
| $2s^22p^43p^4D_{3/2}$ | 249696     | -0.14                                  |
| $2s^22p^43p^2D_{3/2}$ | 251522     | -0.43                                  |
| $2s^22p^5^2P_{1/2}$   | 780        | 2.17                                   |
| $2s^22p^43p^4P_{1/2}$ | 246598     | -0.07                                  |
| $2s^22p^43p^4D_{1/2}$ | 249840     | -0.10                                  |
| $2s^22p^43p^2S_{1/2}$ | 252798     | -0.42                                  |
| $2s2p^6^2S_{1/2}$     | 217048     | 0.68                                   |
| $2s^22p^43s^4P_{1/2}$ | 219947     | 0.98                                   |
| $2s^22p^43s^2P_{1/2}$ | 224699     | 0.94                                   |
| $2s^22p^43s^2S_{1/2}$ | 276677     | 0.41                                   |

*Reikšminiai žodžiai: konfigūracijų maišymasis, sukininis-kampinis integravimas, trikdymų teorija, tenzorinė algebra, valentinės-valentinės koreliacijos, kamieno-valentinės koreliacijos, kamieno koreliacijos, kamieno- kamieno koreliacijos.*

### Literatūra

- [1] I. Lindgren and J. Morrison, *Atomic Many-Body Theory*, (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, New York, 1982).
- [2] G. Gaigalas, P. Rynkun, L. Kitovienė, Lith. J. Phys. **64** (1), 20-39 (2024)
- [3] G. Gaigalas, P. Rynkun, L. Kitovienė, Lith. J. Phys. **64** (2), 73-81 (2024)
- [4] G. Gaigalas, P. Rynkun, L. Kitovienė, Lith. J. Phys. **64** (3), 139-161 (2024),
- [5] G. Gaigalas, P. Rynkun, L. Kitovienė, Lith. J. Phys. **65** (1), 32-56 (2025)
- [6] G. Gaigalas, P. Rynkun, L. Kitovienė, Lith. J. Phys. **65** (2), 81-106 (2025)

## ECC metodo taikymas trūkstamo judesio kiekio $\Lambda_b$ barionų skilimuose atkūrimui

### Application of the ECC method for reconstructing missing momentum in $\Lambda_b$ baryon decays

Meda Paulavičiūtė<sup>1</sup>, Augustas Vaitkevičius<sup>1</sup>, Mindaugas Šarpis<sup>1</sup>

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

[meda.paulaviciute@ff.stud.vu.lt](mailto:meda.paulaviciute@ff.stud.vu.lt)

Neutralios dalelės, tokios kaip pionai  $\pi^0$  ir fotonai  $\gamma$ , dalelių detektoriuose tiesiogiai fiksuojamos labai mažu efektyvumu bei prasta raiška. Taip yra dėl to, kad jos daug mažiau sąveikauja su detektoriaus elementais dėl savo neutralaus krūvio. Geras efektyvumas yra ypač svarbus dideliuose eksperimentuose, kur dažnai yra tiriami reti įvykiai. Jeigu efektyvumas yra prastas reikia surinkti ir išanalizuoti labai daug duomenų, kas yra sudėtinga ir reikalauja daug resursų. Taip pat dėl prasto efektyvumo dalis įvykių gali likti nepastebėti ar prastai interpretuoti. Taip prarandama svarbi informacija ir rezultatai tampa mažiau patikimi.

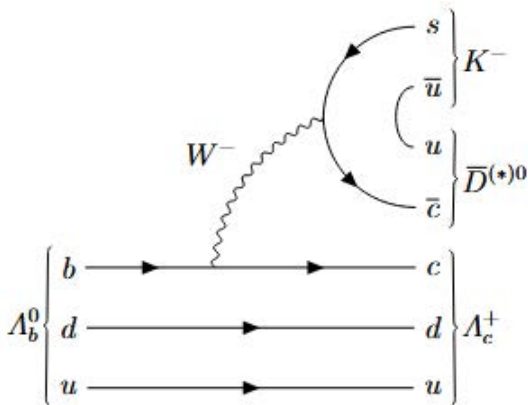
Sunkiųjų barionų skilimų kanalai, turintys neutralių dalelių yra ypač aktualūs pentakvarkų (dalelių sudarytų iš 5 kvarkų) tyrimams [1, 2]. Vienas iš kanalų, kur teoriniai modeliai numato pentakvarkų egzistavimą yra

$$\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D^{*0} K^- \quad (1)$$

kur pentakvarkai gali egzistuoti

$$\Lambda_c^+ D^{*0} \quad (2)$$

sistemoje.



1 pav. Dominuojanti Feinmano diagrama  $\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D^{*0} K^-$  skilimo kanalui [3].

Dažniausiai tokie kanalai nagrinėjami tik dalinai atkūrus juose dalyvaujančių dalelių parametrus. Siekiant atkurti visų dalelių parametrus, būtina taikyti kinematinis ribojimus, pagrįstus impulso, energijos ir masės tvermės dėsniais.

Šiame darbe buvo tiriamas neutralių dalelių atkūrimo metodas (ECC - Extended Cone Closure [4]) kuris, taikant kinematinis apribojimus ir su skilimo topologija susijusius parametrus, trūkstantį dalelės impulsą atkuria

deterministiškai, remiantis geometrija ir kinematiniais suvaržymais. Šis metodas yra skirtas atkurti trūkstantį judesio kiekį skilimuose, kuriuose didele raiška yra užfiksuotos motininės dalelės skilimo ir protonų susidūrimo Didžiajame Hadronų Greitintuve (LHC) koordinatės. Tokią raišką užtikrina LHCb detektorius. ECC ypač tinka nagrinėti  $\Lambda_b$  barionų skilimams.

Duomenys, su kuriais šis metodas buvo testuojamas, buvo paruošti naudojant Monte Carlo simuliaciją per RapidSim aplinką. Duomenų rinkiniai buvo generuoti, kad atitiktų  $\Lambda_b$  bariono skilimų procesus. Tam buvo naudojama CERN paplitusi programinė aplinka RapidSim, nes ji leidžia simuliuoti dalelių skilimų fazinę erdvę ir rezonansus. Buvo naudota ROOT aplinka, kuri yra CERN sukurtas ir prižiūrimas duomenų analizės įrankis. Duomenų rinkiniai buvo išsaugoti .root formatu.

Tolimesnėje darbo eigoje yra numatytas tolesnis ECC metodo tobulinimas bei tyrimas. Tai bus atliekama naudojant Python paketus bei ROOT programinės bibliotekas. Bus kuriamos naujos funkcijos bei integruojamas Python su RapidSim ir ROOT duomenimis. Taip pat yra planuojama sukurti įrankį ECC metodo principu paruoštų rezultatų vizualizavimui.

**Reikšminiai žodžiai:**  $\Lambda_b$  barionas, ECC metodas, trūkstamas judesio kiekis, barionų skilimai.

#### Literatūra

- [1] R. Aaij et al. Observation of  $J/\psi$  p resonances consistent with pentaquark states in  $\Lambda_b^0 \rightarrow J/\psi K^-$  decays. Physical Review Letters, 115(7):072001, 2015.
- [2] R. Aaij et al. Observation of a narrow pentaquark state,  $P_c(4312)^+$ , and of two-peak structure of the  $P_c(4450)^+$ . Physical Review Letters, 122:222001, 2019.
- [3] R. Aaij et al. Observation of the  $\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D^{*0} K^-$  and  $\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D_s^{*0} K^-$  decays, 2024.
- [4] Mindaugas Šarpis. Pentaquark Search in  $\Lambda_b^0 \rightarrow \Lambda_c^+ D^{*0} K^- K$  Decays and LHCb Open Data Release, 2023. Presented 21 Dec 2023.

# Radioaktyviųjų metalinių atliekų lazerinis deaktyvavimo technologijos.

## Laser decontamination technologies for radioactive metallic waste

Artūras Plukis, Džiugas Vyšniauskas, Anton Koroliov, Rita Plukienė, Jonas Jeffrey Haist, Jevgenij Garankin, Kristina Mikalauskiene, Darius Germanas

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius  
[arturas.plukis@ftmc.lt](mailto:arturas.plukis@ftmc.lt)

One of the important tasks for successful nuclear power plant (NPP) decommissioning process is optimization of management of nuclear facility low-level metallic radioactive waste (MRW) by grouping and decontamination of MRW. Approximately 1000 m<sup>3</sup> of contaminated metal waste is generated for every 1 GW decommissioned (13% by volume) [1]. There are two graphite-moderated, boiling water-cooled RBMK-1500 reactors at the Ignalina site. Both of units were permanently closed respectively in 2004 and 2009. Now they are in decommissioning and dismantling phase. During the entire decommissioning period of the power plant since 2010, INPP has already dismantled about 77,000 tons of equipment and structures, which is 44% of the total planned amount. By the end of the decommissioning of the power plant, 103,000 tons of equipment remain to be dismantled [2]. Laser surface cleaning based on the surface ablation of radioactive metallic waste is an alternative method for decontamination especially if sandblasting/shot blasting fails to decontaminate. A high-power laser beam vaporizes the contaminated surface layer (oxide and radioactive contaminants), and a vacuum/HEPA system collects the dust generated during the ablation. Compared to chemical or mechanical methods, laser cleaning is performed remotely from the surface to be cleaned and in a dry manner, which significantly reduces secondary waste and exposure to workers [3].

The laser technologies for decontamination of radioactive waste generated at nuclear power facilities are developed for INPP. The review of existing laser ablation technologies is performed and the most suitable technology have been selected. CW “fiber” lasers (1060–1080 nm) – single-mode “fiber” lasers remove >40 µm of stainless steel in 10 scan passes (~4 µm per pass) [4]. Pulsed Nd:YAG lasers (1064 nm) with ns-order pulse durations, such as a 150 W system (105–230 ns), reach 90–100% cleaning efficiency. Short pulses ensure effective ablation with minimal surface heating [5]. CO<sub>2</sub> lasers (10.6 µm) and excimer lasers (UV, e.g. 193 nm) are most commonly used on non-metallic coatings or concrete [6].

The laboratory experiment with Coherent Prisma laser (532 nm, pulse power: 6W, repetition rate: 40 kHz, pulse duration: 12 ns, pulse energy: 150 µJ, focused beam diameter: 50 µm, power density: 15 J/cm<sup>2</sup>, power density: 306000 W/cm<sup>2</sup>, scanning area: 0.01 – 0.04 mm<sup>2</sup>/s) have been performed for the metal surface laser cleaning testing at small scale.

The new proposed medium power equipment scheme (Fig. 1) was established at FTMC premises. This equipment incorporates “Laser Cleaning Machine FW-200” (1070 nm multi-mode fiber laser, pulse power: 200 W, pulse duration: 500 ns, repetition rate: 40 kHz, pulse energy: 5 mJ, focused distance: 210 mm, scanning area: 125 mm<sup>2</sup>, scanning speed: 8000 mm/s) and it will be tested on real low-level radioactive metallic structures at INNP site.

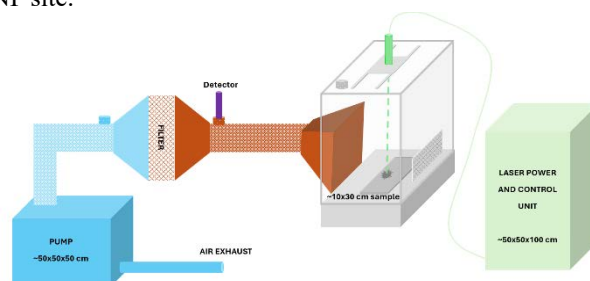


Fig. 1. Laser ablation, decontamination control and radioactive dust collection equipment scheme for radioactive metallic samples cleaning.

**Keywords:** *γ-spectrometry; radioactive metallic waste; laser decontamination,*

**Acknowledgment:** *This project has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No: P-REP-25-11 Radioactive waste laser cleaning study (LazeRada)*

### References

- [1] V R. Traboulsi et al., Metallic Low-Level Waste (LLW) Handling Options: An Optimal Lifecycle-Based Approach for North American Operations, Proc. of Int. Conf. WM2019, March 3 – 7, 2019, Phoenix, Arizona, USA.
- [2] <https://www.iaec.lt/>
- [3] Qian Wang et al., „Laser decontamination for radioactive contaminated metal surface: A review“. Nuclear Engineering and Technology, 55, p. 12-24 (2023)
- [4] Ki-Hee Song et al., „Surface removal of stainless steel using a single-mode continuous wave fiber laser to decontaminate primary circuits“. Nuclear Engineering and Technology, 54(9), p. 3293-3298 (2022).
- [5] Anne-Maria Reinecke et al., „Laser beam decontamination of metallic surfaces with a pulsed (150 W) Nd: YAG laser“. Nuclear Engineering and Technology, 55(11), p. 4159-4166 (2023)
- [6] Philippe Delaporte et al., „Dry excimer laser cleaning applied to nuclear decontamination“. Applied Surface Science 208-209, p. 298-305 (2003).

# Mikrostruktūruota dujinė elektronų detektoriaus sistema rentgeno spindulių vaizdinimui

## Micro pattern gas electron multiplier detector system for X-ray imaging

Kristupa Šeškauskaitė<sup>1,3</sup>, Algirdas Lazauskas<sup>1</sup>, Sigitas Tamulevičius<sup>1,2</sup>, Brigita Abakevičienė<sup>1</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

<sup>3</sup> Kauno technologijos universitetas, Mechanikos inžinerijos ir dizaino fakultetas, Studentų g. 56, LT-51423 Kaunas  
[kristupa.seskauskaite@ktu.edu](mailto:kristupa.seskauskaite@ktu.edu)

Šiame tyrime aukštos skiriamosios gebos rentgeno vaizdams gauti buvo naudojama visiškai integruota dujinė elektronų (*angl.* GEM) detektoriaus sistema. Detektorius pagrįstas triguba folijų konfigūracija, kurių aktyvusis plotas yra  $10 \times 10 \text{ cm}^2$ , jos sandariai įmontuotos dujų kameroje. GEM folijos pagamintos iš vario plėvelės, kurioje yra tankus mikroskopinių skylučių tinklas, leidžiantis elektronams daugintis kaskadiniu būdu prie aukštos įtampos. Trijų sluoksnių GEM folija užtikrina didelį elektronų dauginimo stiprinimą, mažą jonų grįžtamąjį ryšį ir puikią erdvinę skiriamąją gebą.

Detektorius turi poliamido Kapton® langelį, po kuriuo yra katodas, kuris sukuria homogenišką elektrinį lauką, nukreipdamas pirminius elektronus į GEM folijas. Kaskadiškai padauginėti elektronai surenkami ant 2D nuskaitymo plokštės su 256 kanalais (128 X ir 128 Y), leidžiančios tiksliai nustatyti spinduliuotės vietą.

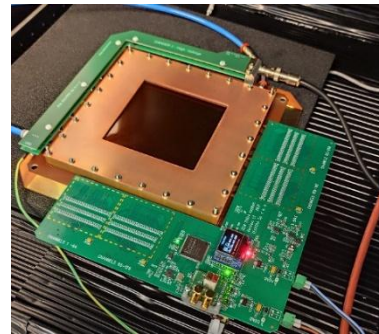
Signalų registravimo sistema yra speciali 256 kanalų plokštė, sukurta kompanijos „Techtra“, besijungianti su detektoriumi per keturias „Panasonic®“ jungtis. Ji integruoja keturis „Texas Instruments® DDC264“ analoginius-skaitmeninius keitiklius (*angl.* ADC), kiekvienas iš jų turi 64 kanalus su 20 bitų skiriamąja geba ir srovės įvesties galimybe. Šie ADC naudoja dvigubą perjungiamą integruotą sąsają, leidžiančią nuolatinę srovės integraciją su minimaliu neveikimo laiku. Sistema palaiko reguliuojamus įkrovos diapazonus nuo 12,5 pC iki 150 pC ir integracijos laikus nuo 160  $\mu\text{s}$  iki 1 s, leidžiančius tiksliai matuoti srovę.

Analoginė dalis apima 4,096 V tikslumo etaloninius šaltinius, žemų dažnių filtravimą ir poliarizacijos grandinę, tiekiančią nuolatinę srovę, jog būtų galima priimti neigiamus signalų įėjimus. „Xilinx Spartan™-3 FPGA“ paremta sistema valdo sinchronizavimą, duomenų surinkimą ir ryšį. Duomenys yra serijiniai ir perduodami į kompiuterį per 100 Mbit/s Ethernet sąsają, naudojant TCP valdymui ir UDP didelio pralaidumo duomenų perdavimui. Duomenų surinkimo sistema (versija 1.1) veikia 6,25 kHz dažnio atrankos greičiu ir apima programinę įrangą, skirtą realaus laiko duomenų surinkimui, vizualizavimui ir saugojimui.

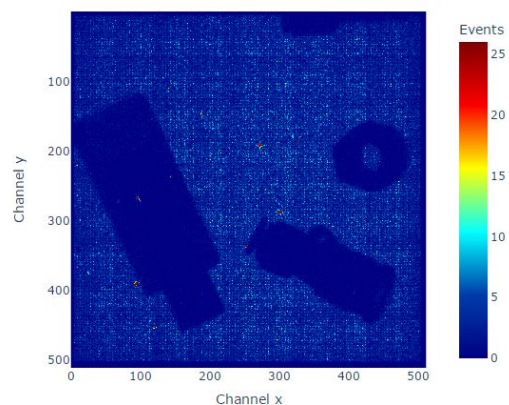
Detektorius veikia naudojant Ar/CO<sub>2</sub> (70/30) dujų mišinį ir yra maitinamas aukštos įtampos maitinimo bloku (Caen DT5470N USB HV PS), galinčiu tiekti iki 5 kV esant 200  $\mu\text{A}$ . Aukšta įtampa tiekama į GEM folijas per specialią HV jungtį ir kabelį. Dujų srautas reguliuojamas naudojant Micromite 1656M4YA tikslumo dozavimo vožtuvą su mikrometriniu valdymu. Visa sistema yra uždaryta dujų nepraleidžiančiame

korpusė su specialiomis jungtimis užtikrinančiomis stabilų ir tylų veikimą.

Detektoriaus vaizdinimo galimybių demonstravimui, naudotas COOL-X miniatiūrinis rentgeno generatorius. Ant Kapton® įėjimo langelio buvo padėti atsitiktiniai objektai ir apšvitinti rentgeno spinduliais. COOL-X naudoja piroelektrinį kristalą elektronams generuoti, kurie, susidūrę su vario taikiniu, generuoja rentgeno spindulius, jų didžiausia galia siekia maždaug  $10^8$  fotonų per sekundę, galutinė energija iki 35 kV.



1 pav. GEM sistema



2 pav. Rekonstruotas apšvitintų objektų vaizdas, demonstruojantis GEM detektoriaus gebėjimą kurti didelio kontrasto, padėčiai jautrius rentgeno vaizdus

*Reikšminiai žodžiai* GEM, Rentgeno spinduliai, vaizdinimas, detektorius.

Projektas Nr. S-CERN-24-8 finansuojamas Lietuvos mokslo tarybos pagal priemonę „Lietuvos narystei CERN perspektyvūs MTEP projektai“ ir pagal Vilniaus universiteto ir Lietuvos mokslo tarybos sutartį Nr. VS-3.

## Kr<sup>+</sup> jono jonizacijos elektronais tyrimas

### Study of electron impact ionization for Kr<sup>+</sup>

Aušra Kynienė, Martynas Nedobežkinas, Šarūnas Masys, Valdas Jonauskas  
Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius  
[ausra.kyniene@tfai.vu.lt](mailto:ausra.kyniene@tfai.vu.lt)

Termobranduolinės sintezės reaktorių plazmoje įvedamos priemaišos siekiant keletų tikslų. Priemaišinių jonų spektrų analizė nuo pat pirmųjų plazmos tyrimų buvo svarbi priemonė siekiant suprasti plazmos savybes. Vystantys reaktoriai priemaišų panaudojimo reikšmė išaugo. Priemaišų įvedimas vaidina svarbų vaidmenį persikirstant energijos srautus plazmoje, mažinant reaktoriaus sienelių šiluminę apkrovą ir apsaugant su plazma susijusius komponentus nuo galimų pažeidimų. Inertinių elementų atomų panaudojimas tapo labai svarbia sritimi, padedanti pagerinti plazmos valdymą pažangiuose termobranduolinės sintezės įrenginiuose.

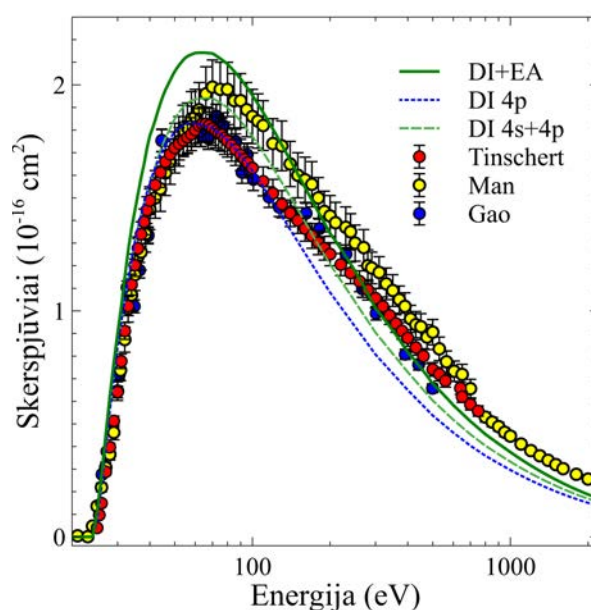
Darbe nagrinėjama Kr<sup>+</sup> jono vienguba jonizacija elektronų smūgiais. Tiriama jonizacija iš pagrindinės Kr<sup>+</sup> jono 4s<sup>2</sup> 4p<sup>5</sup> konfigūracijos energijos lygmenų. Jonizacijos tyrimas apima tiesioginės ir netiesioginės jonizacijos procesus. Tiesioginė jonizacija reiškia, kad elektronas yra iš karto pašalinamas iš atominės sistemos. Netiesioginės jonizacijos atveju nagrinėjamas sužadinimas elektronais su po to sekančia autojonizacija. Sužadinimo metu nesikeičia atominės sistemos jonizacijos laipsnis. Vykstant autojonizacijai iš jono yra pašalinamas elektronas.

Tiesioginė jonizacija elektronų smūgiais nagrinėjama iš 4s ir 4p pagrindinės konfigūracijos pasluoksnių. Gilesnių sluoksnių tiesioginė jonizacija veda prie aukštesnių eilių jonizacijos, todėl šiame darbe nėra tiriama. Netiesioginės jonizacijos atveju nagrinėjami sužadinimai į sluoksnius su pagrindiniu kvantiniu skaičiumi  $n \leq 30$ . Darbe nagrinėjami sužadinimai į visus pasluoksnius su orbitiniais kvantiniais skaičiais  $l \leq 4$ . Tyrimo metu sugeneruotos autojonizacinės konfigūracijos ir įvertintos spinduliuojamųjų ir Ožė šuolių tikimybės bei radiacinio gesinimo įtaka netiesioginės jonizacijos procesui. Darbe išnagrinėta netiesioginės jonizacijos skerspjūvių konvergencija sužadinimams iš 4s ir 4p pagrindinės konfigūracijos pasluoksnių.

Energijos lygmenų, elektrinių dipolinių ir Ožė šuolių bei jonizacijos elektronais ir sužadinimo skerspjūvių tyrimui naudota Flexible Atomic Code programa [1], kurioje realizuotas Dirako–Foko–Slaterio artinys. Jonizacijos ir sužadinimo skerspjūviai nagrinėjami iškraipytųjų bangų artinyje. Banginės funkcijos nagrinėjamos  $jj$  – ryšio schemoje. Darbe naudojamas vienkonfigūracinis artinys. Sumažintų iškraipytųjų bangų (scaled distorted wave) aproksimacija yra naudojama gautus teorinius duomenis lyginant su eksperimento duomenimis.

Teorinių viengubos jonizacijos elektronais skerspjūvių palyginimas su eksperimentinėmis vertėmis [2, 3, 4] pateiktas 1 paveiksle. Teoriniai skerspjūviai

gerai sutampa su eksperimentiniais duomenimis [3] pradedant nuo ~70 eV t. y. nuo skerspjūvių maksimalios vertės. Didžiausią indėlį į viengubą jonizaciją duoda tiesioginės jonizacijos procesas (~90%). Jonizacijos iš 4s sluoksnio indėlis siekia apie 5%. Reikia pažymėti, kad įprastas iškraipytųjų bangų artinys viršija eksperimentinius duomenis ~20% lyginant prie maksimalių verčių.



1 pav. Kr<sup>+</sup> teorinių viengubos jonizacijos elektronais skerspjūvių palyginimas su eksperimentinėmis vertėmis. Eksperimentas: Tinschert [2], Man [3], Gao [4]. DI 4s – tiesioginė jonizacija iš 4s pasluoksnio, DI 4p – iš 4p pasluoksnio, EA – netiesioginė jonizacija.

*Reikšminiai žodžiai: jonizacija, sužadinimai, smūginė jonizacija elektronais, jonizacijos skerspjūviai.*

#### Literatūra

- [1] M. F. Gu, Can. J. Phys. **86**, 675 (2008).
- [2] K. Tinschert, A. Muller, G. Hofmann, K. Huber, R. Becker, D. C. Gregory, and E. Salzborn, J. Phys. B **20**, 1121 (1987).
- [3] K. F. Man, A. C. H. Smith, and M. F. A. Harrison, J. Phys. B **20**, 5865 (1987).
- [4] H. Gao, D. Fang, F. Lu, J. Gu, W. Wu, W. Hu, Y. Wang, S. Wu, J. Tang, and F. Yang, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **132**, 364 (1997).

# Quantum Robustness of the Toric Code via Multi-State Neural Quantum States

E. Ledinauskas<sup>1,2</sup>, E. Anisimovas<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>*Baltic Institute of Advanced Technology, Pilies St. 16-8, LT-01403, Vilnius, Lithuania*

Neural quantum states (NQS) are a machine-learning-based variational ansatz for representing many-body quantum wave functions, where neural networks parameterize the complex amplitudes of quantum states [1]. By leveraging their expressive power, NQS can capture correlations and entanglement patterns that are difficult for traditional methods, offering a flexible framework for studying strongly correlated quantum systems [2, 3].

We investigate the capability of NQS to model the ground-state manifold and low-energy excitations of the toric code in a uniform magnetic field, a paradigmatic topological model central to quantum error correction [4, 5]. Using a recently proposed multi-state NQS variational Monte Carlo method [6], we optimize several low-energy eigenstates simultaneously, enabling direct estimation of the energy gap and robustness of topological order. We identify challenges for NQS in capturing non-local features and degeneracies inherent to topological systems and propose targeted improvements—such as feature augmentation with loop parities, specialized nonlinearities, and enhanced sampling strategies—that significantly improve stability and accuracy for small system sizes. Our results demonstrate the potential and limitations of NQS for probing topological quantum matter and pave the way toward scalable simulations of fault-tolerant quantum codes.

- [1] H. Lange, A. Van de Walle, A. Abedinnia, A. Bohrd. From architectures to applications: A review of neural quantum states. *Quantum Science and Technology* (2024).
- [2] E. Ledinauskas, E. Anisimovas. Scalable imaginary time evolution with neural network quantum states. *SciPost Physics*, 15(6), 229 (2023).
- [3] E. Ledinauskas, E. Anisimovas. Universal performance gap of neural quantum states applied to the Hofstadter-Bose-Hubbard model. *SciPost Physics*, 18(1), 011. (2025).
- [4] A.Y. Kitaev. Fault-tolerant quantum computation by anyons. *Annals of physics*, 303(1), 2-30 (2003).
- [5] V. Kott, M. Mühlhauser J. A. Koziol, K. P. Schmidt. Quantum robustness of the toric code in a parallel field on the honeycomb and triangular lattice. *SciPost Physics*, 17(2), 053 (2024).
- [6] D. Pfau, S. Axelrod, H. Sutterud, I. von Glehn, J. S. Spencer. Accurate computation of quantum excited states with neural networks. *Science*, 385(6711) (2024).

# Branduolių rezonansinių būsenų parametrinė evoliucija

## Parametric evolution of nuclear resonant states

Darius Likandrovas<sup>1,2</sup>, Arnoldas Deltuva<sup>1,2</sup>

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

<sup>2</sup>Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, Vilnius

[darius.likandrovas@ff.vu.lt](mailto:darius.likandrovas@ff.vu.lt)

Keturių dalelių sistemose Efimovo fizikos pasekmė yra universalių būsenų egzistavimas [1]. Kiekvienai surištai trijų dalelių būsenai, kurios ryšio energija yra  $B_3$ , egzistuoja dvi keturių dalelių būsenos: viena labiau surišta, kita mažiau surišta. Idealiu atveju jų energijų santykiai yra atitinkamai lygūs  $B_4/B_3 = 1.0023$  ir  $B_4/B_3 = 1.0023$ . Praktiniais pavyzdžiais gali būti keturių šaltųjų helio atomų ar nukleonų sistemos. Nukleonų atveju trijų dalelių sistemos ryšio energija yra  $B_3 = 8.48$  MeV, o keturių dalelių sistemos ryšio energija –  $B_4 = 28.30$  MeV [2,3,4,5]. Neįsiskačius Kulono sąveikos, branduolys  ${}^4\text{He}$  turėtų sužadintą surištą būseną, kurios energija būtų  $B_4 = 8.55$  MeV, tačiau įtraukus Kulono sąveiką ši būsena tampa rezonansine tolydžiojo spektro srityje.

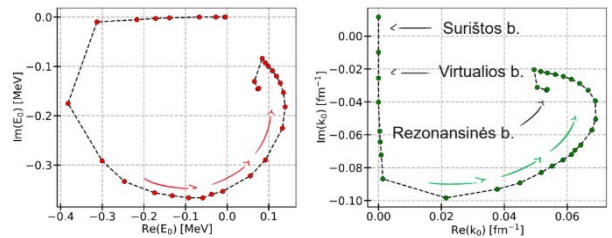
Taigi, Kulono sąveika universalią silpnai surištą būseną paverčia rezonansine. Siekiant detaliau išnagrinėti tokio tipo virsmą, šiame darbe bus nagrinėjama modelinė dviejų protonų sistema ir analizuojama jos surištos būsenos evoliucija, keičiant Kulono sąveikos parametrus. Pasirinkta sistema leidžia imituoti sudėtingesnes keturių dalelių sistemas, kurių sužadinta būsena analogiškos evoliucijos metu virsta rezonansu. Iš keleto galimų metodų nagrinėti Kulono sąveiką, buvo pasirinktas Kulono ekranavimo ir pernормavimo metodas dėl jo praktiškumo ir efektyvumo analizuojant keturių dalelių sistemas.

Uždavinys formuluojamas T-opeatoriaus formalizme ir sprendžiama Lippmann–Schwinger lygtis, su potencialu, kuris susideda iš sustiprinto „CD-Bonn“ branduolinio potencialo bei ekranuoto Kulono nario, kuris ribiniu atveju pereina į pilną Kulono sąveikos potencialą. Toks metodas leidžia keisti ekranavimo spindulį  $R$  ir alternatyviai krūvių sandaugą ir nagrinėti poliaus trajektoriją kompleksinėse energijos ir impulso plokštumose. Poliaus vertė apskaičiuojama trimis tarpusavyje nepriklausomais būdais: Lorano eilutės artiniu, tęstinės trupmenos artiniu ir efektyvaus sąveikos nuotolio skleidiniu. Visi trys metodai duoda kokybiškai sutampančias trajektorijas ir yra skaitmeniškai stabilūs skirtinguose energijų intervaluose. Grafikai 1 pav., 2 pav. aiškiai rodo, kaip, didėjant  $R$ , polius atsiskiria nuo realios ašies ir pasislenka į kompleksinę sritį, t. y. surišta būsena pirmiausia tampa virtuali 1 pav., vėliau – rezonansinė 1, 2 pav.

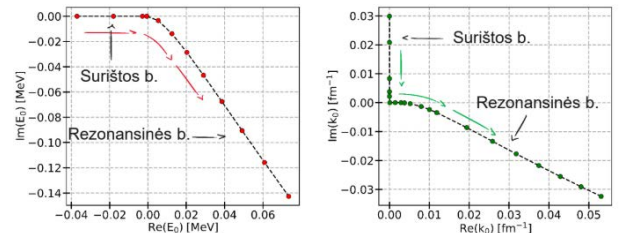
Taip pat darbas plečiamas duomenų sekų prognozavimu, pasitelkiant dirbtinius neuroninius tinklus. Turint fazės poslinkio sekas kaip ekranavimo parametro funkciją, dirbtinis neuroninis tinklas mokomas atpažinti trajektorijos dėsningumus ir, gavęs tik sekos pradžią,

patikimai pratęsti ją. Tokia procedūra automatiškai generuoja reikalingus rezultatus, kur tradiciniai skaičiavimai greitai tampa imlūs resursams arba jautrūs skaitiniams netikslumams.

Gauti rezultatai leidžia prognozuoti panašią poliaus elgseną sudėtingesnėse sistemose, sudarytose iš didesnio skaičiaus sąveikaujančių dalelių, ir patvirtina taikytų metodų tinkamumą.



1 pav. Tęstinės trupmenos artinio rezultatas. Poliaus trajektorija energijos ir impulso plokštumose.



2 pav. Efektyvaus sąveikos nuotolio skleidinio rezultatas. Poliaus trajektorija energijos ir impulso plokštumose.

*Reikšminiai žodžiai:* Efimovo fizika, rezonansas, Kulono sąveika, dirbtiniai neuroniniai tinklai.

## Literatūra

- [1] A. Kievsky, M. Gattobigio, L. Girlanda, M. Viviani. „Efimov Physics and Connections to Nuclear Physics“. Iš: Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 71 (2021).
- [2] R. Lazauskas. „Elastic Proton Scattering on Tritium below the  $n$ - ${}^3\text{He}$  Threshold“. Iš: Phys. Rev. C 79, 054007 (2009).
- [3] S. König, H. W. Grißhammer, H. W. Hammer, U. van Kolck. „Nuclear Physics Around the Unitarity Limit“. Iš: Phys. Rev. Lett. 118, 202501 (2017).
- [4] M. Viviani, L. Girlanda, A. Kievsky, L. E. Marcucci. „ $n$ - ${}^3\text{He}$ ,  $p$ - ${}^3\text{He}$ , and  $n$ - ${}^3\text{He}$  Scattering with the Hyperspherical Harmonic Method“. Iš: Phys. Rev. C 102, 034007 (2020).
- [5] S. Kegel ir kiti. „Measurement of the  $\alpha$ -Particle Monopole Transition Form Factor Challenges Theory: A Low-Energy Puzzle for Nuclear Forces?“ Iš: Phys. Rev. Lett. 130, 152502 (2023).

# Pilnas eksitoninis hamiltonianas fotosintetiniams šviesorankos kompleksams

## Complete Exciton Hamiltonian for Photosynthetic Pigment-Protein Complexes

Austėja Mikalčiūtė<sup>1</sup>, Darius Abramavičius<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, 10222, Vilnius, Lietuva

[austeja.mikalciute@ff.vu.lt](mailto:austeja.mikalciute@ff.vu.lt)

Vienas svarbiausių fotosintezės metu vykstančių procesų yra šviesos energijos surinkimas sužadinant daugiapigmentinius anteninius šviesorankos kompleksus. Vykstant evoliucijai dėl gamtoje vyraujančių skirtingų aplinkos sąlygų išsivystė nemažai skirtingų fotosintetinių pigmentų ir šviesorankos kompleksų, kurie pritaikė fotosintezės procesą vykdyti tiek vandenyje, tiek sausumoje ir įvairių tipų organizmuose – bakterijose, dumbliuose ir augaluose.

Šiame darbe buvo išplėstas standartinis eksitoninis modelis dažniausiai naudojamas apskaičiuoti šviesorankos kompleksų hamiltonianą. Standartiniame eksitoniniame modelyje dažniausiai yra daroma prielaida, jog eksitonų gyvavimo trukmės yra begalinės, taip izoliuojant skirtingus hamiltoniano blokus, aprašančius skirtingą sužadinimų skaičių. Šiame tyrime toks modelis buvo išplėstas, pridendant aplinkos sąlygotus nerezonansinius hamiltoniano narius, kurie susieja skirtingus sužadinimus. Nerezonansiniai hamiltoniano nariai buvo apibrėžti taip:

$$(\hat{H}_S)_{gk} = \sum_m^{m \neq k} \langle g_k g_m | V_{mk} | e_k g_m \rangle = L_k, \quad (1)$$

čia  $g$  – pagrindinė būseną,  $e$  – sužadinta būseną,  $V$  – elektrostatinės sąveikos operatorius. Tuomet pilną hamiltonianą galime užrašyti tokia matrica:

$$\hat{H}_S = \begin{pmatrix} 0 & L_1 & L_2 & \dots & L_N \\ L_1 & J_{11} & J_{12} & \dots & J_{1N} \\ L_2 & J_{21} & J_{22} & \dots & J_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ L_N & J_{N1} & J_{N2} & \dots & J_{NN} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

čia  $J_{kn}$  – rezonansinė sąveika tarp  $k$ -ojo ir  $n$ -ojo pigmento.

Darbe buvo analizuoti Fenna-Matthews-Olson (FMO) (žr. 1 pav.) ir fukoksantino-chlorofilo (FCP) baltyminių šviesorankos kompleksų absorbcijos spektrai, apskaičiuoti įtraukiant nerezonansinės sąveikos narius  $L_k$ . Pigmentų pagrindinės ir pirmos dvi sužadintos būsenos buvo sumodeliuotos kvantinės mechanikos lygmeniu, naudojant GAUSSIAN<sup>1</sup> programinį paketą ir DFT/TD-DFT metodologiją su CAM-B3LYP funkcionalu ir 6-31G(d) bazinių funkcijų rinkiniu. Pigmentų sužadinimo energijos buvo prilygintos žinomoms eksperimentinėms vertėms. Hamiltoniano sąveikos nariams apskaičiuoti buvo taikyta šuolio krūvio iš elektrostatinio potencialo metodika (angl. *transition*

*charge from electrostatic potential* (TrESP)), o sužadinimų gyvavimo trukmės ir absorbcijos spektras apskaičiuotas naudojant sekuliariosios Redfield teorijos rezultatus. Pigmentų spektrai vakuume, baltyminėje terpėje ir baltyminėje terpėje su baltymo krūvį neutralizuojančiais jonais buvo apskaičiuoti įtraukus nerezonansines sąveikas.

Tyrimo rezultatai rodo, jog nerezonansinės sąveikos yra bent viena eile didesni dydžiai nei tarpchromoforinės rezonansinės sąveikos, taigi, turi būti įtraukiamos į skaičiavimus. Taip pat buvo gautos ir kiekvieno sužadinimo gyvavimo trukmės, kurios yra nanosekundžių eilės. Nerezonansiniai nariai taip pat daro įtaką ir absorbcijos spektrui – paslenka link aukštesnių dažnių, pakeičia smailių intensyvumus ir pozicijas<sup>2</sup>.

Šiuo metu tyrimas yra tikslinamas ir plėtojamas FMO kompleksui: simuliacijoms pasitelkiamą molekulinę dinamiką, stengiantis, jog šviesorankos komplekso komponentų išsidėstymas būtų kuo panašesnis į gyvuose organizmuose esančias sąlygas. Iš šių simuliacijų duomenų buvo apskaičiuotos pigmentų tarpusavio sąveikos koreliacinės funkcijos bei jų spektriniai tankiai. Taip pat tikslinama ir absorbcijos spektrų skaičiavimo metodika – planuojama taikyti kompleksinę, nuo laiko priklausančią Redfield teoriją apskaičiuoti sužadinimų gyvavimo trukmėms ir spektrams.



1 pav. FMO šviesorankos komplekso struktūra

*Reikšminiai žodžiai: fotosintezė, šviesorankos kompleksai, energijos pernaša, absorbcijos spektras, kvantinė mechanika.*

### Literatūra

- [1] M. J. Frisch et al., GAUSSIAN 16, Gaussian Inc. Wallingford CT, (2016).
- [2] A.Mikalčiūtė, D.Abramavičius, *Complete exciton Hamiltonian for photosynthetic pigment-protein complexes*, J. Chem. Phys., **162**, 164109 (2025).

# Neuroninių populiacijų suvidurkinti modeliai su Gausiniu triukšmu ir ne Koši heterogeniškumu

## Mean-field models of neural populations with Gaussian noise and non-Cauchy heterogeneity

Viktoras Pyragas<sup>1</sup>, Kęstutis Pyragas<sup>1</sup>

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

[viktoras.pyragas@ftmc.lt](mailto:viktoras.pyragas@ftmc.lt)

Sudėtingos biologinės sistemos, tokios kaip smegenys, yra sudarytos iš daugybės sąveikaujančių netiesinių dinaminių elementų, todėl jų modeliavimas mikroskopiniu lygmeniu yra neįveikiama skaičiavimo užduotis. Neuromoksle jau seniai siūlomi mažos dimensijos neuronų masės modeliai, siekiant sumažinti skaičiavimo sunkumus. Nors šie modeliai gali imituoti tam tikrą didelių neuronų populiacijų makroskopinį aktyvumą, jie yra fenomenologinio pobūdžio ir todėl negali tinkamai apibūdinti sinchronizacijos procesų, kurie yra daugelio svarbių neuronų sistemų funkcijų pagrindas. Naujausi netiesinių dinaminių sistemų teorijos pasiekimai suteikė neuromokslų bendruomenei mažos dimensijos naujos kartos neuronų populiacijos modelius (NKNPM), kurie teisingai apibūdina sinchronizacijos efektus. Šie suvidurkinto lauko modeliai yra gauti tiesiogiai iš atskirų neuronų mikroskopinės dinamikos ir yra tikslūs termodinaminėje riboje.

NKNPM srities ištakos siejamos su Otto ir Antonseno darbu [1]. Jie atrado invariantinę daugdarą, dabar žinomą kaip Otto-Antonseno (OA) daugdarą, didelėje globaliai susietų heterogeninių Kuramoto osciliatorių sistemoje ir išvedė žemos dimensijos paprastųjų diferencialinių lygčių sistemą, apibūdinančią jos suvidurkintą dinamiką. Per pastarąjį dešimtmetį NKNPM tapo labai aktyvia tyrimų sritimi. Redukuotos suvidurkinto lauko lygtys buvo išvestos ir išanalizuotos daugeliui skirtingų neuroninių tinklų, sudarytų iš kvadratiškai integruojančių ir spaikuojančių (ang. QIF) arba teta neuronų, modifikacijų. Dauguma suvidurkinto lauko modelių buvo gauti darant prielaidą, kad heterogeniškumas tenkina Koši skirstinį. Ši prielaida užtikrina efektyviausią redukciją, nors baigtinių matmenų redukcija taip pat įmanoma ir ne Koši skirstinio atveju, jei jį galima aproksimuoti racionalia funkcija. Pastaruoju metu aktyviai stengiamasi įtraukti triukšmą į naujos kartos modelius. Kai kuriuose darbuose (žr. pvz. [2]) baltasis Koši triukšmas buvo įtrauktas į neuronų populiaciją su heterogeniniais Koši paskirstytais nuo laiko nepriklausomais įvesties signalais. Koši triukšmas ir Koši heterogeniškumas turi tokią patį poveikį populiacijos makroskopiniam elgesiui. Neseniai išvedėme suvidurkinto lauko lygtis neuronų populiacijai, kurią lemia ne Koši heterogeniškumas ir Koši triukšmas [3]. Paaiškėjo, kad šiuo atveju triukšmas ir heterogeniškumas gali turėti kokybiškai skirtingą poveikį neuronų kolektyvinei dinamikai.

Gauso triukšmo įtraukimo į naujos kartos modelius problema yra sudėtingesnė. OA daugdara nėra išsaugoma esant Gauso triukšmui, ir šiuo atveju nėra tikslaus

dimensijos redukcijos metodo. Vis dėlto buvo sukurtas apskritiminių kumuliantų metodas, kuris leido išvesti apytiksles suvidurkinto lauko lygtis neuronų populiacijoms, kurias veikia silpnas Gauso triukšmas.

Šiame darbe [4] mes išvedame apytiksles suvidurkinto lauko lygtis neuronų populiacijai, kurią veikia Gauso triukšmas ir bet kokios heterogeninės srovės, apibrėžtos racionaliąja pasiskirstymo funkcija. Čia analizuojame šio modelio variantą su bet koku heterogeniškumu ir Gauso triukšmu. Nagrinėjame dvi racionalių skirstinio funkcijų šeimas, priklausančias nuo sveikojo skaičiaus parametro  $n$ . Kai  $n = 1$ , abiejų šeimų funkcijos yra identiškos Koši skirstiniui. Kai  $n$  artėja prie begalybės, pirmosios šeimos funkcijos konverguoja į stačiakampį skirstinį, o antrosios šeimos funkcijos konverguoja į Gauso skirstinį. Šiame darbe daugiausia dėmesio skiriama neuronų populiacijos dinaminių režimų analizei priklausomai nuo triukšmo stiprumo ir heterogeniškumo skirstinio puspločio. Pagrindinis tikslas yra ištirti, ar Gauso triukšmas ir skirtingi heterogeniškumo tipai gali turėti kokybiškai skirtingą poveikį kolektyvinei neuronų dinamikai, kaip pastebėta Koši triukšmo atveju [3]. Bifurkacijos diagramų skaitinė analizė parametrų plokštumoje (heterogeniškumo priklausomybė nuo Gausinio triukšmo stiprumo) davė neigiamą atsakymą į šį klausimą. Tai išplaukia iš to, kad Hopfo bifurkacijos kreivės parametrų plokštumoje apibūdinamos monotoniškai mažėjančia heterogeniškumo puspločio priklausomybe nuo Gausinio triukšmo stiprumo. Koši triukšmo ir ne Koši heterogeniškumo atveju panaši priklausomybė yra nemonotoninė [3]. Pagrindinis skirtumas tarp Koši ir Gauso triukšmo yra tas, kad pirmasis skirstinys turi storesnes „uodegas“ ir todėl labiau tikėtina, kad atsiras ekstremalūs spaikavimo suoliai. Šis skirtumas yra priežastis, kodėl jie taip skirtingai veikia populiacijų dinamiką.

**Padėka:** Darbas parengtas pagal Lietuvos Mokslo Tarybos projektą Nr. S-MIP-24-57.

*Reikšminiai žodžiai:* neuroniniai tinklai, naujos kartos neuroninių populiacijų modeliai, Gausinis triukšmas, dimensijos redukcija.

### Literatūra

- [1] E.Ott, and T.M. Antonsen, Chaos **18**, 037113 (2008).
- [2] P. Clusella, and E. Montbrió, Phys. Rev. E **109**, 014229 (2024).
- [3] V. Pyragas, and K. Pyragas, Phys. Lett. A **480**, 128972 (2023).
- [4] V. Pyragas, and K. Pyragas, Phys. Rev. E **110**, 064211 (2024).

# Mašininio mokymosi modelių kūrimas prognozuojančiai chaoso sinchronizacijai

## Developing machine learning models for anticipatory synchronization of chaos

Tatjana Pyragienė, Kęstutis Pyragas

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

[tatjana.pyragiene@ftmc.lt](mailto:tatjana.pyragiene@ftmc.lt)

Šiuolaikinės mašininio mokymosi (MM) technologijos suteikia naujų įžvalgų apie įvairias netiesinio mokslo problemas, padidina jų efektyvumą ir generuoja naujas žinias [1]. Mes taikome MM metodus chaoso prognozuojančios sinchronizacijos (*angl. anticipatory synchronization*, AS) problemai, kuri pirmą kartą buvo aprašyta [2].

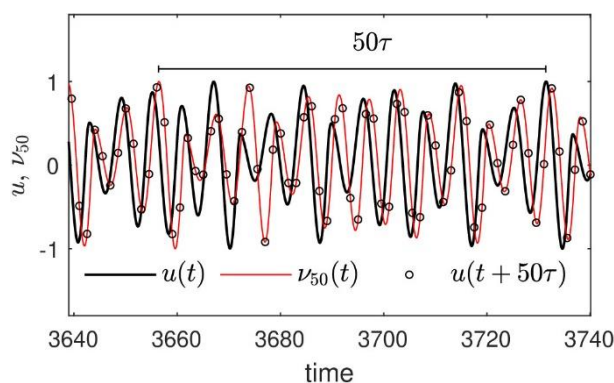
AS yra prieštaringas netiesinis reiškiny, kai dvi identiškos chaotinės sistemos, sujungtos vienakrypčiai pagal „valdovas-pavaldinys“ modelį, gali sinchronizuoti savo judėjimą taip, kad pavaldžioji sistema prognozuoja valdančiosios sistemos trajektoriją. Šis reiškiny paprastai atsiranda dėl uždelsto grįžtamojo ryšio pavaldinėje sistemoje. AS yra perspektyvi priemonė chaotinės dinamikos prognozavimui realiuoju laiku. Tačiau AS reikalauja išankstinių žinių apie prognozuojamos sistemos modelį, nes pavaldžioji sistema yra valdančiosios sistemos kopija.

Mes parodome, kad derinant prognozuojančios sinchronizacijos ir mašininio mokymosi idėjas, galima prognozuoti chaotines laiko eilutes realiuoju laiku, neturint išankstinių žinių apie sistemos modelį [3].

Norėdami sukurti pavaldžios sistemos skaitmeninį modelį AS metodo rėmuose, naudojame NG-RC-Ch (naujos kartos rezervuarų skaičiavimas su Čebyševio polinomais) algoritmą [4]. Tai modifikuota NG-RC (*angl. Next Generation Reservoir Computing*) mašininio mokymosi metodo versija, kuri neseniai buvo pasiūlyta kaip efektyvus chaotiškų sistemų dinamikos prognozavimo metodas [5]. Trumpas NG-RC-Ch algoritmo aprašymas yra toks. Tarkime, kad turime diskretinę duomenų laiko eilutę  $\{U(h), U(2h), \dots\}$ , įrašytą reguliariais laiko žingsniais iš chaotinės sistemos išvesties skaliarinio kintamojo  $U(t)$ , kur  $h$  yra diskretiškumo žingsnis. Algoritme naudojame pernормuotą laiko eilutę  $u(t)$  su reikšmėmis intervale  $[-1, 1]$ . Naudojant pirmuosius  $n_{\text{train}}$  duomenų taškus kaip mokymo duomenis, algoritmo tikslas yra sukurti prognozuotą trajektoriją  $v(t)$  laiko momentams  $t > t_{\text{train}}$  (čia  $t_{\text{train}} = n_{\text{train}} h$ ), kuri gerai atitiktų  $u(t)$ . Daugiamatė būsenos erdvė iš skaliarinio kintamojo rekonstruojama naudojant delsos koordinates (su delsos laiku  $\tau$ ). Čia NG-RC-Ch algoritmą modifikavome taip, kad sukurti pavaldžių sistemų modeliai tenkintų didžiausio skersinio Liapunovo rodiklio neigiamumo reikalavimą. Šis reikalavimas būtinas AS režimo stabilumui.

Tokiu būdu sukonstruotos vienos pavaldžiosios sistemos prognozavimo laikas yra lygus delsos laikui  $\tau$ . Prognozavimo laiką padidiname įgyvendindami nuosekliai sujungtų pavaldžių sistemų grandinę.

Prognozavimo efektyvumas skaliarinėms chaotinėms laiko eilutėms, naudojant prognozuojančią sinchronizaciją ir mašininį mokymąsi, pademonstruotas 1 pav. Čia nagrinėjama chaotinė Rösslerio sistema su vektoriniu lauku  $f = [-(y+z), x+ay, b+z(x-c)]$ . Darome prielaidą, kad stebėjimui prieinamas tik kintamasis  $y(t)$ , t. y.  $U(t) = y(t)$ . Mes panaudojome 50 pavaldžių sistemų grandinę, sukurtą naudojant mašininio mokymosi NG-RC-Ch algoritmą. 1 paveiksle parodyta, kaip AS režimu veikianti 50-oji pavaldinė sistema realiuoju laiku atlieka chaotiško signalo prognozavimą. Prognozės laikas  $50\tau = 75$  viršija penkis Rösslerio sistemos Lyapunovo laikus.



1 pav. Mašininio mokymosi modelių prognozuojanti sinchronizacija su chaotinės Rösslerio sistemos kintamuoju  $y(t)$ . 50-osios pavaldžios sistemos išvesties signalo  $v_{50}(t)$  prognozuojančios sinchronizacijos su valdymo signalu  $u(t)$  fragmentas. Prognozės laikas  $50\tau = 75$  žymimas horizontalia linija.

### Padėka

Darbas parengtas pagal Lietuvos Mokslo Tarybos projektą Nr. S-MIP-24-57.

*Reikšminiai žodžiai:* mašininis mokymasis, rezervuarų skaičiavimas, prognozuojanti chaoso sinchronizacija.

### Literatūra

- [1] Y. Tang, J. Kurths, W. Lin, E. Ott, and L. Kocarev, Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science **30**, 063151 (2020).
- [2] H. U. Voss, Phys. Rev. E **61**, 5115 (2000).
- [3] K. Pyragas and T. Pyragienė, Phys. Rev. E - Accepted 12 June, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1103/mclj-ldgj>
- [4] I. Ratas and K. Pyragas, Phys. Rev. E **109**, 064215 (2024).
- [5] D. J. Gauthier, E. Bollt, A. Griffith, and W. A. S. Barbosa, Nature Communications **12**, 5564 (2021).

# Chaotinių sistemų prognozavimas iš dalinių stebėjimų naudojant naujos kartos rezervuarinius skaičiavimus

## Application of next-generation reservoir computing for predicting chaotic systems from partial observations

Irmantas Ratas, Kęstutis Pyragas

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

[irmantas.ratas@ftmc.lt](mailto:irmantas.ratas@ftmc.lt)

Rezervuariniai skaičiavimai (RS) yra efektyvus būdas prognozuoti chaotinių sistemų elgesį. Šio metodo veikimo principas paremtas tuo, kad tyrimos sistemos matuojamu signalu yra veikiamas rezervuaras – sudėtinga multidimensinė sistema dažniausiai sudaryta iš vienetų paprastesnių dinaminių sistemų tinklo. Įėjimo ir pačio rezervuaro viduje esantys jungčių svoriai parenkami atsitiktine tvarka. Apmokymas vyksta tik keičiant rezervuaro išėjimo svorius. RS metodui svarbus netiesinis rezervuaro atsakas. Naujos kartos rezervuariniai skaičiavimai (NK-RS) netiesinį rezervuarą pakeičia tiesiniu, tačiau įveda netiesinį nuskaitymą [1]. Tokiu būdu sumažinamas algoritmui reikalingų metaparametrų skaičius. NK-RS naudoja netiesinės vektorinės autoregresijos algoritmą, kurio savybių vektorius (*feature vector*) sudarytas iš kelių uždelstų matuojamo signalo verčių arba šių verčių netiesinių funkcijų. Vienas iš dažnai pasirenkamų funkcijų variantų yra vienanarė laipsninė funkcija.

RS reikia tam tikro laiko, kol rezervuaras sinchronizuojasi su į jį ateinančiu signalu ir tik tada gali atlikti gerą prognozę. Šis laiko tarpas, vadinamas apšilimo laiku, dažniausiai būna daug ilgesnis už NK-RS atvejui reikalingą apšilimo laiką, kurį apsprendžia savybių vektoriuje pasirinktos delsos ilgis.

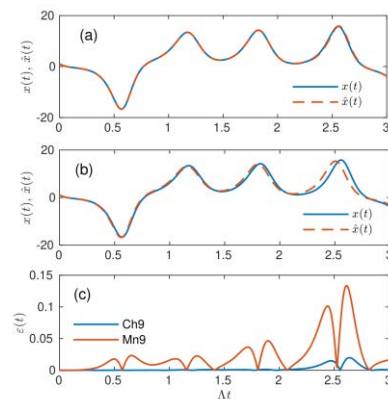
Šiame pranešime pristatinėsiu NK-RS metodo efektyvumo tyrimą, kai sistemoje yra matuojamas tik vienas signalas (skaliarinė laiko eilutė) [2]. Lyginant su prieš tai buvusiais darbais [1], kur visi sistemos kintamieji buvo matuojami, skaliarinės laiko eilutės nagrinėjimas yra daug sudėtingesnis uždavinys. Šiuo atveju papildomai reikia nustatyti kokia delsa ir dimensija reikalinga formuojant savybių vektorių.

Mūsų darbe buvo tiriami signalai iš trijų chaotinių sistemų: Rössler ir Lorenz modelių, bei chaotinio elektroninio osciliatoriaus (eksperimentiniai duomenys). Nustatėme, jog NK-RS algoritmas gali prognozuoti signalus, tik jei savybių vektorius turi pakankamai aukštos eilės vienanarės laipsnines funkcijas. Pasiūlėme efektyvesnį prognozavimo algoritmą NK-RS-Ch, kuriame savybių vektoriuje esantys vienanariai pakeičiami Čebyšovo polinomais. Tokiu būdu prognozavimo horizontas gali padidėti net dviem Liapunovo laikais. NK-RS-Ch algoritmas geba atkurti ir sistemos klimato savybes, tokias kaip bifurkacijų diagramas arba didžiausius Liapunovo rodiklius.

Čebyšovo polinomiali buvo pasirinkti dėl jų svarbaus „*minimax*“ principo, t. y. Čebyšovo polinomiali

aproksimuojant duotą funkciją minimizuoja didžiausią galimą paklaidą. Tolimesniais tyrimais būtų galima tikrinti kaip pakinta prognozavimo galimybės naudojant kitus ortogonalius polinomus ir kaip prognozės rezultatai priklauso nuo nagrinėjamų signalų.

Tiek RS, tiek NK-RS atvejais lieka svarbus neatsakytas klausimas – rekonstruoto modelio autonominės dinamikos stabilumas. Gali pasitaikyti atvejų, kai RS puikiai aproksimuoja apmokomąjį signalą, tačiau paleidus sistemą evoliucionuoti autonomiškai, modelis gali generuoti signalą kuris asimptotiškai tolsta nuo tikrojo atraktoriaus, tuo pačiu atstatydamas netikrą sistemos klimatą.



1 pav. Chaotinio Rössler signalo prognozės palyginimas. Mėlynos ištisinės kreivės (a) ir (b) dalyse reprezentuoja sistemos signalą, raudonos punktyrinės prognozuotą signalą gautą naudojant (a) NK-RS-Ch ir (b) NK-RS algoritmus. Dalyje (c) vaizduojamas prognozės paklaida, mėlyna spalva NK-RS-Ch ir raudona NK-RS algoritmams. Laiko ašis normuota į didžiausią Liapunovo rodiklį.

*Reikšminiai žodžiai:* Rezervuariniai skaičiavimai, chaotinių sistemų prognozė.

### Literatūra

- [1] D. J. Gauthier, E. Bollt, A. Griffith, and W. A. S. Barbosa, Nat. Comm. **12**, 5564 (2021);
- [2] I. Ratas, K. Pyragas, Phys. Rev. E. **109**, 064215 (2024).

# Harmoninio osciliatoriaus skliausteliai SU(3) bazėje

## Harmonic oscillator brackets in SU(3) basis

Augustinas Stepšys<sup>1,2</sup>, Saulius Mickevičius<sup>2</sup>, Darius Germanas<sup>1</sup>, Ramutis Kazys Kalinauskas<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Vytauto Didžiojo universitetas, K. Donelaičio 58, LT-44248, Kaunas, Lithuania

[augustinas.stepsys@ftmc.lt](mailto:augustinas.stepsys@ftmc.lt)

Harmoninio osciliatoriaus (HO) bazė yra gana sėkmingai taikoma banginės funkcijos aproksimacijai ab-initio bešerdžio atomo branduolio modeliuose [1,2]. Norint, kad banginės funkcijos aproksimacija būtų fizikiškai korektiška, ji turi būti antisimetriška ir transliaciškai invariantiška. Sistemos transliacinis invariantiškumas gali būti užtikrinimas pereinant nuo viendalelių sistemos koordinatėms prie vidinių koordinatėms. Patogus pasirinkimas yra Jacobi koordinatės, nes pereinant prie jų yra eliminuojamas masių centro judėjimas, o toliau dirbama tik su santykinio judėjimo koordinatėmis.

Pagrindinis įrankis leidžiantis konstruoti tokių koordinatėms transformacijų atvaizdus HO bazėje, yra Talmi-Mošinskio transformacija. Jos atvaizdas HO bazėje yra vadinamas harmoninio osciliatoriaus skliausteliais (Harmonic Oscillator Brackets – HOB) [3]. Pasinaudojant šia transformacija galime pereiti prie antisimetriškos, transliaciškai invariantinės bazės.

Skaičiavimuose patogų sistemą suskaidyti į dvinarius klasterius ir visos sistemos būsenos vektorius antisimetrizuoti taikant  $\Lambda$  operatorių, kuris yra išreiškiamas, kaip simetrinės grupės dvidalelinių operatorių suma. Diagonalizuojant  $\Lambda$  operatorių yra gaunami Jungo schemomis charakterizuojami neredukuotiniai poerdviai ir remiantis jais yra konstruojami kilminiai koeficientai.

Vienas iš populiariesnių HOB skaičiavimo algoritmų yra HOTB FORTRAN90 kodas, pasiūlytas Kamuntavičiaus et al.[4]. Jame HOB koeficientai yra išreiškiami sumomis per SU(2) 9j simbolius, sekant grupių grandinėle

$$U(6) \supset U(3) + U(3). \quad (1)$$

Šiame kontekste U(3) yra trimačio HO grupė, todėl dviejų sukabintų judesio kiekio momentais HO grupė yra U(6). Šiame darbe bus pristatyta alternatyvi HOB skaičiavimo schema, SU(3) pagrindu, kuri naudoja kitą grupių grandinę

$$U(6) \supset U(3) \times U(2). \quad (2)$$

Kitaip nei HOTB algoritme, šiuo atveju panaudojami SU(3) grupės U-6j simboliai, numeruojami SU(3) grupės neredukuotiniais poerdviais ir mažoji Wignerio d matrica.

Šis skaičiavimo algoritmas yra stabilesnis didesnių HO konfigūracijų atveju. Turint tokį įrankį galima patogiai formuluoti ab-initio bešerdžio atomo branduolio modelį panaudojant vidines Jakobi koordinatas ir unitarinėje schemeje.

*Reikšminiai žodžiai: teorinė fizika, matematinė fizika, ab-initio skaičiavimai.*

### Literatūra

- [1] P. Navrátil *et al.*, *Phys. Scr.* **91**, 053002 (2016)
- [2] C. W. Johnson *et al.*, *J. Phys. G* **47**, 123001 (2020)
- [3] M. Moshinsky, *Nucl. Phys.* **13**, 104 (1959)
- [4] G. P. Kamuntavičius *et al.*, *Nucl. Phys. A* **695**, 191 (2001)
- [5] R. K. Kalinauskas *et al.*, *Nucl. Phys. A* **1056**, 123033 (2025)

# Kvantinio dimero atvaizdavimas sukabintais klasikiniais osciliatoriais

## Representation of a quantum dimer by coupled classical oscillators

Justina Vaičiaitė<sup>1,2</sup>, Leonas Valkūnas<sup>2</sup>, Andrius Gelžinis<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

justina.vaic10@gmail.com

Nuo pat kvantinės fizikos atsiradimo klasikinės ir kvantinės sistemos buvo lyginamos dėl ryškių jų skirtumų. Kvantinė fizika tiria mikroskopines daleles ir gali nusakyti tik tikimybes eksperimento metu stebėti tam tikrą rezultatą. Tuo tarpu klasikinė fizika nagrinėja makroskopinius objektus ir ja remiantis įmanoma bet kuriuo laiko momentu nusakyti jų trajektoriją. Nepaisant šių fundamentalių skirtumų, kai kurių klasikinių ir kvantinių sistemų matematiniai aprašymai gali būti labai panašūs arba visiškai sutapti – tokiu atveju galima laikyti, jog sistemos yra analogiškos.

Nepaisant to, kad kvantinių efektų svarba daugelyje fizikos sričių yra neabejotina, kai kuriais atvejais kvantinius efektus galima aprašyti klasikinėmis lygtimis. Pavyzdžiui, buvo parodyta, jog daugelį iš kvantinių reiškinių, lemiančių itin sparčią sužadavimo energijos pernašą fotosintetinėse sistemose, galima aprašyti ekvivalenčiomis sukabintų klasikinių osciliatorių lygtimis [1, 2]. Daugelio tokių mokslinių darbų tikslas yra parodyti, jog grynai kvantiniais laikyti reiškiniai egzistuoja ir klasikinėse sistemose. Šiame darbe parodoma, jog galima rasti tokią konkrečią klasikinę sukabintų osciliatorių sistemą, kurios laikinė evoliucija visiškai sutampa su kvantinio dimero dinamika.

Šiame darbe nagrinėjama dviejų lygmenų kvantinė sistema, kurią aprašo sužadavimo energijos  $\varepsilon_1$  ir  $\varepsilon_2$  bei būsenų tarpusavio sąveika  $J$ . Remiantis šaltinyje [3] aprašyta metodika ir tankio operatoriaus formalizmu yra gaunamos dvi sukabintos diferencialinės lygtys, aprašančios realios koherentiškumo dalies  $q_{12} = \text{Re}(\rho_{12})$  ir užpildų skirtumo  $b = \rho_{11} - \rho_{22}$  laikines evoliucijas:

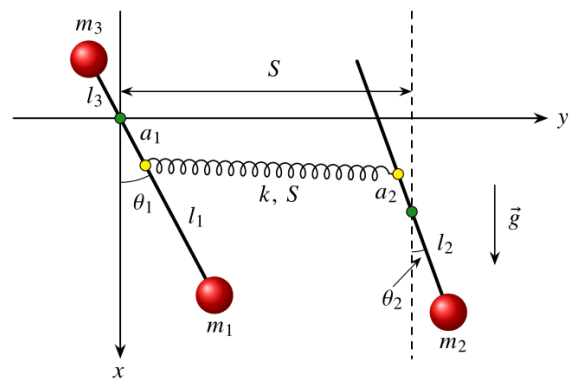
$$\frac{d^2}{dt^2} \begin{pmatrix} q_{12} \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\xi^2 & -J\xi \\ -4J\xi & -4J^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_{12} \\ b \end{pmatrix},$$

čia  $\xi = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$ . Parodoma, jog klasikinės sistemos, sudarytos iš trijų karoliukų, pritvirtintų prie strypų galų, kurie tarpusavyje sujungti spyruokle (žr. 1 pav.), matematinis dinamikos aprašymas yra analogiškas kvantinės sistemos dinamikos aprašymui.

Šioje klasikinėje sistemoje svarbu tai, kad kairiojo strypo pritvirtinimo taškas yra aukščiau spyruoklės prijungimo taško, o antrojo strypo pritvirtinimo taškas yra žemiau spyruoklės prijungimo taško – tokia struktūra lemia neigiamas sistemos sąveikas ir leidžia modeliuoti kvantinę sistemą, kuomet  $J > 0$ . Kita vertus, parodoma, jog pakėlus spyruoklės kairįjį galą atstumu  $2a_1$  (arba nuleidus dešinįjį galą atstumu  $2a_2$ , žr. pav.), gaunamos lygtys ir atveju, kai būsenų tarpusavio sąveika yra neigiama. Taip pat svarbu paminėti, jog aprašant klasikinę sistemą yra naudojama mažų svyravimų teorija,

todėl sistemą aprašančios dinamikos lygtys yra tik apytikslės. Vis dėlto, dėl įvesto pradinių sąlygų ir laiko masteliavimo klasikinės sistemos judėjimo lygtys tiksliai aprašo kvantinio dimero dinamiką bet kokioms pradinių sąlygų ir laiko vėrtėms.

Jei lygtys, aprašančios kvantinės ir klasikinės sistemų dinamikas sutampa, vadinasi, galima tikėtis, jog abiejose sistemose vyks panašūs reiškiniai. Šio darbo rezultatai turėtų būti naudingi klasikinėms kvantinių sistemų simuliacijoms, taigi tikimės, kad šis darbas stimuliuos tolesnius tyrimus kvantinių-klasikinių analogijų srityje.



1 pav. Trys ant strypų pakabinti karoliukai. Strypų pritvirtinimo taškai pažymėti žaliai, o spyruoklės prikabinimo taškai – geltonai.

*Reikšminiai žodžiai: klasikiniai osciliatoriai, tankio operatorius, kvantinis dimeras.*

### Literatūra

- [1] T. Mančal, Excitation energy transfer in a classical analogue of photosynthetic antennae, *J. Phys. Chem. B* **117** (2013).
- [2] T. Mančal, A decade with quantum coherence: How our past became classical and the future turned quantum, *Chem. Phys.* **532**, 110663 (2020).
- [3] T. E. Skinner, Exact mapping of the quantum states in arbitrary  $N$ -level systems to the positions of classical coupled oscillators, *Phys. Rev. A* **88** (2013) 012110.

# Netriviali dinamika rinkėjo modelyje su periodine sąveika

## Emergent behavior in the noisy voter model with periodic interaction

Aleksejus Kononovicius<sup>1</sup>, Rokas Astrauskas<sup>2</sup>, Marijus Radavičius<sup>3</sup>, Feliksas Ivanauskas<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Matematikos ir informatikos fakultetas, Informatikos institutas

<sup>3</sup>Vilniaus universitetas, Matematikos ir informatikos fakultetas, Taikomosios matematikos institutas  
aleksejus.kononovicius@tfai.vu.lt

Fizinių socialinių sistemų modelių įvairovė ir gausa yra itin didelė [1]. Kaip statistinė mechanika susiejo stebimas makroskopines savybes, tokias kaip temperatūra ar slėgis, su mikroskopinių dalelių sąveikomis, taip sociofizikai (ir ne tik) bando suprasti iš kur atsiranda įvairios kolektyvinio žmonių elgesio savybės. Siekiama suprasti iš kur atsiranda netriviali dinamika socialinių sistemų kontekste. Čia mes modifikuojame gerai žinomą rinkėjo modelį įterpdami delką ir periodiškumą į dviejų rinkėjų (dalelių) sąveikas.

Rinkėjo modelis, ir įvairios jo modifikacijos, yra vienas pagrindinių socialinių sistemų fizikos modelių [1]. Šis modelis yra populiarus tiek dėl savo paprastumo, tiek dėl panašumo į Izingo modelį. Panašumas į Izingo modelį sąlygoja, kad didele dalis fizikų tiesiog tyrinėja kaip keičiasi rinkėjo modelio faziniai portretai įvedus naujus socialiai realistiškus mechanizmus. Vis tik didžiausias rinkėjo modelio pranašumas yra jo suderinamumas su empiriniais rinkimų duomenimis [2].

Klasikinis rinkėjo modelis yra apibūdinamas tik per sąveikas su kaimynais. T.y., kiekviename laiko žingsnyje atsitiktinai pasirinkta dalelė kopijuoja atsitiktinai pasirinkto kaimyno (gretimos dalelės) būseną (nuomonę). Norint atkurti rinkimų duomenis, būtina įtraukti ir triukšmo narį - savaiminius dalelių virsmus. Tokiu atveju triukšmu papildytą rinkėjo modelį (angl. *noisy voter model*) patogiu apibūdinti per vienetinių pokyčių (generacijos ir rekombinacijos, ar gimimo ir mirties) spartas:

$$\lambda(X \rightarrow X + 1) = \lambda^+ = (N - X) [\varepsilon_1 + X], \quad (1)$$

$$\lambda(X \rightarrow X - 1) = \lambda^- = X [\varepsilon_0 + (N - X)], \quad (2)$$

čia  $X$  yra dalelių esančių būsenoje “1” skaičius (ką ji atspindi bendru atveju nėra svarbu, bet tipiška tai galėtų būti teigiama nuomonė tam tikru socialiniu ar politiniu klausimu),  $N$  yra dalelių kiekis,  $\varepsilon_i$  yra savaiminio perėjimo į “i” būseną sparta. Čia dviejų dalelių sąveikų spartą laikome vienetine.

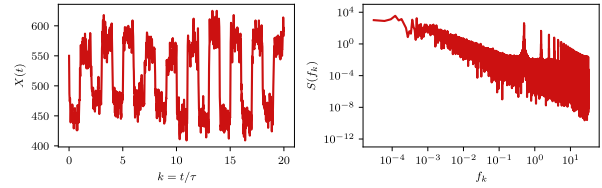
Modifikuokime modelį darydami prielaidą, kad tiesioginės rinkėjų sąveikos yra neįmanomos arba jos neturi pastebimo efekto [3]. Tegu rinkėjai sąveikauja netiesiogiai - nuomos keičia pagal ankstesnių apklausų rezultatus (uždelsčius periodinius stebėjimus),  $A_k$ . Tokiu atveju spartos:

$$\lambda_k^+ = (N - X) [\varepsilon_1 + A_{k-1}], \quad (3)$$

$$\lambda_k^- = X [\varepsilon_0 + (N - A_{k-1})]. \quad (4)$$

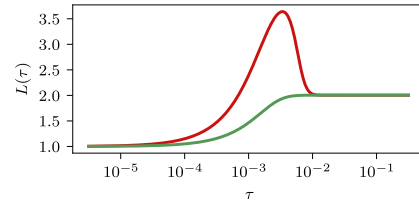
Čia indeksas  $k$  žymi apklausos numerį, bei pabrėžia tai, kad spartos priklauso jau ne tik nuo esamos būsenos, bet ir nuo laiko. Taigi modeliuojant trečios apklausos intervalą,  $k = 3$ , bus svarbi ne tik dabartinė būsena,  $X$ , bet ir ankstesnės (antrosios) apklausos rezultatas,  $A_2$ .

Trivialu, kad modifikuotas modelis pasižymi periodiškumu. Bet norint pastebėti periodiškumą reikia, kad intervalas tarp apklausų būtų sąlyginai didelis. Žr. 1 pav.



1 pav. Periodiškumas modelio laiko eilutėse.

Netrivialu, kad modifikacijos stacionarus skirstinys išlieka Beta skirstiniu, o intervalo tarp apklausų trukmė,  $\tau$ , įtakoja stacionaraus skirstinio formos parametrus. Kuo ilgesnis intervalas, tuo mažesnė stacionaraus skirstinio dispersija. Jei apklausos skelbiamos su delsa (raudona kreivė 2 pav.), tai taip pat egzistuoja optimalus apklausų intervalas kuriam dispersija sumažėja daugiausiai.



2 pav. Stacionaraus Beta skirstinio formos parametrų kitimo dėsnis modelyje su delsa (raudonai) ir be delsos (žaliai).

Analiziškai skirstinio formos parametrų kitimo dėsnį galima išvesti pasinaudojus Yule-Walker lygtimis [4].

*Reikšminiai žodžiai:* periodinis trikdymas, sudėtingos sistemos, atsitiktiniai vyksmai, socialinės sistemos

### Literatūra

- [1] A. Jędrzejewski, K. Sznajd-Weron. *Comptes Rendus Physique* 20: 244–261 (2019). doi: 10.1016/j.crhy.2019.05.002.
- [2] A. Kononovicius. *Complexity* 2017: 7354642 (2017). doi: 10.1155/2017/7354642
- [3] A. Kononovicius *et al.* *Physica A* 652: 130062 (2024). doi: 10.1016/j.physa.2024.130062.
- [4] P. J. Brockwell, R. A. Davis. Springer, 1991. doi: 10.1007/978-1-4419-0320-4.

## Studentų supažindinimas su eksperimentinės dalelių fizikos iššūkiais

### Student introduction to challenges in experimental particle physics

Andrius Juodagalvis

Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Branduolių ir elementariųjų dalelių fizikos centras,  
Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius  
andrius.juodagalvis@tfai.vu.lt

Europos branduolinių mokslinių tyrimų organizacijos (CERN) Didžiojo hadronų greitintuvo (LHC) eksperimentai tyrinėja fundamentaliąsias medžiagos savybes registruodami daleles, susidarančias protonų bei sunkiųjų jonų didelės energijos susidūrimuose. Susidarančių dalelių srautus fiksuojantys detektoriai sukuria milžinišką duomenų kiekį, kuriame esančią informaciją reikia logiškai sugrupuoti, iš mozaikinių signalų sudėliojant detektorių sistemas pralėkusių dalelių trajektorijas, nustatant kalorimetruose registruotų dalelių energijas ir šią informaciją susiejant tarpusavyje, identifikuojant daleles ir įvertinant jų kinetinę energiją susidarymo metu. Trajektorijos yra grupuojamos pagal tikėtiniausią jų pradžios tašką protonų pluoštelių susidūrime, ir ta grupė paprastai yra įvardijama kaip įvykis – konkretus protonų susidūrimas, su kuriuo siejama detektoriumi fiksuotų dalelių grupė. LHC greitintuve protonų pluošteliai eksperimentų vietose persikloja kas 25 ns, o kiekvieno persiklojimo metų įvyksta daug protonų susidūrimų. Didesnė įvykių dalis atitinka jau ištyrinėtus tikėtiniausius procesus, todėl ieškant retesnių procesų (tokių kaip Higgs bozono susidarymas) taikomi griežti įvykių atrankos kriterijai, tačiau dėl susidūrimų gausos išsaugomi dideli eksperimentinių duomenų kiekiai, kurių paskesnė statistinė analizė trunka ilgai. Lygiagrečiai yra vystoma didelės energijos susidūrimų modeliavimo programinė įranga, taikanti Monte Carlo metodus vykstančių procesų aprašymui. Modeliuoti duomenys yra naudojami eksperimentinių duomenų interpretavimui, o statistinių fliktuacijų sumažinimui reikia keliskart daugiau įvykių, nei fiksuojama eksperimente. Šių skaičiavimo uždavinių sėkmingam vystymui, ruošiantis ateities eksperimentams reikalingos koordinuotos pastangos [1-3].

Didelių energijų fizikai skirtos programinės įrangos tyrimų ir inovavimo institutas IRIS-HEP (JAV) siekia padėti vystyti programinę įrangą, atitinkančią didelio šviesingumo didžiojo hadronų greitintuvo (HL-LHC) iššūkius [4]. Institutas siekia koordinuoti programinės įrangos vystymą bei veikti kaip bendruomenės vienijimo centras. JAV, Ukrainos ir Baltijos šalių iniciatyvos IMPRESS-U (International multilateral partnerships for resilient education and science system in Ukraine) dėka, IRIS-HEP bendradarbiavimo tinklas neseniai išsiplėtė į Ukrainą, Lenkiją ir Lietuvą. Projekto uždaviniai apima: keturių šalių tyrėjų bendradarbiavimo stiprinimą kuriant programinę įrangą eksperimentinės dalelių fizikos reikmėms; studentų ir podoktorantūros stažuotojų tarptautinius mokymus pažangiai programuoti bei naudoti dirbtinio intelekto ir mašininio mokymosi metodus; užmegzti ilgalaikius asmeninius ryšius tarp

keturių šalių tyrėjų. Bendradarbiavimas prasidėjo 2024 m. ir leido konkursą praėjusiems Lietuvos studentams (fizikams ir informatikams) kaupti patirtį ir artimiau susipažinti su eksperimentinės didelių energijų fizikos uždaviniais ir iššūkiais, dirbant stažuojantis europinėje dalelių fizikos laboratorijoje CERN [5]. Stažuotojų sprendžiami uždaviniai buvo įvairūs, per pirmuosius pusantrų projekto vykdymo metų vyko aštuoni stažuotojai. Pristatymo metu bus papasakota apie kelis vykdytus projektus, o jų temos yra skirtingos, kelias iš jų paminint: analitinio diferencijavimo formulių programavimas; specializuotų kompiuterinių programų rašymo pagalbininko kūrimas; CERN Kompaktiškojo miuonų solenoido eksperimento (CMS) programinės įrangos versijų palyginimo įrankių patobulinimas; debesijos virtualiose aplinkose vykdomų skaičiavimo uždavinių vykdymo stebėsenos, siekiant gauti naudingą informaciją ir tuomet, kai skaičiavimo programos vykdymas sustoja avariniu būdu; stulpeliais saugomų duomenų programinės įrangos COFFEA pritaikymas CERN Ateities žiedinio greitintuvo (FCC) eksperimentų modeliavimo uždaviniams.

Aprašytos bendradarbiavimo su IRIS-HEP veiklos buvo finansuotos Lietuvos mokslo tarybos pagal sutartį Nr. S-IMPRESSU-24-4.

*Reikšminiai žodžiai: eksperimentinė didelių energijų fizika, programinė įranga HEP reikmėms.*

#### Literatūra

- [1] I. Bird, et al., EPJ Web of Conferences, **245**, 8020 (2020); <https://doi.org/10.1051/epjconf/202024508020>.
- [2] D. Katz, et al., arXiv:2010.05102 [hep-ex].
- [3] E. Kourlitis, PoS **450**, 112 (2024); <https://doi.org/10.22323/1.450.0112>.
- [4] B. Bockelman, P. Elmer, and G. Watts, Eds., arXiv:2302.01317v1 [hep-ex]. <https://arxiv.org/abs/2302.01317>.
- [5] IRIS-HEP programos stažuotojai, <https://iris-hep.org/fellows.html>.

# EAAE ir NASE: Astronomijos švietimo Europoje peržūra

## EAAE and NASE: Reimagining Astronomy Education in Europe

Šarūnas Mikolaitis<sup>1</sup>, Carlos Viscasillas Vázquez<sup>1</sup>, Rosa María Ros<sup>2</sup>, Ederlinda Viñuales<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup> Network for Astronomy School Education (NASE)

<sup>3</sup> European Association for Astronomy Education (EAAE)

[sarunas.mikolaitis@tfai.vu.lt](mailto:sarunas.mikolaitis@tfai.vu.lt)

We present the current state of astronomy education across Europe, examining both its achievements and the challenges it faces in an evolving educational landscape. We explore strategies for the future, highlighting opportunities to engage students and educators through innovative approaches and inclusive pedagogies. Special attention is given to the milestones and impact of the European Association for Astronomy Education (EAAE), which was founded 30 years ago under the umbrella of ESO [1,2], and the Network for Astronomy School Education (NASE), established 15 years ago as part of the International Astronomical Union's Key Programs [3,4]. Their work exemplifies how collaborative networks can enhance science education and inspire the next generation of astronomers.

We also detail specific activities and initiatives of EAAE and NASE, illustrating their role in shaping astronomy education throughout Europe. By celebrating their anniversaries, we underscore the long-term commitment of both organizations to fostering curiosity, supporting educators, and promoting accessible astronomy learning. We provide insights into effective practices, ongoing projects, and potential future directions for astronomy education, emphasizing the importance of international collaboration and the enduring relevance of astronomy as a tool for scientific and cultural enrichment [5].

We highlight the evolving methodologies employed by EAAE and NASE to adapt to contemporary educational needs. For instance, NASE's integration of low-tech materials and training courses has proven effective in enhancing astronomy education, particularly in resource-

limited settings [4]. Additionally, the EAAE's commitment to promoting astronomy education in schools and stimulating student interest is evident through various European projects such as *Catch a Star*, *Eratosthenes*, *Sunrise Project*, *Moonwalkers*, *Find a Sundial*, *Space art*, *Astronomy in All Seasons* [1,2]. These initiatives demonstrate the organizations' dedication to making astronomy accessible and engaging for all students across Europe.

*Key words: Astronomy education, EAAE, NASE, teacher training, inclusive astronomy*

### References

- [1] Pierce-Price, D., Ros, R. M., & Madsen, C. (2007). Report on the First ESO-EAAE Astronomy Summer School. *The Messenger*, 130, 60.
- [2] Wagner, F., & Ros, R. M. (2003). The EAAE: Promoting astronomy education in Europe. In A. Heck & C. Madsen (Eds.), *Astronomy Communication* (p. 177). Kluwer.
- [3] Ros, R. M., García, B., Moreno, R., & Viñuales, E. (2024). STEAM in action: NASE–UNESCO bridges between cultures. *IAU GA 32*, Cape Town, South Africa, Poster 910.
- [4] Viñuales-Gavín, E., Ros, R. M., García, B., & Moreno-Luque, R. (2022). NASE low-tech materials and training courses in Africa. *EAS2022*, Valencia, Spain, ID 1455.
- [5] Simpemba, P. (2021). Astronomy education in primary schools as foundation for STEM. *AFAS2 Conference*, Virtual, ID 82.

## Investigation of silver-aluminium mixed mirrors for space applications

Alexandr Belosludtsev<sup>1\*</sup>, Anna Sytchkova<sup>2\*</sup>, Ignas Bitinaitis<sup>1</sup>, Vitalij Kovalevskij<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Center for Physical Sciences and Technology, Savanoriu ave. 231, Vilnius 02300, Lithuania*

<sup>2</sup>*Optical Coatings Group, ENEA Casaccia, via Anguillarese 301, Roma 00123, Italy*

*\*correspondence: Alexandr.Belosludtsev@ftmc.lt (A.B.), Anna.Sytchkova@enea.it (A.S.)*

### Abstract

With the continuously increasing volume of data transmission required on Earth, in space, and between the two, the development of reliable optical components is becoming increasingly critical—particularly for applications in space-based quantum communication. In this study, we present a systematic investigation of Silver-Aluminium (Ag-Al) mixed mirrors as potential candidates for orbital missions. The fabrication process for Ag-Al composite coatings is described in detail. Mirrors with varying aluminium concentrations, up to 15%, were prepared and characterized. The results indicate that incorporating 5% aluminium yields smooth and potentially stable mirror surfaces suitable for extended space deployment.

**Keywords:** Silver-aluminium mixed films; Magnetron sputtering; Reflective mirrors; Radiation tests; Space Optics; Quantum communication.

# Rentgeno spindulių generavimas panaudojant 2 μm femtosekundinius lazerio impulsus

## 2 μm fs Laser Pulses for Soft X-ray Generation

Anton Koroliov<sup>1</sup>, Artūras Plukis<sup>1</sup>, Vidmantas Remeikis<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius  
anton.koroliov@ftmc.lt

Rentgeno spindulių generavimas, panaudojant femtosekundinius lazerio impulsus, yra aktuali tyrimų sritis, nes sukuriama rentgeno spinduliuotės impulsų trukmė yra artima žadinančios lazerinės spinduliuotės impulso trukmei. Tai atveria naujų jų taikymo galimybių medicinos, pramonės ir medžiagotyros srityse [1].

Optiniai parametriniai stiprintuvai (OPA) leidžia keisti lazerio bangos ilgį plačiame diapazone. Nepaisant šių lazerinių sistemų sudėtingumo ir brangių optinių komponentų, tokios sistemos naudojamos vis dažniau. Literatūroje teigiama, kad naudojant ilgesnio bangos ilgio lazerio spinduliuotę galimas efektyvesnis rentgeno spindulių generavimas [2].

Šio tyrimo tikslas – palyginti panašių parametrų 1 μm ir 2 μm bangos ilgio lazerinių sistemų panaudojimą rentgeno spinduliuotei generuoti nuo varinio taikinio paviršiaus.

Rentgeno spindulių generavimui nuo varinio taikinio paviršiaus buvo naudojamas optinis parametrinis stiprintuvas (OPA) ORPHEUS MIR („MGF Šviesos Konversija“) su galimybe derinti bangos ilgį nuo 1300 nm iki 11000 nm ir femtosekundinis lazeris „Pharos PH1-SP-1.5mJ“, kurio bangos ilgis  $\lambda = 1028$  nm ir impulso trukmė  $\tau = 158$  fs. OPA ORPHEUS MIR parametrai: bangos ilgis  $\lambda = 2000$  nm, impulso trukmė  $\tau = 36$  fs, pasikartojimo dažnis  $f = 4$  kHz, vidutinė galia  $P_{max} = 500$  mW, impulso energija  $E_p = 0.125$  mJ. Rentgeno spindulių detektavimui buvo naudojamas „Amptek X-123“ spektrometras. Matavimai buvo atliekami atspindžio geometrijoje, kampas tarp kritusios lazerio spinduliuotės ir detektoriaus buvo 45°. Atstumas iki detektoriaus buvo 100 mm.

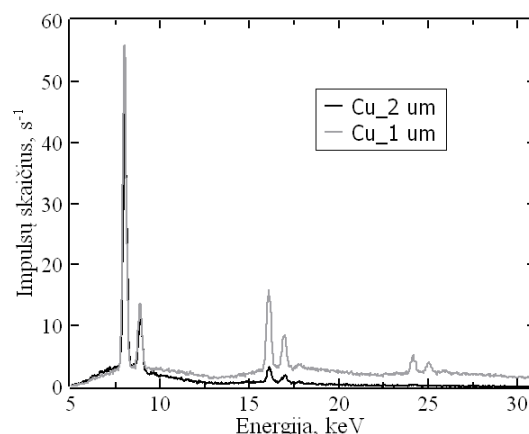
Pilnas vario charakteringos Rentgeno linijos srautas į  $4\pi$  kampą apskaičiuojamas pagal šią formulę:

$$\Phi = \frac{4\pi d^2 (N_1 + 2N_2 + 3N_3 + \dots + nN_n)}{S_{Det} \times T_{Al} \times T_{PTE} \times T_{Be} \times T_{Air} \times t} \quad (1)$$

kur  $d$  – atstumas iki detektoriaus,  $N_n$  – charakteringos Rentgeno linijos plotas,  $T$  – atitinkamo filtro pralaidumo koeficientas,  $t$  – laikas,  $S_{Det}$  – detektoriaus plotas.

1 lentelė. Vario Rentgeno  $K$  linijų srautas esant skirtingiems lazerio bangos ilgiams.

| $\lambda$ (nm) | $K_\alpha$ (1/s) | $K_\beta$ (1/s) |
|----------------|------------------|-----------------|
| 1028           | 5.73E+05         | 1.12E+05        |
| 2000           | 2.86E+05         | 4.49E+04        |



1 pav. Vario rentgeno spektrai, gauti naudojant 1 μm ir 2 μm bangos ilgio lazerinės sistemas.

1 pav. pateikiami vario Rentgeno spinduliuotės spektrai, gauti panaudojant 1 μm ir 2 μm bangos ilgio lazerines sistemas. Spektuose aiškiai identifikuojamos charakteringos  $K_\alpha$  (8.04 keV) ir  $K_\beta$  (8.96 keV) linijos, *Bremsstrahlung* fonas bei pastebimas sutapčių (pile-up) efektas. Rezultatai rodo, kad naudojant 1 μm bangos ilgio lazerio impulsus fiksuojama daugiau sutapčių, kas indikuoja didesnę sugeneruotą Rentgeno spinduliuotės kvantų skaičių. Apskaičiuota, kad vario charakteringų rentgeno linijų srautas, generuojamas panaudojant 2 μm bangos ilgio lazerio impulsus, yra apie du kartus mažesnis nei generuojant su 1 μm bangos ilgio lazeriu.

Gauti rezultatai nesutampa su literatūroje aprašytais duomenimis [2]. Ilgesnio bangos ilgio atveju elektronai ilgiau sąveikauja su plazma – jie prasiskverbia giliau, dalis jų yra ekranuojama, todėl Rentgeno spinduliuotės generavimo efektyvumas sumažėja. Šiam efektui kompensuoti būtina didesnė lazerio impulsų energija.

*Reikšminiai žodžiai:* Rentgeno spinduliuotė, femtosekundinis lazeris, OPA, plazma.

### Literatūra

- [1] S. Corde, K. Ta Phuoc, G. Lambert, R. Fitour, V. Malka, A. Rousse, A. Beck, and E. Lefebvre, *Reviews of Modern Physics* 85, 1–48 (2013).
- [2] A. Koç, C. Hauf, M. Woerner, L. von Grafenstein, D. Ueberschaer, M. Bock, U. Griebner, and T. Elsaesser, *Opt. Lett.* 46, 210–213 (2021).

# Polimero priedų inžinerija optimizuotiems Zn-legiruotiems perovskitiniams paskirstyto grįžtamojo ryšio lazeriams

## Polymer additive engineering for the optimized Zn-alloyed perovskite distributed feedback lasers

Abdul Mannan Majeed, Gediminas Kreiza, Saulius Miasojedovas, Patrik Ščajev  
Institute of Photonics and Nanotechnology, Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio Ave. 3, LT-10257, Vilnius, Lithuania  
[mannan.majeed@ff.vu.lt](mailto:mannan.majeed@ff.vu.lt)

Polymer additive engineering has proven to be an effective strategy for tuning the structural and optoelectronic properties of semiconductors, yet the operational instability of metal halide perovskites remains a major barrier to their adoption in laser technologies.

Here, we investigate the impact of Zn substitution for Pb in solution-processed cesium lead iodide perovskites ( $\text{CsPb}_x\text{Zn}_{1-x}\text{I}_3$ ) combined with polyvinylpyrrolidone (PVP) as a polymer additive. Introducing 40% Zn and 3% PVP significantly enhances film quality, yielding improved crystallinity, reduced roughness, and stabilized brown-phase perovskites in the composition range  $x = 0.3\text{--}0.6$ . In contrast, lower Zn content produces the yellow phase, while higher concentrations induce mixed phases and accelerated degradation. PVP incorporation also induces a blue shift in emission, consistent with reduced sub-bandgap defect density and lower amplified spontaneous emission (ASE) thresholds, with  $\text{CsZn}_{0.4}\text{Pb}_{0.6}\text{I}_3$  showing optimal performance.

Using these optimized films, we fabricated distributed feedback (DFB) lasers via one-step spin-coating, followed by holographic lithography to inscribe gratings on perovskite surface using an Nd: YAG laser (Fig. 1). The devices exhibit narrowband lasing in 700–715 nm range with thresholds as low as  $55 \mu\text{J cm}^{-2}$ , and full-width half-maximum values of 0.5 nm for the 0.4–0.5 Zn-alloyed films. A stability test was performed at  $90 \mu\text{J/cm}^2$ . The optimized 0.4PVP DFB laser demonstrates exceptional operational stability, sustaining emission over 400 million excitation pulses under ambient conditions ( $20^\circ\text{C}$ , 60% RH), equivalent to more than one year of continuous operation at 10 Hz. Initially emission intensity of 0.4PVP dropped by a factor of two, but then recovered after some time. A transient recovery in emission intensity, accompanied by a red shift in the lasing peak, further suggests ion migration and surface restoration effects during operation [1].

These findings establish polymer additive engineering as a robust pathway to enhance structural stability, optical performance, and long-term durability in Zn-doped perovskite thin films, representing a key advance toward commercially viable, electrically driven perovskites.

**Keywords:** *perovskites, alloying, amplified spontaneous emission, holographic gratings.*

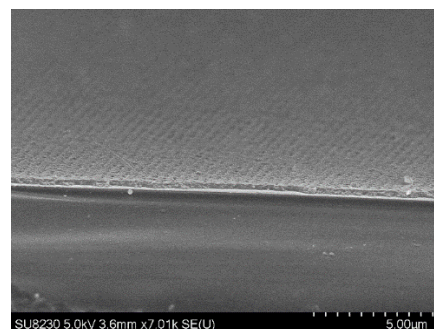


Fig. 1. SEM cross-section of DFB grating.

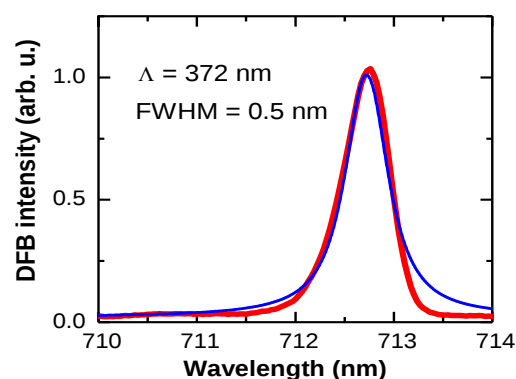


Fig. 2. Narrowband DFB emission.

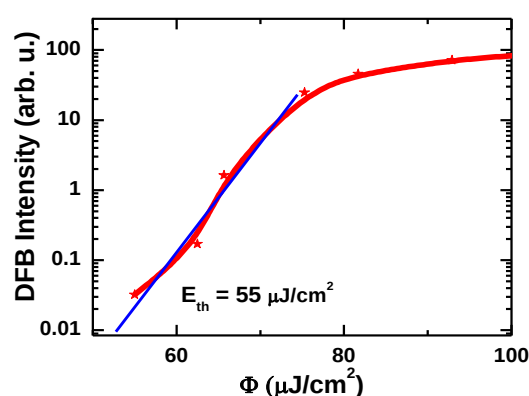


Fig. 3. DFB emission threshold determination.

### References

- [1] Y. Sheng, X. Wen, B. Jia, Z. Gan, Direct laser writing on halide perovskites: from mechanisms to applications, *Light: Advanced Manufacturing* 4 (2024) 1.

# ISO protokolų tobulinimas lazerine spinduliuote sukeltos pažaidos vertinimui: testavimo metodų lyginamoji analizė ir įžvalgos iš Monte Karlo simuliacijų

## Enhancing ISO protocols for laser damage assessment: a comparative study of test methods and execution insights from monte carlo simulations

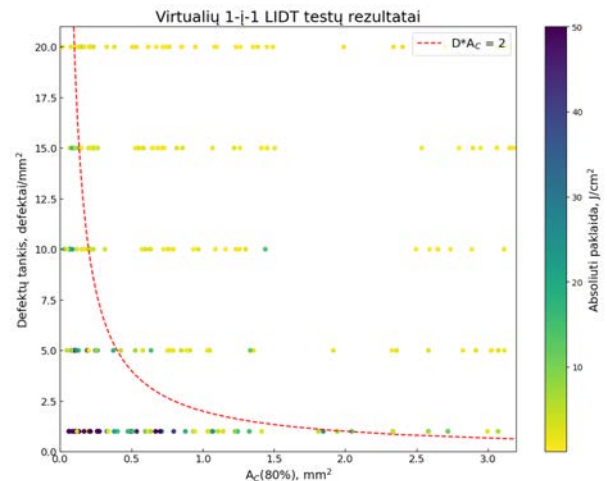
Martynas Keršys<sup>1</sup>, Andrius Melninkaitis<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus Universitetas, Fizikos Fakultetas, Lazerinių Tyrimų Centras, Saulėtekio al. 10, 10223 Vilnius  
[martynas.kersys@ff.stud.vu.lt](mailto:martynas.kersys@ff.stud.vu.lt)

Lazerine spinduliuote sukeltos pažaidos slenksčio (angl. *Laser induced damage threshold - LIDT*) vertinimas lazerinių komponentų atveju yra labai svarbus norint užtikrinti didelės galios lazerinių sistemų saugumą ir ilgalaikį patikimumą. Sparčiai besivystant lazerinėms technologijoms bei nuolat plečiantis lazerinės optikos tipų ir apšvitinimo režimų įvairovei, atsiranda poreikis tikslesnėms pažaidos slenksčio nustatymo metodikoms. Šiuo metu ISO 21254 standartai yra peržiūrimi, o siekiant atliepti pramonės poreikius, prie esamų klasikinių testavimo procedūrų (1-į-1 ir S-į-1) bus įtraukti du papildomi testavimo metodai – R(S)-į-1 ir Rastrinis skenavimas.

Kiekviena iš minėtų keturių testavimo procedūrų turi savitų ypatybių ir laisvės laipsnių, todėl šio tyrimo tikslas – juos suderinti bei pateikti praktines gaires, kaip sumažinti pažaidos nustatymo testų neapibrėžtį. Taip pat siekiama nustatyti kiekvienos procedūros taikymo ribas bei galimas klaidų rizikas. Praktikoje LIDT testavimas yra daug laiko reikalaujantis procesas, todėl siekdami sumažinti kaštus, sukūrėme Monte Karlo metodais paremtą virtualų LIDT testavimo modelį, kuris simuliuoja pažaidas inicijuojančius defektus optiniame mėginyje XY plokštumoje. Šis modelis apima tris pažaidos mechanizmų tipus – deterministinę pažaidos kilmę substrate, defektų sukeltą pažaidos mechanizmą dėl atsitiktinių defektų ir kaupiamąją-sugerties modą, atsirandančią dėl pakartotinio to paties bandinio taško apšvietimo. Pažaidai inicijuoti yra naudojami virtualūs lazerio pluoštai tiek su plokščiu, tiek su Gauso intensyvumo profiliu. Simuliuodami įvairius LIDT testavimo algoritmus, esant skirtingoms pradinėms sąlygoms ir testo parametrų, vertiname jų gebėjimą nustatyti tikslus pažaidos slenksčio rezultatus.

Pirminiai rezultatai rodo stiprią koreliaciją tarp LIDT testo rezultato tikslumo ir apšviesto bendro bandinio ploto. Siekdami įvertinti rezultatų patikimumą, įvedėme naują kokybės kriterijų –  $A_{80\%}$  parametą, apibūdinantį plotą, apšviestą su energija tarp 80% ir 100% mažiausio švitinimo lygio energijos, kuriame stebima pažaida. Rezultatai rodo, kad  $A_{80\%}$  ir defektų tankio sandauga yra glaudžiai susijusi su LIDT tikslumu (1 pav.), todėl šis parametras galėtų būti naudojamas kaip testo patikimumo matas nustatyto lazerinės pažaidos slenksčio vertinime. Be to, aptarsime įvairių LIDT paieškos algoritmų panašumus ir skirtumus bei jų parametrus. Pranešime taip pat bus aptariama įvairių pažaidos mechanizmų įtaką LIDT testų rezultatams.



1 pav. 1-į-1 LIDT testo simuliacijos rezultatai (naudojant Gauso spindulį, kurio skersmuo 200  $\mu\text{m}$ ). Kiekvienas taškas žymi atskirą virtualų LIDT testą, o spalva rodo absoliutų atstumą tarp gautos LIDT ir tikrosios „realios“ LIDT vertės. X ašyje pavaizduota apskaičiuotas kiekvieno testo  $A_{80\%}$  plotas, o Y ašyje – nustatytos defektų tankio reikšmės. Raudona brūkšninė linija žymi ribą, kur  $A_{80\%}$  ir defektų tankio sandauga yra lygi 2.

*Reikšminiai žodžiai: Lazerinės pažaidos slenkstis, Monte Karlo simuliacijos*

# Stiklo suvirinimas ultratrumpų impulsų lazerio papliūpomis

## Glass welding with ultrashort laser pulse bursts

Neda Mažeikytė<sup>1,2</sup>, Edgaras Markauskas<sup>2</sup>, Paulius Gečys<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius

[neda.mazeikyte@ftmc.lt](mailto:neda.mazeikyte@ftmc.lt)

Stiklas yra plačiai naudojamas įvairiose srityse. Dėl didelio skaidrumo, cheminio inertiškumo, aukštos lydymosi temperatūros ir tvirtumo jis tampa nepakeičiama medžiaga tiek technologinėse, tiek medicinos srityse [1].

Ultratrumpų impulsų lazerių panaudojimas stiklų suvirinime pasižymi dideliu suvirintos zonos mechaniniu stipriu ir suvirintų jungčių ilgaamžiškumu. Skirtingai nei tradiciniai jungimo būdai, tokie kaip klijavimas, ši technologija nepatiria valkšnumo, dujų išsiskyrimo ar senėjimo [2]. Tokiam suvirinimo metodui nereikalingas papildomas medžiagos sluoksnis, nes aštriai sufokusuoto lazerio pluošto dėka, stiklai tvirtai sujungiami perlydant tarpusluoksnį tarp dviejų suglaustų stiklo plokštelių [2].

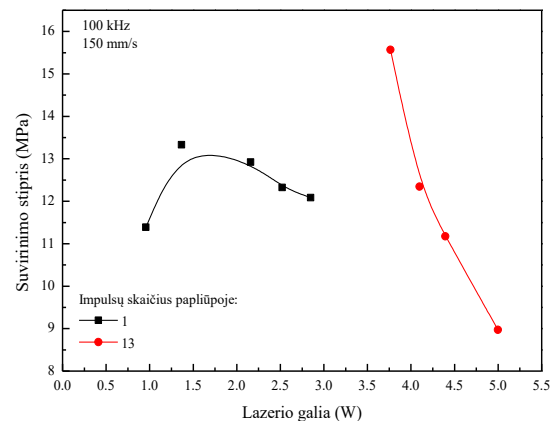
Nors suvirinant stiklus su optiniu kontaktu pasiekiamas didžiausias suvirinimo stipris tokio kontakto suformavimas tarp dviejų stiklų paviršių, ypač dideliame plote, yra sudėtingas ir nepritaikytas masinei gamybai [3, 4]. Pastaraisiais metais didelio susidomėjimo sulaukė neoptinio kontakto stiklų suvirinimas. Šis metodas sėkmingai pademonstruotas naudojant greitaeigius galvanometrinius skenerius, veikiančius sąlyginai laisvo fokusavimo režimu [3]. Tai ne tik paspartina procesą, bet ir sumažina jo kainą, kadangi paviršių nereikia apdoroti pagal aukščiausius optinio kontakto reikalavimus. Vis dėlto, šiuo būdu pasiekiamas suvirinimo stipris yra gerokai mažesnis nei optinio kontakto atveju. Siekiant įveikti šiuos apribojimus, pradėtas taikyti papliūpų režimas, kuris, palyginti su vieno impulso režimu, padidina medžiagos apdorojimo našumą ir efektyvumą [5].

Šiame darbe buvo tirtas natrio-kalcio stiklo neoptinio kontakto suvirinimas, naudojant pikosekundinį lazerį, veikiantį 1064 nm bangos ilgio ir MHz dažnio papliūpų režimu. Suvirinimas buvo atliekamas skenuojant stačiakampio formos plotelius, kurių matmenys buvo  $3 \times 0,5 \text{ mm}^2$ . Optimizuojant suvirinimo eksperimento parametrus, vienas svarbiausių rodiklių yra suvirinimo stipris. Suvirinimo stipris buvo matuojamas dviem skirtingais būdais: tempiant suvirintus stikliukus statmena suvirinimo plokštumai kryptimi bei matuojama šlyties jėga (išilgine suvirinimo plokštumai kryptimi).

Tyrimo rezultatai atskleidė netiesinę priklausomybę tarp suvirinimo stiprio ir impulsų skaičiaus papliūpoje. Esant mažesniai subimpulsų skaičiui, suvirinimo stipris iš pradžių mažėjo ( $<4$ ), toliau didinant jų skaičių, stipris reikšmingai išaugo, pasiekdamas maksimumą esant 13 subimpulsų papliūpoje.

Lyginant papliūpų režimą su pavienių impulsų suvirinimu, nustatyta, kad optimizuotas papliūpų režimas

pagerino statmeno tempimo stiprį (žr. 1 pav.) ir šlyties stiprį atitinkamai 27 % ir 34 %. Šie rezultatai rodo MHz papliūpų režimo potencialą gerinant stiklo suvirinimo kokybę.



1 pav. Suvirinimo stiprio priklausomybė nuo vidutinės lazerio galios su 1 ir 13 impulsų papliūpoje.

*Reikšminiai žodžiai: ultratrumpi lazerio impulsai, neoptinis kontaktas, lazerinis suvirinimas, papliūpa.*

### Literatūra

- [1] Luible, A., Haldimann, M., et al. Structural use of Glass. International Association for Bridge and Structural Engineering, 2008, 6-8.
- [2] Zhang, J., Shanghang, C., et al. The effect of gap on the quality of glass-to-glass welding using a picosecond laser. Optics and Lasers in Engineering, 2020, Vol. 134.
- [3] Jia, X., Li, K., et al. Multi-scan picosecond laser welding of non-optical contact soda lime glass. Optics & Laser Technology, 2023, Vol 161, 109164.
- [4] Chen, H., Deng, L., et al. Picosecond laser welding of glasses with a large gap by a rapid oscillating scan. Optics Letters, 2019, vol. 44, 2570-2573.
- [5] Žemaitis, A., Gečys, et al. Highly-efficient laser ablation of copper by bursts of ultrashort tuneable (fs-ps) pulses. Scientific Reports, 2019, vol. 9, 12280.

# Plazmoninės difrakcinės gardelės formavimas ant ITO padėklo naudojant tiesioginį lazerinį rašymą

## Formation of plasmonic diffraction grating on ITO glass using direct laser writing

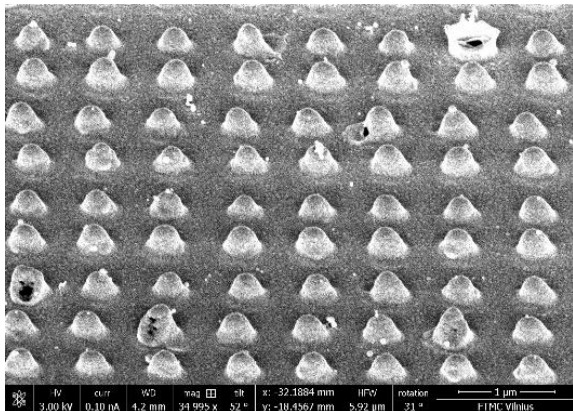
Marijus Mozdeikis<sup>1</sup>, Evaldas Stankevičius<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

[marijus.mozdeikis@ftmc.lt](mailto:marijus.mozdeikis@ftmc.lt)

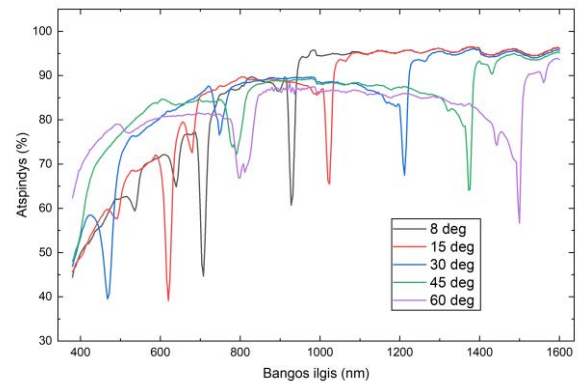
Plazmoninių nanostruktūrų formavimas ant metalinės dangos yra plačiai nagrinėjamas dėl paviršiaus hidrofobinių savybių, dėl praktinio pritaikymo įvairiuose jutikliuose, medicinoje bei kitose technologijose [1]. Visa tai įmanoma dėl plazmoninio rezonanso, kuris įvyksta šviesai sužadinus ant metalinės dangos paviršiaus esančius elektronus. Žinoma, atsitiktinė krentanti šviesa negali būtų sugerta ir sužadinti elektronų. Šviesos fotonų judesio kiekis yra mažesnis už plazmonų ir jų sąveika nėra galima. Šis neatitikimas kompensuojamas išsklaidant šviesą metalinės dangos paviršiuje tokiu būdu padidinant jos judesio kiekį [2]. Tam tinka metalinės dangos paviršiuje suformuoti nanogumbeliai, kurie veikia kaip difrakcinė gardelė (1 pav.).



1 pav. Formuojamų sidabro struktūrų nuotrauka daryta su skenuojančiu elektroniniu mikroskopu

Taigi, šio tyrimo metu siekėme suformuoti plazmoninę difrakcinę gardelę naudojant tiesioginį lazerinį rašymą ant ITO stiklo padengto 50 nm storio sidabro sluoksniu. ir atrasti sidabro darinių masyvo formavimo sąlygas (lazerio impulso energiją bei skenavimo greitį), kurias naudojant gardelė pasižymėtų kokybiškiausiais plazmoniniais rezonais. Rezonansų charakteristikų analizavimui pasitelkėme P-poliarizuotų bei S-poliarizuotų bangų atspindžio spektrus, kuriuose atspindys tikrinamas matomos šviesos – infraraudonųjų spindulių dažnio bangų intervale (2 pav.). Pačių rezonansų kokybę lyginome pagal MQ faktoriaus formulę (1), kurioje įvertinamas jų gylis –  $h$ , plotis ties puse maksimalaus gylio –  $\Delta\lambda$ , rezonansą sukeliančios bangos ilgis –  $\lambda_{\text{res}}$ .

$$MQ = \frac{\lambda_{\text{res}} \times h}{\Delta\lambda \times 100\%} \quad (1)$$



2 pav. Difrakcinės gardelės atspindžio spektras, kuriame matomi plazmoniniai rezonansai, šviesai krentant skirtingiems kampams.

Atlikome tyrimą 2,8 – 8,4 mm/s skenavimo greičio bei 0,4 – 0,8 nJ lazerio impulso energijos intervaluose, išsiaiškinome, kad geriausios plazmoninių rezonansų charakteristikos ant ITO stiklo padengto 50 nm sidabro sluoksniu pasireiškia formuojant difrakcinę gardelę su 0,5 nJ impulso energija ir 5,6 mm/s skenavimo greičiu. Tokios gardelės plazmoninių rezonansų šviesos sugerties padidėjimas viršijo 40%, o MQ faktoriaus vertė siekė net 48,42.

*Reikšminiai žodžiai: Plazmoninis rezonansas, tiesioginis lazerinis rašymas, plazmoninė difrakcinė gardelė.*

### Literatūra

- [1] Liudvinavičius R., Vilkevičius K., Stankevičius E., *Applied Surface Science*, 2025, 711, 164127.
- [2] Vilkevičius K., Selskis A., Stankevičius E., *Applied Surface Science*, 2023, 617, 156629.

# Priverstinės Briliueno sklaidos lazerio impulsų spaustuvas naudojant HT-230 skystį

## HT-230 liquid based stimulated Brillouin scattering laser pulse compressor

Rugilė Pečiulytė, Paulius Mackonis, Aleksėj Rodin, Augustė Černeckytė

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

[rugile.peciulyte@ftmc.lt](mailto:rugile.peciulyte@ftmc.lt)

Didelės energijos pikosekundinių lazerių paklausa sparčiai auga. Tokie lazeriai turi plačias taikymo galimybes nuo lazerinės palydovų nuotolinės detekcijos ir lazerinės kosmetologijos iki didelio našumo medžiagų apdirbimo. Vis dėlto, įprasti pikosekundinių lazerio impulsų generavimo metodai yra riboti. Kokybės moduliacijos būdu generuojami sub-ns trukmės impulsai, o modų sinchronizacija užtikrina tik mažą išvadinę impulsų energiją. Kita vertus, sub-ns impulsai lazeriniame apdirbime sukelia šiluminę pažaidą, o maža energija nėra tinkama didelių plotų apdirbimui. Nors didelės energijos pikosekundiniai impulsai gaunami naudojant brangesnius spinduolių–stiprintuvų (MOPA, angl. *master-oscillator power amplifier*) sistemas, tokiu atveju dažnai nukenčia išvadinio pluošto kokybė. Todėl mažos savikainos, didelės energijos pikosekundinių lazerių kūrimas, užtikrinant aukštą pluošto kokybę, vis dar kelia nemažai iššūkių.

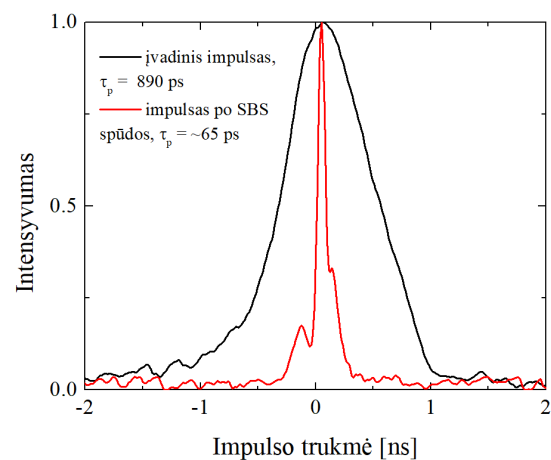
Alternatyva = impulsų spūda taikant priverstinę Briliueno sklaidą (SBS, angl. *stimulated Brillouin scattering*), naudojant palyginti nebrangius pasyvios kokybės moduliacijos nanosekundinius lazerius. SBS bangos fronto apgrąžos veidrodis leidžia pagerinti pluošto kokybę, kompensuojant bangos fronto iškraipymus, kuriuos sukelia optiniai elementai pluošto sklaidimo ir stiprinimo metu.

Ankstesniuose tyrimuose SBS-aktyviose terpėse impulsai buvo suspausti iki ~70 ps anglies tetrachloride ( $\text{CCl}_4$ ) [1] ir iki ~90 ps perfluoroktane ( $\text{C}_8\text{F}_{18}$ ) [2]. Šiame darbe panaudotas HT-230 skystis, pasižymintis itin trumpu akustinių fononų gyvavimo laiku [3] ir aukštu optinės pažaidos slenksčiu. Tyrimo tikslas = ištirti įvairias „savaiminio užkrato“ (angl. *self-seeded*) SBS-spaustuvų konfigūracijas su HT-230 skysčiu, naudojant nanosekundinį kokybės moduliacijos lazerį. Buvo tiriamos SBS-spaustuvų schemos naudojant skirtingo židinio nuotolio fokusuojančius lęšius, siekiant nustatyti optimalias veikimo sąlygas. Pasiiekta maksimali impulsų spūda iki ~60 ps trukmės.

Ekspimente naudota keturių lėkių stiprintuvo schema. Užkrato šaltinis kompaktiškas pasyvios kokybės moduliacijos Nd:YAG lazeris (UAB „QS Lasers“), generuojantis 1064 nm bangos ilgio, 2 mJ energijos, ~1,1 ns trukmės impulsus 10 Hz dažniu. Impulsai buvo stiprinami šoninio diodinio kaupinimo Nd:YAG kristalo stiprintuve iki ~10 mJ. SBS-spūda vyko 35 cm ilgio kiuvetėje, pripildytoje nanofiltru išvalytu HT-230 skysčiu.

Atspindžio energijos matavimai parodė, kad didžiausias SBS atspindžio koeficientas (~57%) pasiektas naudojant  $f = 225$  mm lęšį. Tačiau trumpiausią

SBS Stokso impulso trukmė (~60 ps) gauta su  $f = 250$  mm lęšiu prie ~7 mJ įvadinės energijos (1 pav.), nors šiuo atveju atspindžio koeficientas siekė tik ~37%. Atsižvelgiant į tai, kad tyrime prioritetas buvo SBS laikinės spūdos optimizavimas, tolimesniems bandymams pasirinktas  $f = 250$  mm lęšis ir 7 mJ įvadinė impulso energija.



1 pav. Įvadinis ir Stokso impulsai optimaliomis SBS-spūdos sąlygomis,  $\tau_p$  – impulso trukmė pusaukštyje.

Parodyta, kad „savaiminio užkrato“ SBS metodas leidžia sumažinti slenkstį, pasinaudojant Stokso komponentu atspindėtame pluošte, taip pat pagerinti energijos stabilumą, sumažinti laikinį nestabilumą (angl. *jitter*) ir pasiekti trumpesnius impulsus [1,2]. Todėl SBS-spaustuvas, integruotas su keturių lėkių stiprintuvu, gali būti kompaktiškas ir efektyvus sprendimas didelės energijos pikosekundiniams impulsams generuoti.

Suspausti didelės energijos pikosekundiniai impulsai su puikia pluošto kokybe gali būti pritaikyti lazerinėje dermatologijoje, ypač šalinant tatuiruotes, taip pat didelio našumo funkcinių medžiagų gamybai, naudojant interferencinę abliaciją.

*SBS-spūda, priverstinė Briliueno sklaida, anglies tetrachloridas, perfluoroktanas.*

### Literatūra

- [1] A.S. Dement'ev, I. Diomin, E. Murauskas, N. Slavinskis, *Quantum Electronics* **41** (2011).
- [2] A.M. Rodin, A. Černeckytė, P. Mackonis, A. Petrušėnas, *Photonics* **10**, 1060 (2023).
- [3] Y. Chen, B. Tan, D. Jin, et al., *High Power Laser Science and Engineering* **12**, 10 (2024).

# Optimizuoto optinio fazės poslinkio UV veidrodžiai sudaryti iš standartinių ir nanostruktūrizuotų sluoksnių

## UV mirrors with enchanted Optical Phase Shift control using combination of standard and nanostructured layers

Ignas Pikas<sup>1</sup>, Simas Melnikas<sup>1</sup>, Saulius Tumėnas<sup>1</sup>, Lukas Ramalis<sup>1</sup>, Lina Grinevičiūtė<sup>1</sup>

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

[Ignas.pikas@ftmc.lt](mailto:Ignas.pikas@ftmc.lt)

Vis labiau augant apdorojamos informacijos kiekiui bei didėjant įslaptintos informacijos poreikiui atsiranda ir naujų technologijų, gebančių efektyviai apdoroti didelį informacijos srautą, reikmė. Taip pat pasaulyje vykstant ne vienam kariniam konfliktui, didėjant piniginių perlaidų, dokumentų bei vykstant konfidencialios asmeninės informacijos skaitmenizacijai vis svarbesnis ir aktualesnis tampa efektyvus informacijos kodavimas ir šifravimas. Dėl šių priežasčių ne viena tyrimų grupė tiria kvantines aplikacijas ir jų potencialą informacijai apdoroti ir koduoti. Pastaraisiais metais kvantiniai kompiuteriai ir kvantinė komunikacija susilaukia didžiulio susidomėjimo tiek iš mokslininkų, tiek iš pramonės ir pačių valstybių [1,2]. Šiose technologijose naudojamos lazerinės sistemos, veikiančios ultravioletiniame (UV) ir regimajame (VIS) spinduliuotės spektruose. Tai sukelia papildomų iššūkių optiniams komponentams, nes pasiekti žemą sklaidą, gerą spektrinį atsaką ir užtikrinti komponentų ilgaamžiškumą UV regione sudėtinga. Be to, net atsitiktiniai išsklaidytos šviesos ar nekoherentiniai fotonai daro įtaką kvantinei būsenai, todėl kvantinių kompiuterių lazerinėms sistemoms būtini išskirtinai aukštomis specifikacijomis ir stabilumu pasižymintys optiniai komponentai.

Kvantinėms sistemoms reikia keletu vienu metu naudojamų skirtingų bangos ilgių, todėl kiekvienas iš jų turi būti nukreipiamas ir valdomas naudojant atitinkamą optinį kelią. Paprastai tokiose sistemose optinis kelias yra sudarytas iš veidrodžių, lęšių, poliarizatorių, fazinių plokštelių ir dichroinių veidrodžių. Kiekvienas optinis komponentas spindulio kelyje sukelia sugerties ir sklaidos nuostolius, fazės pokytį, pluošto formos iškreipimus ir kt. Kadangi kvantinėse sistemose naudojama daugybė skirtingų optinių komponentų, net ir mažiau tyrinėti optiniai parametrai, pavyzdžiui optinės fazės poslinkio kontrolė, turi didelės įtakos galutiniam sistemos našumui. Matydami šių sistemų potencialą ir vis didėjantį susidomėjimą mokslininkai pradėjo ieškoti būdų, kaip patobulinti optinės fazės poslinkio kontrolę, spektrinį atsaką ir pailginti UV komponentų veikimo laiką. Klasikiniai optinių komponentų gamybos metodai turi ribojimų (daugiausia dėl fundamentinių dangų dengimo technologijos principų ir naudojamų medžiagų savybių) ir negeba pasiekti pakankamai aukštų jau minėtų parametrų verčių.

Nauji dangų garinimo metodai ir galimos medžiagos (pavyzdžiui metamedžiagos ar nanostruktūros)

tyrinėjamos siekiant išgauti aplikacijoms reikalingas vertes. Viena iš potencialią turinčių technologijų patenkinti reikiamą specifikacijų poreikį struktūrinių dangų formavimas garinant kampu – GLAD metodika. Kitų mokslininkų darbai parodė, jog struktūrinės dangos geba pasiekti geresnę lazerinę pažaidą (LIDT) ir sumažinti sklaidą UV bangos ilgiuose. Mūsų simuliacijos ir teoriniai modeliai parodė, jog kombinuojant jonapluoščio dulkinimo (IBS) ir garinimo kampu (GLAD) technologijas, galima pasiekti kvantinėms technologijoms reikalingas optinės fazės poslinkio vertes [3]. Šiame darbe įvertinome UV veidrodžių gamybos metodiką naudojant IBS ir GLAD dengimo technologijas. Atlikome simuliaciją ir teorinį dangos dizainą veidrodžiams, optimizuotiems 399nm bei 369nm veikiantiems 45 laipsnių spinduliuotės kritimo kampu. Šie bangos ilgiai buvo pasirinkti siekiant suformuoti veidrodį skirtą  $\text{Yb}^{+}$  jonų kvantinėms sistemoms. Dangos optinis dizainas buvo sumodeliuotas naudojant OptiLayer programinę įrangą. Šiame dizaine kaip žemo lūžio rodiklio medžiaga buvo naudojamas GLAD nanostruktūrizuotas  $\text{SiO}_2$ , o kaip aukšto lūžio rodiklio medžiagos buvo pasirinkti  $\text{HfO}_2$  bei  $\text{Ta}_2\text{O}_5$ . Įvertinome skirtingus galimus dizainus ir pasirinkome labiausiai optimalų. 35nm, 50nm, 70nm ir 100nm nanostruktūrizuoto silicio monosluoksniai buvo užgarinti naudojant GLAD metodiką. Monosluoksnių pralaidumo koeficientas buvo išmatuotas 0°, 8°, 30° ir 45° kampais. Taip pat atlikti elipsometriniai matavimai ir sudarytas modelis. Elipsometrinis modelis ir matavimai patvirtino, jog lūžio rodiklis struktūros viršutinėje ir apatinėje dalyje skiriasi, todėl į tai reikia atsižvelgti dangos garinimo metu. Dangos struktūros taip pat buvo vertintos atliekant skenuojančio elektronų mikroskopo (SEM) nuotraukas. Šiame darbe yra aptariamas teorinis veidrodžių dangos modelis, galimos gamybos strategijos ir potencialus optinio fazės poslinkio vertės pagerinimas. Taip pat vertinamos ir su šiuo metu rinkoje esančiais sprendimais lyginamos mūsų dangos dizaino pasiekiamos vertės.

### Literatūra

- [1] Z.Chen et al, "Enhancing strontium clock atom interferometry using quantum optimal control," PHYSICAL REVIEW A 107, 063302 (2023)
- [2] D. R. Scherer et al, "UV laser beam switching system for Yb trapped ion quantum information processing", Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering 8272:17
- [3] LGrinevičiūtė et al "Enhancement of high reflectivity mirrors using the combination of standard and sculptured thin films" Optics & Laser Technology volume 129 September 2020, 106292

# GaAsBi puslaidininkinių emiterių epitaksija ir prietaisų dizaino optimizavimas

## Epitaxy of GaAsBi-based Quantum Structures and Optimization of Device Design

Aivaras Špokas<sup>1</sup>, Andrea Zelioli<sup>1</sup>, Andrius Bičiūnas<sup>1</sup>, Virginijus Bukauskas<sup>1</sup>, Justinas Glemža<sup>2</sup>, Sandra Pralgauskaitė<sup>2</sup>,  
Mindaugas Kamarauskas<sup>1</sup>, Martynas Talaikis<sup>1</sup>, Bronislovas Čechavičius<sup>1</sup>, Evelina Dudutienė<sup>1</sup>, Jonas Matukas<sup>2</sup>,  
Renata Butkutė<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius  
aivaras.spokas@ftmc.lt

Artimosios infraraudonosios (NIR) spinduliuotės sritis yra itin plačiai taikoma daugelyje sričių, tokių kaip komunikacija, įvairių aplinkos bei žmogaus gyvybinių rodiklių stebėjimui. Vienas tokių pavyzdžių yra pulsoksimetrai, kuriuose deguonies koncentracija įvertinama standartiškai naudojant raudoną (660 nm) ir NIR (940 nm) plataus spektro šviestukus [1]. Nors ši technologija plačiai taikoma, siūlomi patobulinimai parenkant kitų bangos ilgių emiterius. Naudojant du emiterius, veikiančius NIR spektrinėje srityje, yra išvengiama papildomos kalibracijos ir netikslumų, susijusių su prasiskverbimo gylių skirtumais. Be to, siauro spektro emiteriai, tokie kaip lazeriniai diodai gali užtikrinti dar didesnę tikslumą [2]. Viena iš galimų kombinacijų yra 800 nm ir 1100 nm emiteriai, turintys beveik identišką prasiskverbimo gylį.

800 nm emisija lengvai pasiekama naudojant klasikinius AlAs ir GaAs junginius, tačiau 1100 nm sritis reikalauja sudėtingesnių, medžiagų inžinerijos strategijų. Dažniausiai naudojami InGaAs junginiai nėra optimalūs, nes ant GaAs auginamose kvantinėse struktūrose 1100 nm emisijai reikalingas In kiekis sukelia gardelės nesutapimo dislokacijas. Šie defektai mažina prietaisų našumą ir gamybos išeigą, nes ne visas puslaidininkinės plokštelės plotas gali būti panaudojamas gamybai.

GaAsBi gali būti naudojamas kaip alternatyvus junginys minėtam spektriniam ruožui. Bi įterpimas į GaAs gardelę itin sparčiai sumažina draustinės juostos tarpą (iki 88 meV/(%Bi)) [3]. Tai leidžia pasiekti emisiją ties 1100 nm įvedant sąlyginai mažą Bi kiekį ir išvengti gardelės nesutapimo dislokacijų. Be to, GaAsBi pagrindu pagaminti prietaisai pasižymi mažu emisijos spektro jautrumu temperatūros pokyčiams ir gali veikti kambario temperatūroje be papildomo aušinimo [4]. Taip pat, svarbu pastebėti, kad įvedant virš 10.5 % Bi apribojamas vienas iš pagrindinių Ožė rekombinacijos kanalų [5]. Būtent šaldymas ir Ožė rekombinacija riboja dabartinių NIR emiterių energinį našumą, todėl GaAsBi galėtų būti itin svarbi aktyviosios terpės alternatyva NIR emiterių rinkos plėtrai.

Platesnį GaAsBi panaudojimą riboja itin jautrus, bei komplikotas puslaidininkio auginimas molekulinio pluoštelių epitaksijos (MBE) metodu. Didelis V grupės elementų As ir Bi dydžių skirtumas apsunkina Bi įterpimą, todėl reikalingos nestandartinės auginimo sąlygos. Pirmiausia, svarbu užtikrinti žemą auginimo temperatūrą, nes Bi įterpimas aukštesnėje nei 440 °C

temperatūroje neįmanomas. Taip pat, būtina riboti As srautą, kad As ir Ga srautų santykis būtų artimas vienetui. Esant šioms sąlygoms stebimas geriausias Bi įkomponavimo efektyvumas [6].

Šiame darbe pristatomos lazerinių diodų (LD) ir šviestukų (LED) struktūros užaugintos MBE metodu. Struktūros buvo tiriamos elektroluminescencijos, atominių jėgų mikroskopijos metodais. Stačiakampių GaAsBi kvantinių duobių pagrindu pagaminti prietaisai pademonstravo centrinės emisijos linijas nuo 1000 iki 1142 nm kambario temperatūroje, tačiau LD įveikinimo srovės impulsiniame kaupinimo režime (50 ns, 1 kHz) viršijo 2 A, o smailinė galia nesiekė 10 mW.

Lazerių parametrai buvo pagerinti pasitelkiant barjerus su paraboliniiais potencialo profiliais, kurie padidina krūvininkų pagavimą, taip pat atlikus padėklo ploninimo procedūras. Apjungus abi strategijas, įveikinimo srovė sumažėjo net iki 10 kartų, o galia išaugo apie 14 kartų. Temperatūriniai tyrimai atskleidė prietaisų emisijos spektro stabilumą ir įrodė LD veikimą aukštesnės nei 40 °C temperatūros aplinkoje. Dalis pagamintų emiterių buvo užauginti apverstu dizainu (p-tipo kontaktas apačioje) ant nukeliamojo AlAs sluoksnio. Tokios puslaidininkinės struktūros reikalingos padėklo nukėlimui ir integracijai ant Si platformų. Stebėta emisija iš tokių struktūrų ir pasitarnavo kaip perspektyvios technologijos įgyvendinamumo įrodymas.

*Reikšminiai žodžiai: Epitaksija, lazeriniai diodai, šviestukai, daugiabinės kvantinės duobės, GaAsBi.*

### Literatūra

- [1] Sinex, J.E. Pulse oximetry: principles and limitations. *Am. J. Emerg. Med.* 1999, 17, 59–67.
- [2] Hay, O.Y.; Cohen, M.; Nitzan, I.; Kasirer, Y.; Shahroor-Karni, S.; Yitzhaky, Y.; Engelberg, S.; Nitzan, M. Pulse oximetry with two infrared wavelengths without calibration in extracted arterial blood. *Sensors* 2018, 18, 3457.
- [3] Francoeur, S.; Seong, M.J.; Mascarenhas, A.; Tixier, S.; Adamcyk, M.; Tiedje, T. Band gap of GaAs<sub>1-x</sub>Bi<sub>x</sub>, 0 < x < 3.6%. *Appl. Phys. Lett.* 2003, 82, 3874–3876.
- [4] Tominaga, Y.; Oe, K.; Yoshimoto, M. Low temperature dependence of oscillation wavelength in GaAs<sub>1-x</sub>Bi<sub>x</sub> Laser by photo-pumping. *Appl. Phys. Express* 2010, 3, 062201.
- [5] Alberi, K.; Dubon, O.D.; Walukiewicz, W.; Yu, K.M.; Bertulis, K.; Krotkus, A. Valence band anticrossing in GaAs<sub>1-x</sub>Bi<sub>x</sub>. *Appl. Phys. Lett.* 2007, 91, 051909.
- [6] Richards, R.D.; Bastiman, F.; Hunter, C.J.; Mendes, D.F.; Mohamad, A.R.; Roberts, J.S.; David, J.P.R. Molecular beam epitaxy growth of GaAsBi using As<sub>2</sub> and As<sub>4</sub>. *J. Cryst. Growth* 2014, 390, 120–124.

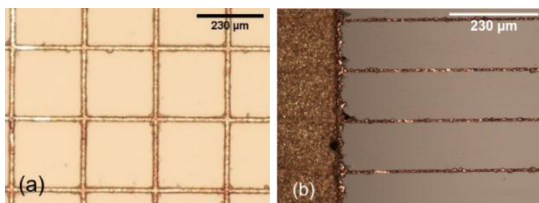
# Lazeriu nusodintų elektrodų ir elektrochrominių plonų dangų kombinacija išmaniųjų langų taikymams

## Combination of Laser-Deposited Electrodes with Electrochromic Thin Films for Smart Window Applications

Titas Tamošauskas, Dainius Balkauskas, Alexandr Belosludtsev  
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius  
[titas.tamosauskas@ftmc.lt](mailto:titas.tamosauskas@ftmc.lt)

Auganti energijos paklausa ir ekologiniai iššūkiai skatina diegti technologijas, kurios mažina pastatų energijos suvartojimą. Viena perspektyviausių kryptių – elektrochrominiai „išmanieji langai“, kurių optinės savybės gali būti valdomos elektriniu signalu. Keičiant įtampą, galima reguliuoti UV ir IR šviesos spinduliuotės patekimą į patalpas.

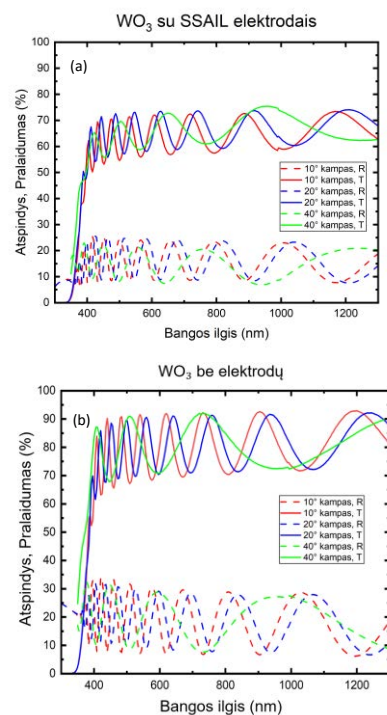
Naudojant lazeriu aktyvuoto paviršiaus metalo nusodinimo technologiją (angl. SSAIL), buvo sukurta skaidrių mikrostruktūrinių metalinių elektrodų gamybos metodika ant stiklo [1]. Tokie elektrodai gali tapti alternatyva dažnai naudojamiems ITO elektrodams, kurie yra brangūs ir kenksmingi aplinkai. Šiame tyrime aptariama elektrodų formavimo eiga ir lyginami įvairių jų dizainai [2]. Įvertinus femtosekundinių ir pikosekundinių lazerio impulsų trukmės įtaką, nustatyta, kad pikosekundiniai impulsai yra tinkamesni platesnių (~31  $\mu\text{m}$ ) ir aukštesnių (~2  $\mu\text{m}$ ) elektrodų gamybai, o femtosekundiniai impulsai – siauresnių (~8  $\mu\text{m}$ ) ir žemesnių (~1  $\mu\text{m}$ ) elektrodų formavimui.



1 pav. Skaidrių mikromastelio elektrodų tipai ant stiklo: a) tinklės, pagamintas naudojant 515 nm bangos ilgį, 1 ps impulsus, 10 kHz dažnį, 5 mm/s greitį, ~10  $\mu\text{J}$  energiją; b) linijos, pagamintos naudojant 515 nm bangos ilgį, 340 fs impulsus, 50 kHz dažnį, 10 mm/s greitį, 2,5  $\mu\text{J}$  energiją.

Šiame tyrime taip pat nagrinėjamos  $\text{WO}_3$  dangos, nusodintos magnetroniniu dulkinimu ant pakreiptų optinių padėklų, kurių kampai siekia 10°, 20° ir 40°. Padėklo pakreipimas nusodinimo metu lemia unikalių, anizotropinių mikrostruktūrų susidarymą, kurios reikšmingai pagerina jonų transportavimą į elektrochrominę dangą. Dėl to pasiekiamas spartesnis perjungimo greitis ir didesnis spalvos keitimo efektyvumas – pagrindinės elektrochrominių dangų savybės. Buvo ištirti pralaidumo ir atspindžio spektrai: mėginių su skaidriais elektrodais, suformuotais SSAIL metodu, ir mėginių, sudarytų tik iš elektrochrominės  $\text{WO}_3$  dangos. Nustatyta, kad bandiniai be SSAIL elektrodų (tik  $\text{WO}_3$ ) pasižymėjo didesniu šviesos pralaidumu (68-92 %), būdingu šiai medžiagai. Bandinių su SSAIL elektrodais pralaidumo reikšmės siekė nuo

54 % iki 74 %, bendras pralaidumas buvo mažesnis dėl papildomo šviesos sklaidos, kuri sukelia SSAIL elektrodų mikrostruktūra. Didinant optinio padėklo pakrypimo kampą, spektrai tapo lygesni.



2 pav.  $\text{WO}_3$  dangų pralaidumo spektrai su elektrodais (a) ir be elektrodų (b) pralaidumo ir atspindžio spektrai.

*Reikšminiai žodžiai: elektrochrominiai langai, išmanieji langai, lazerinis nusodinimas, magnetroninis dulkinimas.*

### Literatūra

- [1] M. Sadauskas, V. Vrubliauskaitė, E. Kvietkauskas, D. Balkauskas, R. Trusovas, A. Belosludtsev, K. Ratautas, Microscale copper traces by laser induced copper deposition on glass and PET substrate, Opt. Laser Technol. 161 (2024)
- [2] Dainius Balkauskas, Evaldas Kvietkauskas, Modestas Sadauskas, Viktorija Vrubliauskaitė, Romualdas Trusovas, Karolis Ratautas, Alexandr Belosludtsev, Transparent microscale electrodes formed by laser-induced metal deposition on glass for smart windows application, Optics & Laser Technology, <https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2025.113669>.

## **Stendinė sesija 2**

Astrofizika, astronomija ir kosmologija,

Aplinkos fizika,

Biofizika ir medicinos fizika,

Nanomokslas ir nanotechnologijos,

Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika

## Jaunų padrikųjų spiečių dinaminės istorijos tyrimas

### Discovering the dynamic history of selected young open clusters

Justas Zdanavičius<sup>1</sup>, Dmitrij Semionov<sup>1</sup>, Robert Boyle<sup>2</sup>, Saulius Raudeliūnas<sup>1</sup>, Marius Maskoliūnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>VU, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, LT-10222 Vilnius

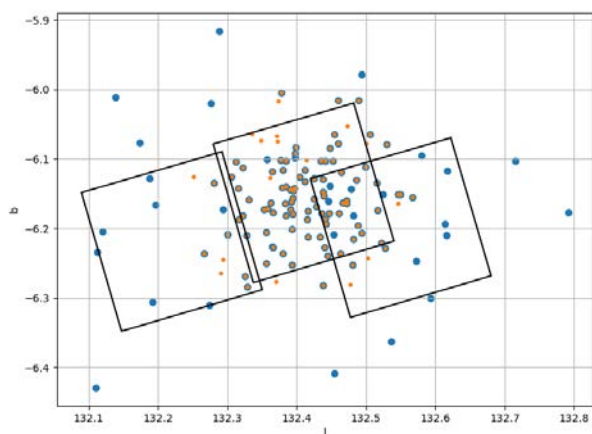
<sup>2</sup>Vatican Observatory Research Group, Steward Observatory, Tucson, AZ 85721, USA.

[dmitrij.semionov@ff.vu.lt](mailto:dmitrij.semionov@ff.vu.lt)

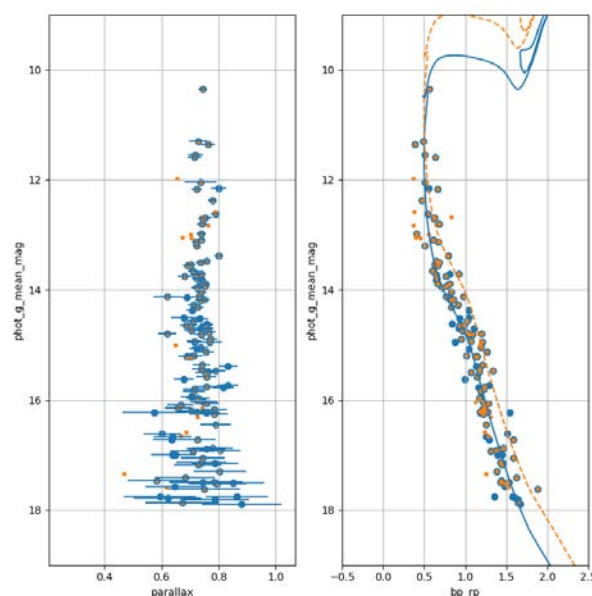
Padrikųjų spiečių iširimo laikas arba masės praradimo sparta yra esminiai parametrai nustatant bendras Galaktikos disko ir sferoido žvaigždinių populiacijų stebimas savybes. Tam yra naudojamos gravitacinės sąveikos modeliavimo programos, tokios kaip NBody6 [1]. Tačiau spiečiaus dinaminės evoliucijos laiko skale nėra tiesiogiai susijusi su jo žvaigždžių cheminę evoliuciją ir priklauso nuo aplinkos faktorių, tokių kaip Galaktikos gravitacinio potencialo kitimai.

Tam, kad kuo vienareikšmiškiau surišti spiečiaus žvaigždinės populiacijos amžių su jo dinaminio evoliucijos amžiumi mes pasitelkiame daugiaspalvė Vilniaus fotometrinių sistema ir Gaia DR3 astrometrinius duomenys. Tyrimui buvo atrinkti keli jauni padrikieji spiečiai, esantys 0.7 – 2 kpc atstumu nuo Saulės ir šiuo metu laikomi izoliuotais (t. y. nedalyvaujantys artimoje sąveikoje su molekulinėmis debesų kompleksais ar kitais spiečiais). 2023 – 2025 m. buvo atlikti jų stebėjimai naudojant Vatikano astronominės observatorijos (VATT) ir Molėtų astronominės observatorijos (31/51 cm Maksutovo sistemos) teleskopus.

Atlikus kiekvienos srities žvaigždžių klasifikaciją ir naudojant astrometrinius duomenys buvo nustatyti tikėtiniausi spiečiaus nariai, jų bendras amžius, metalingumas ir ekstinkcija. Vieno iš tirtų spiečių narių pasiskirstymai yra pavaizduoti Pav 1 ir 2.



1 pav. NGC 744 spiečiaus tikėtiniausių narių pasiskirstymas danguje. Mėlynai yra pažymėtos žvaigždės, atrinktos šiame darbe, raudonai – pateikti [2]. Juodais rėmeliais pažymėti VATT stebėjimų laukai.



2 pav. NGC 744 ryškio-paralakso (kairėje) ir ryškio-spalvos (dešinėje) diagramos. Objektų žymėjimas atitinka pav.1. Dešinėje papildomai pavaizduotos Padova-Trieste grupės [3] teorinės izochronos, atitinkančios nustatytiems spiečiaus parametrams.

Gauti pasiskirstymai buvo palyginti su mažos masės padrikųjų spiečių modeliais, apskaičiuotais naudojant NBody6 programą.

*Reikšminiai žodžiai: žvaigždžių spiečiai, Galaktika*

#### Literatūra

- [1] Wang et al. 2016, MNRAS 458, 1450
- [2] Cantat-Gaudin et al. 2018, A&A, 618A, 93C
- [3] Chen et al. 2014, MNRAS 444, 2525

# Paprasti sąryšiai sudėtingose AGN tėkmėse: $M$ - $\sigma$ sąryšio atsiradimas realistiškuose galaktikų centriniuose telkiniuose

## Simple relations from complex AGN outflows: how the $M$ - $\sigma$ relation emerges in a realistic galactic bulges

Matas Tartėnas<sup>1</sup>, Eimantas Skuodas<sup>2</sup>, Kastytis Zubovas<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir Technologijos Mokslų Centras, Fundamentinių tyrimų skyrius, Saulėtekio al. 3, Vilnius 10257

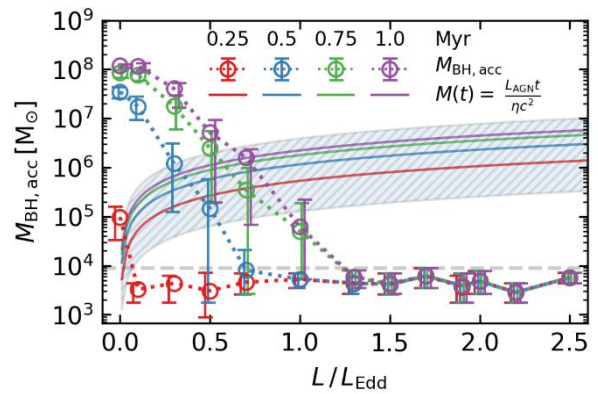
<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius

[matas.tartenas@ftmc.lt](mailto:matas.tartenas@ftmc.lt)

Jau porą dešimtmečių žinomas tvirtas empirinis sąryšis tarp supermasyvių juodųjų skylių (SMBH) galaktikų centruose masių ir galaktikų centrinio telkinio greičių dispersijos verčių vadinamas  $M$ - $\sigma$  sąryšiu. Tipiškai šis sąryšis interpretuojamas, kaip aktyviųjų galaktikų branduolių (AGN) sukuriama grįžtamojo ryšio reguliuojamo SMBH maitinimo pasekmė. Tvirtą pagrindą šiai interpretacijai suteikia analitinė sferinio AGN vėjo teorija sukurta [1]. Šie sąlyginai paprasti modeliai pademonstravo, kad greitas (apie 0.1c) AGN vėjas, veikdamas taip vadinamu judesio kiekio varymo režimu, nupučia SMBH maitinančias dujas SMBH pasiekus tam tikrą kritinę masę, artimą stebimam  $M$ - $\sigma$  sąryšiui. Visgi šis modelis aprašantis bendras AGN ir tėkmių savybes reikalauja itin griežtų idealizuotų prielaidų: sferinio ir tolygaus dujų pasiskirstymo ar efektyvaus smūginės bangos vėsimo ir neapaaikšina kaip formuojasi stebimos didelio masto (iki kelių kiloparsekų) tėkmės, kurioms reikalingas energijos varymo režimas. Detaliau šių aplink SMBH vykstančių procesų paaiškinimui būtini detalesni ir realistiškesni 3d hidrodinaminiai modeliai.

Šiame darbe nagrinėjama AGN kuriamų tėkmių raida sferiniuose galaktikų centriniuose telkiniuose atsisakius dujų tolygumo prielaidos. Modeliuose naudojamas dujų vėsimo receptas bei greitas ir stabilus SMBH vėjo injekcijos metodas *windGrid* [2]. Skirtingose sferinių telkinių realizacijose izoliuojamas skirtingo SMBH šviesio poveikis aplinkinėms dujoms. Kiekvienoje modelio realizacijoje pastovus šviesis tarp 0 ir 2.5  $L_{\text{Edd}}$  ( $L_{\text{Edd}} = 1.26 \times 10^{46}$  erg/s) palaikomas 1 mln. m. Stochastiniai efektai įvertinti perskaičiuojant realizacijas 4 kartus su skirtingais pradiniais turbulencijos greičio laukais ir pradiniais dalelių pasiskirstymais.

Nustatėme, jog žemesni nei kritiniai šviesiai, artimi Eddington'o šviesiui, nesustabdo juodosios skylės maitinimo. Tuo tarpu didesnis šviesis lemia ne tik SMBH maitinimo sustabdymą, bet ir tankių vėsių dujų nupūtimą. Nustatėme, jog tankiems dujų gumulams vėjas perduoda judesio kiekį, tuo tarpu retos ir karštos dujos, varomos vėjo energijos, formuoja didžiąsias tėkmes. Tai parodo, jog realistiškuose, turbulentiškuose ir netolygiuose, galaktikų centriniuose telkiniuose stebimi judesio kiekio ir energijos varymo režimų požymiai gali būti kuriami tuo pačiu metu to paties AGN epizodo, SMBH vėjui skirtingai paveikiant skirtingas dujų fazes.



1 pav. SMBH per  $t = 0.25; 0.5; 0.75$  ir 1 mln. m. praryta masė (atitinkamai raudona, mėlyna, žalia ir violetinė spalvos), priklausomai nuo pasirinkto AGN šviesio. Paklaidų ūsai rodo variaciją tarp stochastiškai skirtingų modelio realizacijų. Ištininės linijos rodo SMBH masės prieaugį, akretuojant Eddington'o sparta su spinduliavimo efektyvumu  $\eta = 0.1$ ; užspalvintas plotas rodo prieaugį  $\eta$  varijuojant tarp 0,057 ir 0,42. Pilka brūkšninė linija žymi dešimties dalelių masę.

*Reikšminiai žodžiai:* Supermasyvios juodosios skylės, aktyvieji galaktikų branduoliai, galaktikų tėkmės

### Literatūra

- [1] A.R. King, *Astrophys. J. Lett.* 596, L27 (2003).
- [2] K. Zubovas, M. Tartėnas, and M.A. Bourne, *Astron. Astrophys.* **691**, A151 (2024).

## Ar kosmologiniai modeliai atkuria stebimas galaktines tėkmes?

### Do cosmological simulations reproduce observed galactic outflows?

Milda Valytė<sup>1,2</sup>, Kastytis Zubovas<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Vilniaus universitetas

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Vilnius

[milda.valyte@ftmc.lt](mailto:milda.valyte@ftmc.lt)

Galaktikų centruose aptinkamos juodosios skylės (BH) auga epizodiškai, vykstant intensyviai dujų akrecijai. Šie intensyvios akrecijos epizodai į BH yra vadinami aktyviu galaktikos branduoliu (AGN) [1]. Turimi AGN stebėjimų duomenys suteikia empirinę atramą skaitmeninių Visatos struktūros raidos modelių vystymui, o pastarieji suteikia galimybę analizuoti 3D dujų kinematiką bei evoliuciją, taip pat suteikia didesnes aktyvių galaktikų imtis statistinei analizei. Tyrimai rodo, kad AGN varomos tėkmės reikšmingai veikia tarpžvaigždinę terpę bei reguliuoja žvaigždėdarą. Norint suprasti pagrindinius tėmių varymo mechanizmus, yra būtina įvertinti, kaip pačios galaktikos savybės, tokios kaip žvaigždėdaros sparta (SFR), galaktikos žvaigždinė masė ( $M_*$ ) ir AGN šviesis ( $L_{\text{AGN}}$ ) siejasi su pagrindinėmis galaktinių tėmių savybėmis. Šiame tyrime ypatingas dėmesys skiriamas tėkmės masės pernašos spartos  $\dot{M}$  analizei.

Darbe yra analizuojami skaitmeninio didelio masto modelio IllustrisTNG50 modelio duomenys, gauti naudojant judančios gardelės kodą AREPO [2]. Modelyje aktyvios galaktikos bei jose besiformuojančios tėkmės yra identifikuojamos keliais žingsniais: pirmiausia, naudojantis TNG50 grupių katalogais, kur atskiros dalelės jau yra suskirstytos į didesnius objektus pasitelkiant kaimynų paieškos algoritmus, apribojama duomenų imtis bei nustatoma realistiška žvaigždinės masės riba galaktikoms, kurių aktyvumas toliau analizuojamas [3]. Susiaurinus tėmių paieškų sritį toliau analizuojama sistemos momentinė nuotrauka bei tėmių ieškoma įvertinant galaktikos kinematinės savybės. Gauti modeliujamų tėmių ir galaktikų parametrai bei išvedamos daugiamatės regresijos lygtys, aprašančios masės pernašos spartos dėsninumus, leidžia rezultatus palyginti su stebėjimų duomenimis [4].

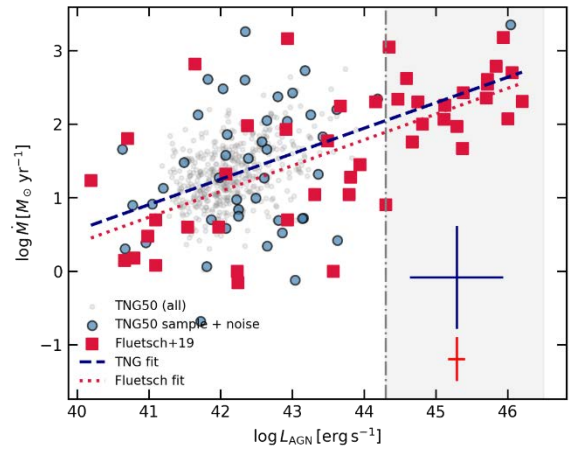
Markovo grandinės Monte-Karlo metodu nustatomos modelinių duomenų masės pernašos spartos tėkmėje priklausomybės nuo pagrindinių galaktikos parametrų:

$$\log\left(\frac{\dot{M}}{M_{\odot}\text{yr}^{-1}}\right) = 0,53 \log\left(6,63 \frac{\text{SFR}}{M_{\odot}\text{yr}^{-1}} + 0,10 \frac{L_{\text{AGN}}}{10^{43}\text{erg s}^{-1}}\right) - 0,02 \log\left(\frac{M_*}{10^{11}M_{\odot}}\right) + 1,25 \quad (1)$$

Kadangi masės pernašos spartos reikšmė smarkiai priklauso nuo pasirinkto apskaičiavimo metodo, papildomai tikrinama, ar stebimų priklausomybių sklaidą galima atkurti prie modelinių duomenų pridėjus sintetinį gausinį triukšmą. Rezultatai rodo, kad pridėjus triukšmą sklaidą abiejose ašyse tampa panaši į stebėjimų, tačiau stebimam dėsninumui atkurti reikalingos paklaidų

vertės yra didesnės nei cituojama stebėjimų darbuose [4].

Bendresni palyginimai rodo, kad TNG50 modelyje yra labai mažai aukštu AGN šviesiu pasižyminčių galaktikų, atkuriamos tėkmės yra mažiau energingos ir lėtesnės. Taip pat, modelyje atkuriamas reikšmių intervalas yra siauresnis lyginant su stebėjimais, kai vertinami visi tiriami galaktikos parametrai:  $L_{\text{AGN}}$ , SFR ir  $M_*$ .



1 pav. Masės pernašos spartos tėkmėje priklausomybė nuo AGN šviesio vietinės Visatos galaktikoms. Mėlynai taškai žymi atsitiktinai atrinktas 45 modeliujamas galaktikas, raudoni kvadratai – Fluetsch et al. (2019) darbe pristatyti 45 tėmių matavimai, pilki taškai – visos TNG50 modelyje aptiktų aktyvių galaktikų vertės.

Vertikali punktyrinė linija žymi TNG50 modeliu atkuriamo AGN šviesio ribą, o mėlynas ir raudonas kryžiai – paklaidų ribos, atitinkamai modeliujamoms bei stebimoms galaktikoms.

*Reikšminiai žodžiai: aktyvus galaktikos branduolys, aktyvi galaktika, galaktinės tėkmės, galaktikų evoliucija.*

#### Literatūra

- [1] Harrison, C. M., & Ramos Almeida, C. 2024, *Galaxies*, 12, 17
- [2] Nelson, D., Pillepich, A., Springel, V., et al. 2019, *MNRAS*, 490, 3234
- [3] Dolag, K., Borgani, S., Murante, G., & Springel, V. 2009, *MNRAS*, 399, 497
- [4] Fluetsch, A., Maiolino, R., Carniani, S., et al. 2019, *MNRAS*, 483, 4586

## Revealing the Inner Spiral Arms of the Milky Way through Stellar Chemistry

C. Viscasillas Vázquez<sup>1</sup>, L. Magrini<sup>2</sup>, E. Spitoni<sup>3</sup>, G. Cescutti<sup>4</sup>, G. Tautvaišienė<sup>5</sup>, A. Vasini<sup>2</sup>, S. Randich<sup>2</sup>, G. G. Sacco<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>INAF – Osservatorio Astrofisico di Arcetri, Largo E. Fermi 5, 50125, Firenze, Italy

<sup>3</sup>INAF, Osservatorio Astronomico di Trieste, Via Tiepolo 11, 34143 Trieste, Italy

<sup>4</sup>IFPU, Institute for Fundamental Physics of the Universe, Via Beirut 2, 34151 Trieste, Italy

<sup>5</sup>Dipartimento di Fisica, Sezione di Astronomia, Università di Trieste, Via G. B. Tiepolo 11, 34143 Trieste, Italy

<sup>6</sup>INFN, Sezione di Trieste, Via A. Valerio 2, 34127 Trieste, Italy

<sup>7</sup>Como Lake centre for AstroPhysics (CLAP), DiSAT, Università dell'Insubria, via Valleggio 11, 22100 Como, Italy

[carlos.viscasillas@ff.vu.lt](mailto:carlos.viscasillas@ff.vu.lt)

The spiral structure of the Milky Way has been widely characterized through stellar density, kinematics, and gas distribution. Chemical abundances, especially in the inner regions, offer a complementary and still underexplored window into its formation and evolution [1].

Recent studies based on Gaia DR3 and APOGEE have highlighted the role of chemical cartography in revealing spiral arms and azimuthal inhomogeneities [2-4]. Building on these works, we use chemical abundance data from the Gaia-ESO Survey [5][6] to investigate the metallicity ([Fe/H]) and [Mg/Fe] distributions across the inner disc.

By constructing spatial maps of [Fe/H], [Mg/H], and [Mg/Fe], we identify abundance patterns consistent with the Scutum and Sagittarius spiral arms (Fig. 1). We also detect a spur feature in the [Mg/H] plane connecting these arms, together with substructures in the vertical direction. The alignment of these features with chemical evolution models [7] strengthens the link between spiral arm transits and both azimuthal and radial abundance variations.

Our results demonstrate for the first time, that Galactic inner spiral arms can be robustly traced using stellar chemical abundances, providing a new perspective on the structure and evolution of the Milky Way.

**Key words:** abundances, Galactic disk, spiral arms

## References

- [1] C. Viscasillas Vázquez, L. Magrini, E. Spitoni, *et al.*, A&A **698**, A91 (2025).
- [2] E. Poggio, A. Recio-Blanco, P.A. Palicio, *et al.*, A&A **666**, L4 (2022).
- [3] M. Barbillon, A. Recio-Blanco, E. Poggio, *et al.*, A&A **693**, A3 (2025).
- [4] Z. Hackshaw, K. Hawkins, C. Fillion, *et al.*, ApJ 977, **143** (2024).
- [5] S. Randich, G. Gilmore, L. Magrini, *et al.*, A&A **666**, A121 (2022).
- [6] G. Gilmore, S. Randich, C.C. Worley, *et al.*, A&A **666**, A120 (2022).
- [7] E. Spitoni, G. Cescutti, F. Matteucci, *et al.*, A&A **623**, A60 (2019).

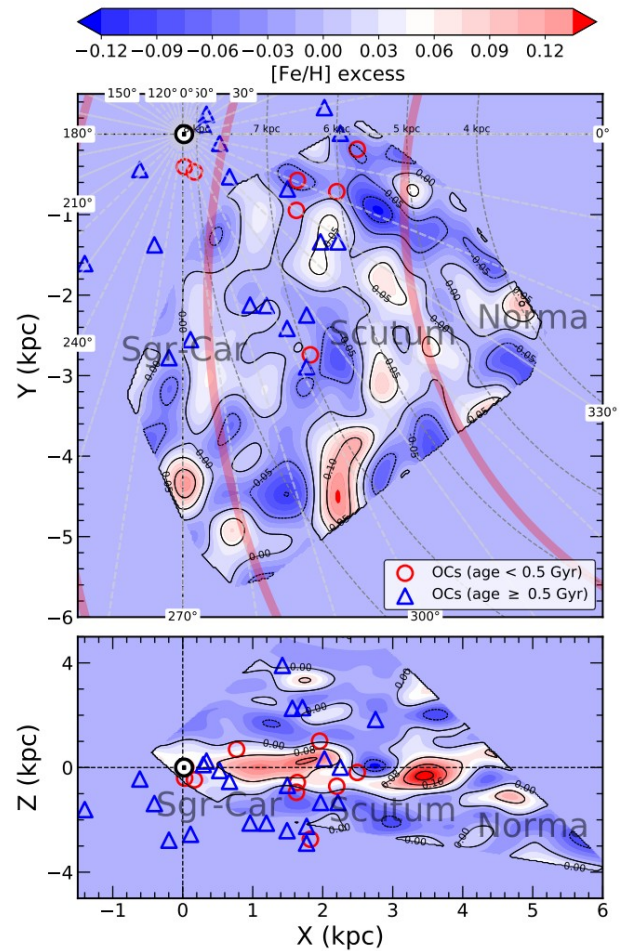


Fig 1. Distribution of the GES sample in the XY and XZ planes, colour-coded by metallicity excess.

# Grunto bandinių beta spinduliuotės tyrimas SBT-13 detektoriumi

## Investigation of Beta Radiation of Soil Samples Using the SBT-13 Detector

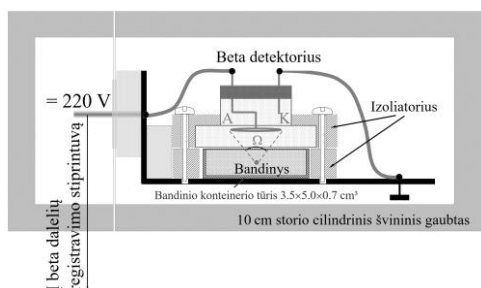
Ireneuš Bezručkinas-Nadtočij, Gražina Grigaliūnaitė-Vonsevičienė, Artūras Jukna

<sup>1</sup>Fotoelektros technologijų laboratorija, Fizikos katedra, Vilniaus Gedimino technikos universitetas (VILNIUS TECH),  
Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius  
[ireneus.bezruckinas-nadtocij@stud.vilniustech.lt](mailto:ireneus.bezruckinas-nadtocij@stud.vilniustech.lt)

Beta spinduliuotę galima ištirti beta dalelių (elektronų ir pozitronų) spektrometru ir/ar skaitikliu. Matuojant beta spinduliuotę prireikia įvertinti keletą svarbių faktorių, lemiančių tokio matavimo tikslumą. Turint mintyje, jog beta dalelės emisija iš grunto bandinio - tikimybinis procesas, o grunte esantis radionuklidas (taškinis spinduliuotės šaltinis) gali išspinduliuoti beta dalelę bet kuria kryptimi, erdvinio  $\Omega = 4\pi$  kampų, tiksliausiai spinduliuotės intensyvumą išmatuotų sferinis detektorius, iš visų pusių gaubiantis spinduliuotės šaltinį. Tačiau patikimiausi ir populiariausi beta detektoriai gaminami plokšti, kuriais radionuklido beta spinduliuotė gali būti užregistruota tik kiek mažesniu nei  $\Omega/2$  erdvinio kampų, ir tik tuo atveju, jei radionuklidas priglaustas prie pat detektoriaus korpuso paviršiaus (žėručio plokštelės), kurios kitoje pusėje įmontuotas katodas ir anodas beta dalelių registravimui. Tad iškyla klausimas kaip eksperimentiškai išmatuoti ar įvertinti koks skaičius beta dalelių nepasiekė detektoriaus anodo ar katodo, dėl to, kad: (i) išspinduliuotos nepalankiu kampu, (ii) radionuklidai, spinduliuojantys beta daleles, lokalizuoti pernelyg toli nuo detektoriaus paviršiaus, (iii) beta spinduliuotė išskaidyta kitais beta dalelių šaltiniais ir ar terpės (oro), supančios šaltinį, molekulėmis.

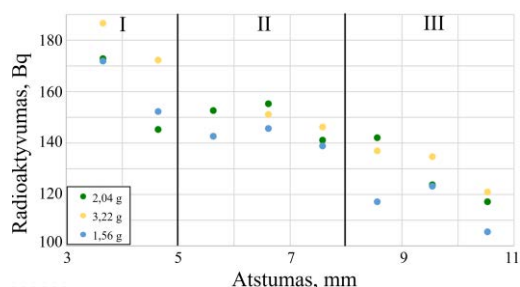
Šio darbo tikslas - ištirti beta detektoriaus SBT-13 jautrio priklausomybę nuo grunto bandinio formos, jo masės (ar bandinio laikiklyje užimamo tūrio) [1] ir lokacijos atžvilgiu detektoriaus. Eksperimentiškai tirti bandiniai buvo surinkti Baltijos pajūryje, Juodkrantės priekrantės zonoje, užliejamoje jūros bangomis ir ant smėlio kopos viršaus, kasmet abu bandinius paimant išilgai linijos, orientuotos statmenai kranto linijai. Tyrimams naudoto beta detektoriaus SBT-13 jautris (gamintojo duomenimis) siekia 100–140 imp/s, foninis triukšmas – 0,6 imp/s, o efektyvumas – 45 %.

Siekiant sumažinti bandinių sugertų vandens garų įtaką matavimų rezultatams, kiekvienas iš grunto bandinių ~15 minučių kaitintas ore, esant 40–50 °C temperatūrai, o jam išdžiūvus - įmontuotas beta dalelių registravimo įrangoje, kaip parodyta 1 pav.



1 pav. Beta dalelių registravimo SBT-13 detektoriumi schema.

Beta aktyvumo tyrimų, kurių kiekvieno trukmė ~30 min., rezultatai, parodyti 2 pav., leidžia daryti išvadą, jog registruojamų beta impulsų skaičių lemia tiriamojo bandinio masė, storis ir jo paviršiaus atstumas iki anodo A (1 pav.).



2 pav. Baltijos jūros pakrantės smėlio bandinio beta radioaktyvumo priklausomybė nuo jo atstumo iki detektoriaus anodo bei storio.

Eksperimentiškai išmatuotų kreivių eigos priklausomybę didėjant atstumui iki detektoriaus I-oje srityje (2 pav.) lemia erdvinio kampo, kuriuo išspinduliuotos dalelės gali pasiekti detektorius, mažėjimas ir vis dar maži dalelių energijos nuostoliai dėl jų sąveikos su oro molekulėmis. II-oje (plato) srityje eigą lemia erdvinio kampo didėjimas spinduliuotei iš radionuklidų, esančių bandinio konteinerio kraštuose ir kartu vis stiprėjanti beta dalelių sklaida oro molekulėmis, o III-oje srityje radioaktyvumo mažėjimą lemia beta dalelių sklaida oro molekulėmis.

Tyrimais nustatyta, jog radionuklidų koncentracija bangomis užliejamame smėlyje (priekrantės smėlyje) viršija jų koncentraciją smėlio kopos viršuje. Tai paaiškinta jūros vandenyje esančių radionuklidų pernaša į priekrantės smėlį ir jų „pagavimu“ smėlio granulėmis. Bangos atneštam vandeniui sunkiantis pro smėlį, vandenyje esantys radionuklidai prikimba prie smėlio grulių. Tad beta detektoriumi tiriant priekrantės smėlio beta aktyvumą galima nustatyti Baltijos jūroje buvusios ir/ar esamos vandens taršos radionuklidais lygį.

**Reikšminiai žodžiai:** beta spinduliuotė, beta detektorius, grunto medžiagos jonizuojančios spinduliuotės aktyvumas.

### Literatūra

- [1] Y. Chernysh, V. Chubur, I. Ablicieva, P. Skvortsova, O. Yakhnenko, M. Skydanenko, L. Plyatsuk and H. Roubik, *Soil Syst.* **8**, 36 (2024).
- [2] A. Jukna, G. Grigaliūnaitė-Vonsevičienė, *Sustainability*, **15**, 7441 (2025).

# <sup>14</sup>C išmetimų į atmosferą iš Ignalinos AE vertinimas, panaudojant valandinius radioanglies matavimus pažemės ore prie IAE

## Evaluation of <sup>14</sup>C emissions to the atmosphere from the Ignalina Nuclear Power Plant based on hourly radiocarbon measurements in near-ground air near the INPP

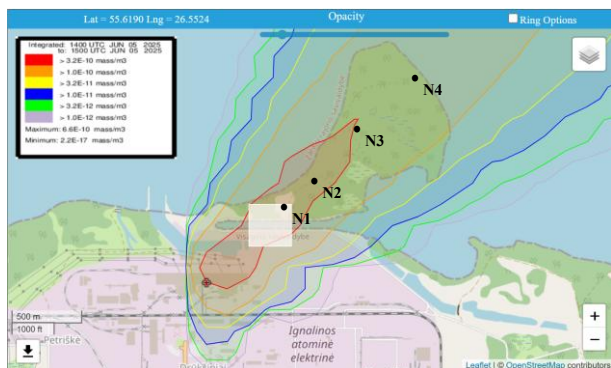
Evaldas Maceika<sup>1</sup>, Žilvinas Ežerinskis<sup>1</sup>, Justina Šapolaitė<sup>1</sup>, Ažuolas Ivickas<sup>1</sup>, Žilvinas Ežerinskis<sup>1</sup>, Laima Kazakevičiūtė<sup>1</sup>, Laurynas Juodis<sup>1</sup>

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius  
[evaldas.maceika@ftmc.lt](mailto:evaldas.maceika@ftmc.lt)

Radioaktyvioji anglis <sup>14</sup>C natūraliai gaminasi atmosferoje dėl sąveikų su kosmine spinduliuote, tačiau žmogaus veikla taip pat gali keisti natūralų radioanglies foną atmosferoje, tiek sumažindama jos koncentraciją ore (pvz. Suess efektas dėl iškastinio kuro deginimo) tiek ir ją padidindama (pvz. branduolinio ginklo bandymai atmosferoje ar atominų elektrinių eksploatacija).

2025 m. birželio mėn. 5 d. surengtos ekspedicijos metu užfiksuotas lokalus radioanglies koncentracijos ore padidėjimas pavėjinėje pusėje pusiasalyje šalia Ignalinos atominės elektrinės (IAE). Surinkus iš atmosferos CO<sub>2</sub> dujų bandinį, jame išmatavus <sup>14</sup>C aktyvumo koncentraciją bei palygimus ją su foninėmis vertėmis (neįtakotomis atominės elektrinės) ir pasitelkus išmetimų sklaidos iš AE kamino modeliavimo priemonės (HYSPLIT modelį), buvo įvertinta kokie <sup>14</sup>C srautai vis dar išmetami į atmosferą iš dabar jau neveikiančios IAE.

Valandiniai radioanglies mėginiai (<sup>14</sup>CO<sub>2</sub>) iš pažemio oro buvo surinkti keturiose vietovėse N1-N4 (žr. 1 pav.), esančiose pusiasalyje 0,7 -2 km atstumu nuo IAE, burbuliuojant atmosferos orą per NaOH tirpalą 1 valandą, esant maždaug 20 m<sup>3</sup>/h oro srautui. Tuo metu vėjas kaip tik pūtė nuo IAE link matavimo taškų, o maišymosi atmosferoje sąlygos buvo palankios, kad iš IAE kaminų išmesto oro šleifas pasiektų žemės paviršių. Bandymų metu buvo nustatyta, kad 5 ml 0,5 M NaOH tirpalo pakanka absorbuoti reikiamą CO<sub>2</sub> kiekį iš aplinkos oro radioanglies koncentracijos matavimams.



1 pav. Iš Ignalinos AE išmesto į atmosferą <sup>14</sup>C matavimų ore vietovės N1–N4 bei HYSPLIT sumodeliuota šių išlėkų sklaida 2025-06-05 datai.

<sup>14</sup>C aktyvumo koncentracijų matavimai buvo atlikti Greitintuvo masių spektrometrijos laboratorijoje, Fizinių ir technologijos mokslų centre Vilniuje. Prieš atliekant radioanglies matavimus, mėginiai buvo grafitizuoti. Grafitizacijai panaudota automatizuota sistema (AGE-3, Ionplus AG). Radioanglies koncentracijos matavimams naudotas vienpakopis greitintuvinis masių spektrometras (SSAMS, NEC, JAV) [1].

Išmatuoti radioanglies aktyvumo koncentracijos tirtose vietovėse N1-N4 pateikti 1 lentelėje kaip modernios anglies procentas (pMC) [2]. Nustatyta foninė <sup>14</sup>C koncentracija atmosferos ore priešvėjinėje pusėje nuo IAE (neįtakotoje IAE išmetimų) buvo 99,7 pMC. Todėl, IAE išmetimų lemtos viršfoninės vertės gautos iš matavimų vietovėse rezultatų atėmus šią foninę vertę (žr. 1 lentelę).

1 lentelė. N1-N4 vietovėse prie IAE išmatuotos <sup>14</sup>C aktyvumo koncentracijos ir jų viršfoninės vertės.

| Bandinio paėmimo vieta | Atstumas nuo IAE, km | Išmatuota koncentracija, pMC | Viršfoninė vertė, pMC |
|------------------------|----------------------|------------------------------|-----------------------|
| N1                     | 0,7                  | 101,30                       | 1,6                   |
| N2                     | 1                    | 101,26                       | 1,56                  |
| N3                     | 1,5                  | 100,84                       | 1,14                  |
| N4                     | 2                    | 100,55                       | 0,85                  |

Matavimai byloja, kad tolstant nuo IAE nuo 0,7 km iki 2 km atstumu <sup>14</sup>C viršfoninė koncentracija ore tolygiai mažėja nuo 1,6 iki 0,85 pMC. Šie rezultatai gerai dera su HYSPLIT programa įvertinta išlėkų skiedimosi nuo  $6,6 \cdot 10^{-10}$  iki  $3,2 \cdot 10^{-10} \text{ m}^{-3}$  proporcija. Taikant  $F = 0,00044 \text{ Bq/(m}^3 \text{ pMC)}$  konvertavimo iš pMC į radioanglies tūrinį aktyvumą  $\text{Bq/m}^3$  ore koeficientą [2], galima nustatyti, kad Ignalinos AE vis dar išmeta apie  $1,2 \cdot 10^{-10} \text{ Bq } ^{14}\text{C}$  per metus. Tai yra maždaug dviem eilėmis mažiau, negu ji išmėsavo eksploatacijos metu [2].

**Reikšminiai žodžiai:** <sup>14</sup>C, aktyvumo koncentracijos ore matavimai, Ignalinos AE, išmetimai į atmosferą.

### Literatūra

- [1] Ž. Ežerinskis, J. Šapolaitė, A. Pabedinskas, L. Juodis, A. Garbaras, E. Maceika, and V. Remeikis, Radiocarbon. **60** (4), 1227 (2018).
- [2] L. Juodis, E. Maceika, R. Barisevičiūtė, A. Pabedinskas, Ž. Ežerinskis, J. Šapolaitė, and V. Remeikis, Nucl. Eng. Des. **394**, 111822 (2022).

# Organinių aerosolių izotopinės kompozicijos tyrimas siekiant nustatyti fotocheminių senėjimo reakcijų poveikį

## Evaluating the potential of the isotopic composition of organic aerosols to determine the effect of photochemical aging reactions

Agnė Mašalaitė<sup>1</sup>, Durre Nayab Habib<sup>1</sup>, Ulrike Dusek<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup> University of Groningen, Groningen, 9747 AG, The Netherlands

[agne.masalaite@ftmc.lt](mailto:agne.masalaite@ftmc.lt)

Organic aerosols constitute the largest portion of the atmospheric nonrefractory aerosol mass, exerting significant impacts on climate, air quality, and human health [1-5]. The chemical transformation of organic aerosols during atmospheric aging remains a key uncertainty in climate research, particularly for biomass-derived emissions. Biomass burning aerosols undergo complex reactions that alter both their volatility and isotopic composition, yet the relationship between these changes remains underexplored. This study investigates the potential of carbon isotopic composition ( $\delta^{13}\text{C}$ ) as a tracer for photochemical aging processes. Aerosol samples from the combustion of eight different biomass fuels were collected. A high-flow sampler (DIGITEL DH-77) with a pre-separator was employed to collect biomass-burning organic aerosols (BBOA) from smoke, which were captured on Whatman QM-A pure quartz fiber filters.

Aging experiments were conducted in custom laboratory setups under either UV irradiation (308 nm) in an inert  $\text{N}_2$  atmosphere or exposure to OH radicals generated via  $\text{H}_2\text{O}_2$  photolysis, without UV exposure. The UV aging setup employed a UV LED (Thorlabs M310L1) directed at a glass sample holder with two plateaus, where the upper plateau was fully exposed to the UV beam and the lower plateau was partially shielded. For OH radical aging, radicals were produced in a dedicated reaction chamber via  $\text{H}_2\text{O}_2$  photolysis and transported to the sample chamber using a  $\text{N}_2$  carrier flow (15–25 mL/min). OH radical production was verified by the discoloration of methylene blue test filters placed in the chamber.

In both cases, the aging process was carried out for 24 hours under nitrogen atmosphere.  $\delta^{13}\text{C}$  values of carbonaceous fractions, thermally desorbed in three temperature steps, were measured using a thermal-optical analyzer coupled to an isotope ratio mass spectrometer. UV-aged samples exhibited consistent  $^{13}\text{C}$  depletion relative to unaged samples, with a clear pattern across all fractions. In contrast, OH-aged samples showed no significant isotopic shift. These results identify UV photolysis as the primary driver of isotopic alteration in combustion aerosols, suggesting that UV-induced processes may play a dominant role in atmospheric aerosol aging.

Our findings demonstrate that  $\delta^{13}\text{C}$  is a sensitive proxy for detecting UV-driven photolytic transformations

in biomass-derived organic aerosols and suggest that photolysis may play a dominant role in their atmospheric aging compared to oxidation by OH radicals. This approach offers a promising pathway for linking laboratory-based aging experiments to ambient aerosol isotopic signatures, with implications for source apportionment and climate impact assessments.

*Key words: aerosol, biomass burning, photochemical aging, isotopic composition.*

### Reference

- [1] D. Ceburnis, A. Masalaite, J. Ovadnevaite, A. Garbaras, V. Remeikis, W. Maenhaut, M. Claeys, J. Sciare, D. Baisnée, C.D. O'Dowd, Scientific reports **6**, 36675 (2016).
- [2] J.L. Jimenez, M. Canagaratna, N. Donahue, A. Prevot, Q. Zhang, J.H. Kroll, P.F. DeCarlo, J.D. Allan, H. Coe, N. Ng, Science **326**, 1525-1529 (2009).
- [3] U. Pöschl, M. Shiraiwa, Chemical reviews **115**, 4440-4475 (2015).
- [4] M. Shiraiwa, Y. Li, A.P. Tsimpidi, V.A. Karydis, T. Berkemeier, S.N. Pandis, J. Lelieveld, T. Koop, U. Pöschl, Nature communications **8**, 15002 (2017).
- [5] M. Viana, J. Pey, X. Querol, A. Alastuey, F. De Leeuw, A. Lükewille, Science of the Total Environment **472**, 825-833 (2014).

# Characterization and Distribution of Airborne Microplastic Particles in Lithuanian School Environments



Tomas Stonkus<sup>1</sup>, Ieva Uogintė<sup>1</sup>, Steigvilė Byčenkienė<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research, Saulėtekio av. 3, Vilnius

Corresponding author email: [tomas.stonkus@ftmc.lt](mailto:tomas.stonkus@ftmc.lt)

Plastic, first developed as phenol-formaldehyde resin, has become one of the most widespread materials in modern society. Although initially intended to simplify daily life and provide a durable alternative to natural resources, today plastic poses a significant threat not only to the environment but also to human health [1]. In the past decades, the rapid growth of synthetic polymer production in various industries has led to a considerable rise in microplastic pollution, including in the air we breathe. These microscopic particles, usually smaller than 5 millimeters, originate from different sources. Primary microplastics are intentionally manufactured, for example, microbeads used in cosmetics and cleaning products, while secondary microplastics are generated through the fragmentation of larger plastic objects. Recent studies have shown that indoor environments may accumulate even higher concentrations of microplastics than outdoor air [2], which is especially concerning given that people spend nearly 90 % of their time indoors [3]. Some studies suggest that an average person in a week consumes enough microplastic equivalent to a credit card [4].

The aim of this research is to investigate the occurrence of microplastic particles in the air inside Lithuanian schools, with attention to their size, color, shape, and chemical composition. Such data are essential for a deeper understanding of indoor air quality and for assessing the potential risks posed by microplastic exposure to children and school staff.

For this study, indoor air samples were collected by teachers using 5.5 cm paper filters placed in classrooms for one week. In the laboratory, the filters were rinsed with distilled, pre-filtered water to prevent contamination. The samples then underwent chemical treatment and density separation to isolate microplastic particles. Afterwards, they were transferred onto fiberglass filters for optical characterization and onto aluminum dioxide filters for chemical identification using Fourier-transform infrared (FTIR) spectroscopy. This combined methodology ensures better detection of microplastics and helps to build a clearer picture of their presence in school environments.

**Acknowledgment:** We would like to thank the schools, teachers who helped to collect data on indoor microplastic particles in Lithuanian school's premises

[1] Hassan Khalid Ageel, Stuart Harrad, Mohamed Abou-Elwafa Abdallah, Environmental Pollution, volume 362, Microplastics in indoor air from Birmingham, UK: Implications for inhalation exposure, 2024, <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2024.124960>

[2] Muhammad Jahanzaib, Shambhavi Sharma, Duckshin Park, Emerging Contaminants 11, Microplastics comparison of indoor and outdoor air and ventilation rate effect in outskirts of the Seoul metropolitan city, 2025, <https://doi.org/10.1016/j.emcon.2024.100408>

[3] Hassan Khalid Ageel, Stuart Harrad and Mohamed Abou-Elwafa Abdallah, Environmental Science: Processes & Impacts, Occurrence, human exposure, and risk of microplastics in the indoor environment, 2022

[4] Qingxin Luo, Haowen Tan, Mao Ye and others, Journal of Environmental Management, Volume 387, Microplastics as an emerging threat to human health: An overview of potential health impacts, 2025, <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2025.125915>

# Paviršiaus sustiprintos Ramano spektroskopijos taikymas smegenų skysčio bandinių tyrimui

Sonata Adomavičiūtė-Grabusovė<sup>1</sup>, Justinas Čeponkus<sup>1</sup>, Valdas Šablinskas<sup>1</sup>, Gerald Steiner<sup>3</sup>, Matthias Kirsch<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, cheminės fizikos institutas, Vilnius, Lietuva

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, duomenų mokslo ir skaitmeninių technologijų institutas, Lietuva

<sup>3</sup>Dresdeno Technikos Universitetas, klinikinio jutiklių taikymo ir stebėsenos institutas, Dresdenas, Vokietija  
[sonata.adomaviciute@ff.vu.lt](mailto:sonata.adomaviciute@ff.vu.lt)

Ramano ir Paviršiaus sustiprintos Ramano sklaidos (angl. *Surface Enhanced Raman Scattering* - SERS) spektroskopija tampa vis svarbesniu analitiniu įrankiu biomedicinos srityje. SERS spektroskopija pasižymi išskirtiniu jautrumu ir gebėjimu aptikti itin mažas molekulių koncentracijas – net iki  $10^{-15}$  mol/l. Šis metodas leidžia atlikti biologinių skysčių ir audinių analizę [1], identifikuoti patologinius pokyčius [2] bei aptikti pėdsakinius draudžiamų medžiagų kiekius [3], tokius kaip narkotinės ar dopingo medžiagos. Šiuolaikinėje praktikoje SERS spektroskopija taikoma ne tik diagnostikai, bet ir molekulinį žymenų paieškai, prisidedant prie ankstyvo ligų nustatymo ir personalizuotos medicinos plėtros.

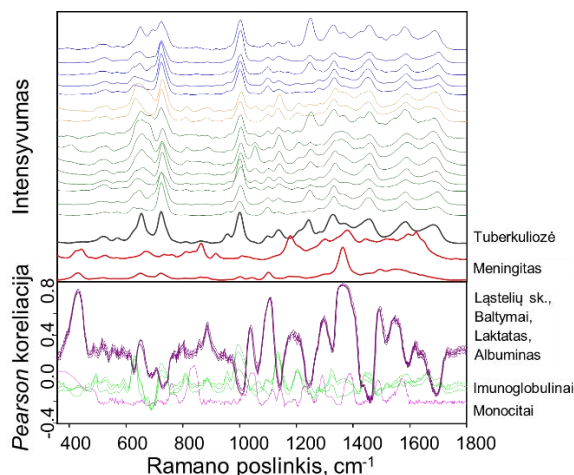
Šiame tyrime SERS metodas buvo taikytas stuburo smegenų skysčio mėginių analizei, siekiant lengviau ir greičiau identifikuoti spektrinius pokyčius, susijusius su infekcinėmis ir uždegiminėmis ligomis. Mėginiai buvo imami Dresdeno Technikos Universitete iš 18 pacientų, atliekama jų biocheminė analizė ir ruošiami bandiniai tolimesniems spektriniais tyrimams. SERS ir Ramano spektrams registruoti naudotas MonoVista CRS+ difrakcinis Ramano mikroskopas su žadinančiu 785 nm bangos ilgio lazeriu, 3 mW galia, 10x (0.3 NA) objektyvu. Stuburo smegenų skysčio mėginiai buvo nudžiovinti ir registruojami jų Ramano sklaidos spektrai, o SERS eksperimentams naudoti išdžiovinti biologiniai mėginiai, ant kurių užlašinama 5  $\mu$ L sidabro nanodalelių koloido. Iš kiekvieno mėginio lašelio buvo surinkta apie 1000 spektrų. Surinkti spektriniai duomenys buvo analizuojami taikant statistinius metodus.

Spektrų analizė atskleidė pastebimus skirtumus tarp pacientų, sirgusių meningitu bei Miliarine tuberkulioze stuburo skysčio bandinių ir pacientų, turėjusių uždegimą bei fiziologines patologijas (1 pav. (A)). Didžiausi spektriniai skirtumai matomi 1 pav. apatiniame spektre priklauso meningokokiniu meningitu sergančiam pacientui, kurio biocheminiai tyrimai pasižymėjo kur kas didesniu ląstelių, eritrocitų ir baltymų kiekiu lyginant su kitais pacientais. Intensyviausios spektrinės juostos matomos ties: 653, 724, 1002  $\text{cm}^{-1}$  gali būti priskiriamos adenino, karbamido molekulių virpesiams. Meningokokiniu meningitu sergančio paciento SERS spektre matoma intensyvi juosta ties 1362  $\text{cm}^{-1}$ .

Duomenų analizėje naudotas *Autoencoder* tipo mašininio mokymosi algoritmas, kuris padėjo identifikuoti informatyviausias spektrines juostas. Šis metodas leidžia sumažinti duomenų apimtį, išsaugant svarbiausią informaciją, ir palengvina tolimesnę analizę. Pastebėta, kad net to paties paciento bandiniai gali turėti išsiskiriančius spektrus, kas gali būti susiję su biologine

įvairove ar SERS metodo selektyvumu adsorbuotoms molekulėms.

Duomenų analizė atskleidė koreliacijas tarp spektrinių juostų intensyvumo ir stuburo smegenų skysčio biologinių parametrų, tokių kaip baltymų, laktato, albumino kiekis (i.S. ir i.L.) ir bendras ląstelių skaičius (pav. 1 (B)). Imunoglobulinų (IgM, IgG, IgA), monocitų skaičiaus pastebėtos tiek teigiamos, tiek neigiamos Pearson koreliacijos, kai tam tikrų parametrų didėjimas atitinka spektrinių juostų intensyvumo pokyčius. Stipri koreliacija matoma nuo  $r \geq 0.7$ . Šis tyrimas parodė, kad SERS technologija, derinama su koreliacine analize ir pažangiais duomenų apdorojimo metodais, gali atverti naujas galimybes biologinių parametrų interpretacijai ir diagnostikai.



1 pav. (A) Suvidurkinti skirtingų pacientų stuburo smegenų skysčio SERS spektrai. Raudona spalva žymimi pacientų, turinčių meningitą, spektrai (apatinis spektras – meningokokinis meningitas); juoda – Miliarinę tuberkuliozę; mėlyna spalva žymimos kitos patologijos. (B) *Pearson* koreliacijos tarp spektrinių juostų intensyvumo ir biocheminių parametrų.

*Reikšminiai žodžiai: SERS, spinal fluid, biofluid, diagnostics.*

## Literatūra

- [1] Hering, K., Cialla, D., Ackermann, K. et al. SERS: a versatile tool in chemical and biochemical diagnostics. *Anal Bioanal Chem* 390, 113–124 (2008). <https://doi.org/10.1007/s00216-007-1667-3>
- [2] Wang, Y., Kang, S., Khan, A. et al. Quantitative molecular phenotyping with topically applied SERS nanoparticles for intraoperative guidance of breast cancer lumpectomy. *Sci Rep* 6, 21242 (2016). <https://doi.org/10.1038/srep21242>
- [3] Inscore, Frank, et al. "Detection of drugs of abuse in saliva by surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS)." *Applied spectroscopy* 65.9 (2011): 1004-1008.

# Greitųjų neutronų silpimo 3D spausdintuose ABS kompozituose tyrimas

## Investigation of Fast Neutron Attenuation in 3D Printed ABS Composites

Shirin Arslonova<sup>1</sup>, Rita Plukienė<sup>2</sup>, Artūras Plukis<sup>2</sup>, Diana Adlienė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

shirin.arslonova@ktu.lt

Cyclotrons are essential in nuclear medicine for the production of short-lived positron-emitting radionuclides such as <sup>18</sup>F, <sup>11</sup>C, and <sup>15</sup>O. During irradiation, cyclotron targets are exposed to high-energy proton beams, which generate intense secondary radiation, particularly fast neutrons [1]. Shielding of the target assembly is therefore a critical aspect of cyclotron operation: it must not only reduce occupational exposure and limit the activation of nearby components, but also moderate and slow down neutrons, capture them efficiently, and attenuate the gamma rays released in the process. Conventional materials such as concrete or lead provide effective protection, however their weight, toxicity, and lack of adaptability highlight the need for innovative alternatives.

In this study, 3D printed polymer composites were developed and investigated as candidate materials for cyclotron target shielding. Acrylonitrile butadiene styrene (ABS) was selected as the base matrix due to its good printability, mechanical stability, and relatively high hydrogen content, which contributes to the moderation of the fast neutrons. To enhance shielding performance, ABS was reinforced with low-Z fillers (B<sub>4</sub>C, BN) for neutron moderation and capture, and high-Z filler Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> for photon attenuation.

Composite filaments were fabricated using a 3DEVO Filament Maker Precision 350 extruder, producing filaments with a diameter of 1.75 mm, suitable for fused deposition modeling. Test samples were then printed on a Zortrax M300 3D printer with 100% infill, each having typical dimensions of 20 × 20 × 5 mm.

Neutron attenuation experiments were performed at the Center for Physical Sciences and Technology (FTMC) using a Pu–Be source with a total emission rate of 4.5×10<sup>7</sup> n/s. Samples were irradiated in the central channel, where the neutron flux reached approximately 6.8×10<sup>4</sup> n/cm<sup>2</sup>/s. Transmission was measured using Gafchromic films, and attenuation was calculated as:

$$A = 1 - \frac{I}{I_0} \quad (1)$$

where  $I_0$  is the film response and  $I$  is the film response with a sample in the same place.

Neutron transmission measurements showed that composites containing boron-based fillers achieved the highest attenuation. For example, ABS with 10 wt% BN and 5 wt% B<sub>4</sub>C reduced neutron transmission by ~25% and ~22%, respectively, outperforming high-Z

composites such as Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, which reached only ~15–16% attenuation even at 40–50 wt% loading.

These results confirm that low-Z absorbers such as BN and B<sub>4</sub>C, which are highly efficient due to their large neutron capture cross-sections are dominating in neutron shielding performance. In contrast, high-Z fillers interact weakly with neutrons, reflecting their primary role in photon shielding rather than neutron attenuation. The contribution of ABS itself, with attenuation of around 7% was limited to fast neutron moderation through hydrogen, which alone was insufficient to secure significant protection.

The study demonstrates that 3D printed ABS-based composites reinforced with boron-containing fillers provide superior fast neutron attenuation compared with high-Z composites or unmodified ABS. These findings underline the critical role of low-Z absorbers such as BN and B<sub>4</sub>C in neutron shielding and support their potential application in the design of lightweight, lead-free shielding materials for cyclotron target assemblies in nuclear medicine. The next stage of this work will focus on the development and evaluation of layered, sandwich-like configurations to identify optimal combinations of neutron- and photon-sensitive fillers for mixed radiation environments.

**Keywords:** Cyclotron target shielding, neutron attenuation, 3D printing, polymer composites.

### Literatūra

- [1] R. Tursinah, S. Permana, Z. Su'ud, A. Maulana, A.K. Rivai, M. Santoso, P. Sukmabuan, N. Nurhuda, H. Suryanto, W. Wahyudi, K. Kusdiana, D. Prakoso, M.F. Ramadhani, and Bunawas, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A 1079, 168882 (2025).

# Doksorubicinu ir indocianino žaliuoju pakrautų dendrimerų pasiskirstymo organizme ir fototoksiškumo tyrimas pelių navikų modelyje

## Biodistribution and phototoxicity effect of doxorubicin and indocyanine green-loaded dendrimers in tumor-bearing mice

Aleja Marija Daugėlaitė<sup>1,2</sup>, Vilius Poderys<sup>1</sup>, Danutė Bulotienė<sup>1</sup>, Hsiu-Pen Lin<sup>3</sup>, Yaw-Kuen Li<sup>3,4</sup>  
Tung-Kung Wu<sup>3,5</sup>, Vitalijus Karabanovas<sup>1,6</sup>, Ričardas Rotomskis<sup>1,7</sup>, Simona Steponkienė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Biomedical Physics Laboratory of National Cancer Institute, Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

<sup>3</sup>Center for Emergent Functional Matter Science, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsin-Chu, Taiwan

<sup>4</sup>Department of Applied Chemistry, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsinchu, Taiwan

<sup>5</sup>Department of Biological Science, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsinchu, Taiwan

<sup>6</sup>Department of Chemistry and Bioengineering, Vilnius Gediminas Technical university, Vilnius, Lithuania

<sup>7</sup>Biophotonics Group of Laser Research Center, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

[aleja.daugelaite@nvi.lt](mailto:aleja.daugelaite@nvi.lt)

Cancer remains a global problem with 9.7 million deaths in 2020 [1]. These statistics emphasize the urgent need for innovative treatment strategies that can expand standard options such as chemotherapy, radiotherapy, or offer new ones. One promising area in this regard is nanomedicine, which can offer innovative cancer treatment and diagnostic tools. Nanoparticles have certain advantages, including the ability to improve the solubility of drugs, prolong their circulation time in the bloodstream, reduce unwanted toxic effects on healthy tissues etc. However, many nanoparticles require complex chemical synthesis, limiting their clinical translation [2].

Among nanoparticle platforms, dendrimers represent a promising alternative due to their relatively simple synthesis. These are highly branched (tree-like), symmetrical polymer structures with many functional groups on their surface. This structure enables high drug-loading capacity and facile surface modifications for tailored therapeutic applications. Furthermore, dendrimers can be engineered with stimuli-responsive properties, allowing selective drug release in response to specific triggers such as near-infrared (NIR) light, which penetrates deeper into tissues compared to visible light. Due to these properties, dendrimers are considered a highly promising nanomedicine platform in oncology [3].

The aim of our study was to investigate the biodistribution of dendrimer nanoclusters (DNCs) loaded with doxorubicin (DOX) and indocyanine green (ICG) in C57BL/6 mouse tissues and to assess the phototoxic effects induced by NIR irradiation. Thermal-sensitive DNCs containing polyethylene glycol (PEG), ICG, and DOX were synthesized based on a previously established protocol and employed for controlled drug release [3].

Using the fluorescence (FL) imaging system UVP iBox Scientia-800 we successfully detected the ICG signal originating from DNCs. Following local injection of DNCs-ICG-DOX-PEG 1 cm from the tumor site, the ICG signal was observed to gradually increase and spread around the tumor, reaching its peak intensity after 24

hours. To further investigate dendrimer biodistribution in tissues, histological preparations were made. At 24 hours post-injection, the mouse was sacrificed, and the tumor, liver, kidneys, and spleen were excised for analysis. Confocal and bright-field imaging were employed to visualize tissue structures and to detect the doxorubicin signal in both tumor and organs. In addition, spectral measurements confirmed the presence of doxorubicin emission within the examined tissues, demonstrating successful delivery of the drug to the tumor as well as accumulation in mononuclear phagocyte system organs.

To evaluate the therapeutic effect, we next examined NIR light-induced phototoxicity on tumor growth. At 24 hours post-injection, the tumor site was irradiated with an 808 nm laser to trigger the release of doxorubicin from DNCs-DOX-ICG-PEG. This treatment showed measurable phototoxic effect on tumor volume.

The study highlights the potential of dendrimer-based delivery systems for combined imaging and light-triggered chemotherapy.

### Acknowledgment

This work was supported by Lithuania-Taiwan project. Lithuania: Project No. S-LT-TW-17. Taiwan: NSTC 113-2923-M-A49 -006 -MY2.

*Keywords: dendrimers, biodistribution, cancer, phototoxicity, controlled drug release, doxorubicin.*

### Literature

- [1] F. Bray, M. Laversanne, H. Sung, J. Ferlay, R.L. Siegel, I. Soerjomataram, A. Jemal. CA A Cancer J Clinicians 74, 229–263 (2024).
- [2] J. Venturini, A. Chakraborty, M.A. Baysal, A.M. Tsimberidou. Exp Hematol Oncol 14, 76 (2025).
- [3] C.-C. Weng, T.-A. Yang, Y.-K. Li. Materials & Design 197, 109230 (2021).

## Pushing the limits of non-destructive teeth microcracks imaging: a multi-spectral approach

Irma Dumbryte<sup>1</sup>, Donatas Narbutis<sup>2</sup>, Artur Harnik<sup>3</sup>,

Greta Merkininkaitė<sup>4</sup>, Dimitra Ladika<sup>5</sup>, Arturas Ulcinas<sup>6</sup>, Robertas Virketis<sup>7</sup>, and Mangirdas Malinauskas<sup>8</sup>

<sup>1</sup>Vilnius University, Institute of Dentistry, Zalgirio str. 117, 08217 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Vilnius University, Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Sauletekio Ave. 9, 10222 Vilnius, Lithuania

<sup>3</sup>Vilnius University, Laser Research Center, Sauletekio Ave. 10, 10223 Vilnius, Lithuania

<sup>4</sup>Vilnius University, Institute of Chemistry, Naugarduko str. 24, 03225 Vilnius, Lithuania

<sup>5</sup>Vilnius University, Laser Research Center, Sauletekio Ave. 10, 10223 Vilnius, Lithuania

<sup>6</sup>Center for Physical Sciences and Technology, Savanorių Ave. 231, 02300 Vilnius, Lithuania

<sup>7</sup>Vilnius University, Institute of Chemistry, Naugarduko str. 24, 03225 Vilnius, Lithuania

<sup>8</sup>Vilnius University, Laser Research Center, Sauletekio Ave. 10, 10223 Vilnius, Lithuania

irma.dumbryte@mf.vu.lt

Microcracks (MCs) represent a form of tooth damage, often invisible to dentists and patients, but capable of triggering hypersensitivity, raising caries risk, and affecting structural integrity<sup>1,2</sup>. Due to their micrometer dimensions, irregular geometry, and subtle optical features, MCs pose a significant diagnostic challenge<sup>3</sup>. **This study aims** to examine the integration of multi-spectral imaging techniques based on artificial intelligence (AI) to perform a comprehensive, non-destructive analysis of MCs in extracted human teeth.

The samples were investigated using a workflow combining X-ray micro-computed tomography ( $\mu$ CT) with complementary methods to evaluate the enamel's surface morphology (atomic force microscopy (AFM)), elemental characteristics (combined scanning electron microscopy (SEM), and energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS) measurements), and optical properties (photoluminescence (PL)); all collected information analyzed, integrated, and interpreted by applying AI methods (Fig. 1).

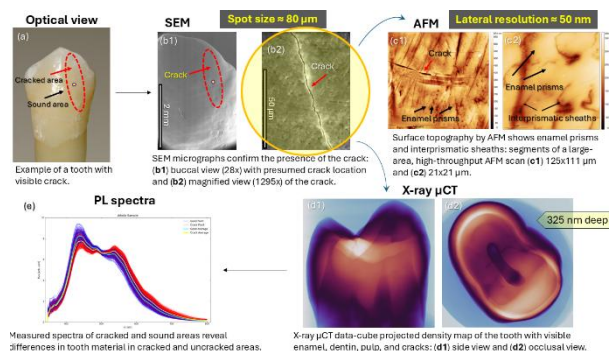


Fig. 1. Graphical study abstract.

X-ray  $\mu$ CT scans provided high-resolution 3D volumetric data, segmented with machine learning to localize cracks. The same unsectioned teeth surfaces were mapped using PL under 325 nm excitation (CW, spot size  $\approx 80 \mu\text{m}$ ; Fig. 2). A custom-built high-throughput AFM system in contact mode with  $\approx 50 \text{ nm}$  lateral resolution in the XY direction enabled visualization of enamel prisms and interprismatic sheaths across multiple  $20 \times 20 \mu\text{m}^2$  regions.

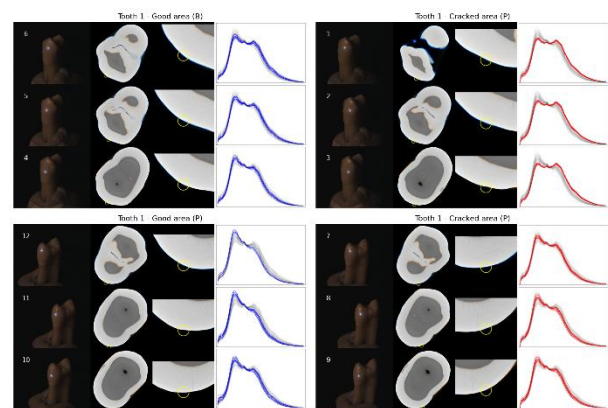


Fig. 2. Mapping of digital X-ray images with PL spectra measurement points (excitation at 325 nm).

Differences in prism orientation were observed in areas surrounding MCs, helping to characterize local enamel deformation and early delamination patterns. SEM-EDS analysis of AFM-scanned areas revealed localized calcium-to-phosphorus ratio deviations and more carbon along crack lines. PL spectra showed emission shifts and intensity variations in cracked versus intact enamel, linked to defect-related states and local changes in crystal structure. The combined dataset reveals distinct morphological, chemical, and optical contrasts between cracked and sound enamel regions.

These findings demonstrate the power of multi-spectral, non-destructive imaging to identify clinically relevant features across different spatial scales. This work contributes to the development of a human-verified digital teeth atlas and lays the foundation for AI-enhanced diagnostic systems in preventive dentistry.

**Keywords:** 3D imaging, artificial intelligence, enamel damage, machine learning, spectroscopy.

### References

- [1] I. Dumbryte et al. Sci. Rep., **11**, 14810 (2021).
- [2] I. Dumbryte et al. Sci. Rep., **12**, 22489 (2022).
- [3] I. Dumbryte et al. Bioengineering, **10**, 1354 (2023).

This project has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No P-ITP-25-33.

# Jėgos spektrometrijos taikymas tiriant mikrogravitacijos poveikį audinių modeliams

## Force spectroscopy of microtissues for direct probing of microgravity effects

Tadas Jelinskas<sup>1</sup>, Artūras Ulčinas<sup>1</sup>

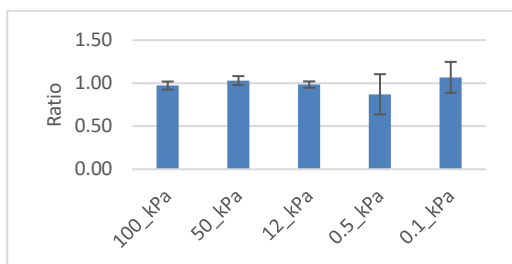
<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius  
[tadas.jelinskas@ftmc.lt](mailto:tadas.jelinskas@ftmc.lt)

Ląstelių mechanobiologija yra tarpdisciplininė mokslo sritis, kuri orientuojasi į tyrimus skirtus suprasti, kaip mechaninės jėgos veikia ląstelių elgseną, struktūrą ir funkcijas. Ląstelės aplinkos mechaninių savybių ir pačių chondrocitų viskoelastinių savybių silpnėjimas matomas artrito pažeistoje kremzlėje ir senėjimo metu [1].

Su vis didėjančiais lūkesčiais tyrinėti kosmosą ir pasiekti gretimas saulės sistemos planetas yra svarbu suprasti tokių ekspedicijų rizikas. Vienas iš labiausiai jaučiamų efektų ekspedicijų metu yra mikrogravitacija, dėl kurios dingsta apkrova kūnui. Sumažėjus mechaninei apkrovai prasideda kaulų demineralizacija, atsiranda kremzlės pažeidimai, raumenų atrofija, ir t.t [2]. Tam, kad ateityje būtų galima išvengti rimtų sveikatos sutrikimų ilgose kosmoso ekspedicijose svarbu suprasti, koks yra mikrogravitacijos poveikio audiniams mechanizmas.

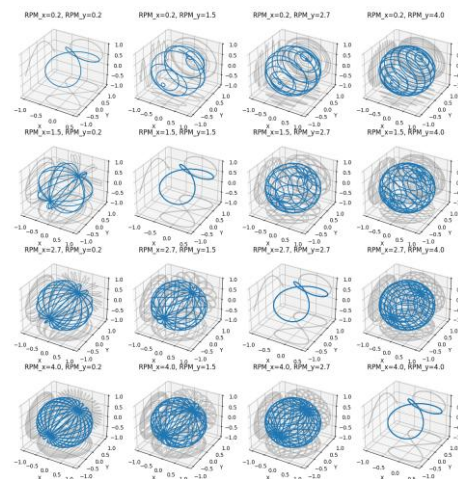
Atominės jėgos mikroskopas (AJM) yra vienas iš pagrindinių įrankių naudojamų mechaninių savybių matavimams, gali išmatuoti įvairius medžiagų ar ląstelių mechaninius parametrus mikro ir nanoskalėje. Kadangi sąnario kremzlės struktūra, mechaniniu požiūriu, yra gan sudėtinga, jos standumas makro skalėje gali kisti tarp 0,1-2MPa, mikro skalėje 40 – 70 kPa [3], o pačių chondrocitų standumas siekia vos kelis kPa. Mechaninių parametrų pokyčiai normalios ir simuliuotos mikrogravitacijos sąlygomis gali suteikti įžvalgų apie tai, kaip ląstelės reaguoja į tokias ekstremalias sąlygas.

Norint tiksliai įvertinti kremzlės mikromechaninius parametrus pirmiausia buvo atlikti AJM matavimo protokolo optimizavimo darbai naudojant 0,1-100 kPa PAAm hidrogelių etaloninius bandinius (pav. 1), kurie parodė naudojamo matavimo protokolo tikslumą.



pav 1. Išmatuoto ir deklaruoto Jungo modulio santykis.

Mikrogravitacijai simuliuoti buvo sukonstruotas 3D klinostatas. Šio prietaiso veikimas pagrįstas tuo bandinio orientacija erdvėje nuolatos keičiama aplink dvi ašis. Klinostato sukimosi ciklas buvo charakterizuotas atlikus kompiuterines simuliacijas ir apskaičiuavus sukamo bandinio orientacijos kryptingumą priklausomai nuo ašių individualaus sukimosi greičio (pav 2.).



pav 2. Bandinio sukimosi trajektorija esant skirtingiems ašių skukimo greičiams.

Žmogaus riebalinio audinio kamieninių ląstelių (hAdSC) diferenciacijos į chondrocitus metu atlikti mechaninių parametrų matavimai parodė reikšmingus pokyčius ląstelių standume lyginant su hAdSC prieš diferenciaciją ir šalia auginta hAdSC kontrolinė grupė. Matavimai buvo atliekami AJM kvazistatiniame ir dinamiame režime. Kvazistatiniu režimu buvo matuojamos jėgos-atstumo kreivės iš kurių apskaičiuotas ląstelių Jungo modulis. Matavimai dinamiame režime buvo naudojami nustatant ląstelių viskoelastines savybes. Šie matavimai atskleidžia ląstelių mechaninį fenotipą skirtinguose diferenciacijos etapuose. Tikslūs ląstelės mechaninio fenotipo matavimai gali būti naudojami sprendžiant apie būseną formuojant audinių modelius.

*Reikšminiai žodžiai: mechanobiologija, mikrogravitacija AJM, hAdSC, kremzlė.*

### Literatūra

- [1] Q. Zhang, M. Zhang, N. Meng, X. Wei, and W. Chen, 'Mechanobiology of the articular chondrocyte', in Bone Cell Biomechanics, Mechanobiology and Bone Diseases, Elsevier, 2023, pp. 249–287. doi: 10.1016/B978-0-323-96123-3.00016-6.
- [2] B. Ganse, M. Cucchiari, and H. Madry, 'Joint Cartilage in Long-Duration Spaceflight', Jun. 01, 2022, MDPI. doi: 10.3390/biomedicines10061356.
- [3] W. Xu, J. Zhu, J. Hu, and L. Xiao, 'Engineering the biomechanical microenvironment of chondrocytes towards articular cartilage tissue engineering', Nov. 15, 2022, Elsevier Inc. doi: 10.1016/j.lfs.2022.121043.

# Laisvo ir inkapsuluoto dendrimeruose doksorubicino kaupimosi tyrimai mezenchiminėse kamieninėse ląstelėse

## Investigation of Free and Dendrimer-Encapsulated Doxorubicin Accumulation in Mesenchymal Stem Cells

Džiugas Jurgutis<sup>1,2</sup>, Hsiu-Pen Lin<sup>3</sup>, Yaw-Kuen Li<sup>3,4</sup>, Tung-Kung Wu<sup>3,5</sup>, Vitalijus Karabanovas<sup>1,6</sup>, Simona Steponkienė<sup>1</sup>, Ričardas Rotomskis<sup>1,7</sup>

<sup>1</sup>Biomedical Physics Laboratory, National Cancer Institute, Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Life Sciences Center, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

<sup>3</sup>Center for Emergent Functional Matter Science, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsin-Chu, Taiwan.

<sup>4</sup>Department of Applied Chemistry, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsin-Chu, Taiwan.

<sup>5</sup>Department of Biological Science and Technology, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsin-Chu, Taiwan

<sup>6</sup>Department of Chemistry and Bioengineering, Vilnius Gediminas Technical university, Vilnius, Lithuania

<sup>7</sup>Biophotonics Group of Laser Research Center, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

[dziugas.jurgutis@nvi.lt](mailto:dziugas.jurgutis@nvi.lt)

Doxorubicin (DOX) is a widely used chemotherapeutic drug, however, its non-specific distribution and toxicity to healthy tissues limit its clinical application in oncology. One strategy to address these limitations is loading DOX into functionalised nanocarriers such as dendrimer-based nanoclusters (DNCs), which can increase drug stability, prolong intracellular retention, and enable controlled drug release when combined with indocyanine green (ICG) [1]. To further improve selectivity and enhance delivery of chemotherapeutics to tumours, drug-loaded DNCs can be combined with mesenchymal stem cells (MSCs). These cells naturally migrate toward tumour tissue, thus enabling targeted drug delivery [2]. However, for this strategy to be effective, it is essential to determine how free DOX and DNCs loaded with DOX accumulate and are retained within MSCs.

The aim of this study was to investigate free and dendrimer-encapsulated DOX intracellular accumulation in MSCs.

Polyamidoamine (PAMAM) DNCs loaded with ICG, DOX, and functionalised with polyethylene glycol (DNCs-ICG-DOX-PEG) were synthesized using a previously established protocol [1]. DOX hydrochloride and DNCs-ICG-DOX-PEG were diluted in cell culture medium, either without fetal bovine serum (FBS) or supplemented with 10% FBS. Live human skin-derived MSCs were imaged using a Nikon Eclipse TE2000-S C1 plus laser scanning confocal microscope. To assess intracellular localisation of DOX and the DNCs, Hoechst 33342 and LysoTracker Green DND-26 were used to stain nuclei and lysosomes, respectively. MSC metabolic activity after exposure to different concentrations of DOX and DNCs-ICG-DOX-PEG was evaluated using the CCK-8 cell counting kit.

Our findings indicate that free DOX accumulated in both MSC nuclei and vesicular structures (Fig. 1A), and its localisation was not affected by the addition of FBS. After 3 h of incubation with DNCs-ICG-DOX-PEG, DOX fluorescence was detected mostly in vesicular structures (Fig. 1B). However, in the presence of FBS, a marked increase in DOX fluorescence signal within MSC

nuclei was observed. After a 3 h incubation with DNCs-ICG-DOX-PEG followed by 24 h of culture in fresh medium, DOX fluorescence was observed in MSC vesicles at significantly higher levels compared to free DOX. In addition, no nuclear fluorescence was detected in either the free DOX-treated or the DNC-treated cells. Localisation analysis indicated that the fluorescence observed in the vesicular structures after incubation with the DNCs was due to their accumulation in lysosomes. Finally, DNCs-ICG-DOX-PEG concentrations below 1.25  $\mu\text{M}$  had minimal effect on MSC metabolic activity.

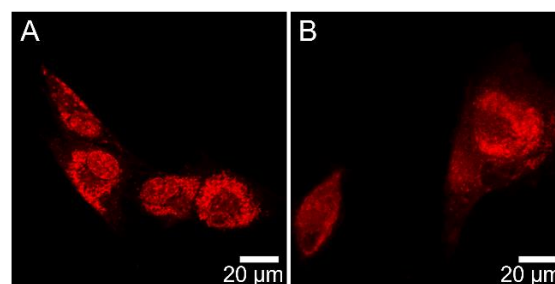


Fig. 1. MSCs treated with 1.25  $\mu\text{M}$  free DOX (A) or DNCs-ICG-DOX-PEG (B) for 3h;  $\lambda_{\text{ex}} = 488 \text{ nm}$ .

In summary, MSCs are able to actively efflux free DOX from their nuclei, while dendrimer-encapsulated DOX is retained longer in the cells without affecting their metabolic activity.

This study was supported by Research Council of Lithuania No. S-LT-TW-17 and National Council of Science and Technology No. NSTC 113-2923-M-A49-006 -MY2.

**Keywords:** doxorubicin, dendrimers, mesenchymal stem cells

### Literature

[1] C.-C. Weng, T.-A. Yang, Y.-K. Li., *Materials & Design*, 197, 109230 (2021).

[2] B. Layek et al., *Mol Cancer Ther.*, 17(6), 1196–1206 (2018).

## Spindulinės terapijos tikslumas esant skirtingam atsakui į gydymą

### Evaluation of radiotherapy accuracy based on treatment response

Greta Karpavičienė<sup>1,2</sup>, Reda Čerapaitė-Trušinskienė<sup>1,2</sup>, Diana Meilutytė-Lukauskienė<sup>1,3</sup>, Robertas Petrolis<sup>1</sup>, Vita Špečkauskienė<sup>1</sup>, Renata Paukštaitienė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Lietuvos Sveikatos Mokslų Universitetas, Fizikos, matematikos ir biofizikos katedra, Eivenių g. 4, 50103, Kaunas

<sup>2</sup>Lietuvos Sveikatos Mokslų Universiteto ligoninės Kauno klinikų filialas Onkologijos ligoninė, Volungių g. 16, 45434, Kaunas

<sup>3</sup>Lietuvos energetikos institutas, Breslaujos g. 3, Kaunas, 44403, Kaunas

[greta.karpaviciene@lsmu.lt](mailto:greta.karpaviciene@lsmu.lt)

Vaizdais valdoma radioterapija (angl. image-guided radiotherapy) padidino gydymo tikslumą, tačiau naviko atsakas dažniausiai vertinamas tik gydymo pabaigoje. Nors kasdien atliekami kūginio pluošto kompiuterinės tomografijos tomografijos – KPKT (angl. cone beam computed tomography) vaizdai yra įprasti verifikacijai, jie retai naudojami išsamesnei analizei ar gydymo efektyvumo įvertinimui. Tai ypač svarbu galvos ir kaklo navikų atvejais, kur dažni naviko tūrio, paciento svorio ir organų padėties pokyčiai tarp frakcijų gali būti kliniškai reikšmingi [1, 2].

Nepaisant termoplastinių kaukių ir kitų imobilizavimo priemonių, pacientų padėties nuokrypiai išlieka. Be to, KPKT ir planavimo KT vaizdų registracija dažnai apsunkinama dėl skirtingų skenavimo sąlygų – pjūvių neatitikimo, poslinkių, pasukimų ar mastelio iškraipymų. Nors šie neatitikimai dažnai sunkiai pastebimi kasdienėje praktikoje, jie gali reikšmingai paveikti suplanuotą dozę, ypač esant stipriam atsakui į gydymą.

Šio tyrimo tikslas – įvertinti vaizdų neatitikimų įtaką dozės nuokrypiams nuo suplanuotosios dozės, skirtingo atsako į spindulinę terapiją kontekste. Tyrimo metu buvo analizuoti LSMUL KK Onkologijos ligoninėje, linijiniu greitintuvu *Halcyon V3.1* gydytų dviejų pacientų, sergančių galvos-kaklo navikais, kiekvienos procedūros metu registruoti KPKT vaizdai. Siekiant koreguoti erdvinis iškraipymus KPKT vaizduose, buvo identifikuoti kauliniai orientyrai pagal jų Hounsfieldo vieneto (HU) reikšmes ir suformuoti trimačiai taškų debesys. Duomenų registracijai naudotas MATLAB aplinkoje sukurtas algoritmas, apimantis šiuos etapus: 1) retai išdėstytų taškų debesies generavimą; 2) iteracinio artimiausio taško atitikimo algoritmo taikymą; 3) erdvinės transformacijos įgyvendinimą, pritaikant transformacijos matricą KPKT duomenims.

Pakoreguoti KPKT vaizdai buvo lyginami su planavimo KT vaizdais, siekiant įvertinti anatominį atitikimą. Pacientui, kuriam stebėtas silpnas atsakas į spindulinį gydymą, koordinatinių nuokrypių vidurkis (standartinis nuokrypis) buvo: X (šoninė kryptimi) – 2,51 (1,49) mm, Y (aukščio kryptimi) – 2,13 (1,31) mm, Z (išilginė kryptimi) – 1,92 (1,22) mm. Tuo tarpu pacientui su stipriu atsaku į gydymą, vidutiniai nuokrypiai buvo žymiai mažesni: X – 0,17 (0,13) mm, Y – 0,14 (0,12)

mm, Z – 0,79 (0,99) mm. Remiantis šiais duomenimis, apskaičiuota dozės neatitiktis (procentais) suplanuotai dozei (1 lentelė).

1 lentelė. Dozių neatitikimas (%) suplanuotai dozei gydymam tūriui (PTV) ir kritiniams organams.

| Struktūra        | Atsakas į gydymą | Min neatitiktis | Didž. neatitiktis | Mediana |
|------------------|------------------|-----------------|-------------------|---------|
| PTV              | Silpnas          | -3.61           | 1.79              | -0.91   |
|                  | Stiprus          | -1.39           | 0.84              | -0.14   |
| Stuburo smegenys | Silpnas          | 0.26            | 0.59              | 0.47    |
|                  | Stiprus          | -7,17           | 8.80              | 0.16    |
| Seilių liaukos   | Silpnas          | -3.62           | 3.51              | -0.04   |
|                  | Stiprus          | -11.15          | 16.72             | 3.45    |
| Stemplė          | Silpnas          | -1.75           | 3.00              | 0.46    |
|                  | Stiprus          | -12.91          | 12.21             | -0.41   |
| Gerklos          | Silpnas          | -1.05           | 1.25              | 0.11    |
|                  | Stiprus          | -6.95           | 6.87              | 0.16    |

Kritinių organų – seilių liaukų, stemplės, stuburo smegenų – dozių neatitikimai kai kuriais atvejais viršija 3 %, t.y. peržengė leistinas radioterapijos ribas.

Tyrimas parodė, jog net minimalūs pacientų padėties pokyčiai gali turėti kliniškai reikšmingų pokyčių apšvitos dozi. Rezultatai išryškino poreikį detalesnei vaizdų analizei bei KPKT duomenų integravimui, ypač svarstant adaptyvios terapijos galimybes.

Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. P-ITP-25-1.

*Reikšminiai žodžiai:* spindulinė terapija, dozės paskirstymas, KPKT, naviko atsakas.

#### Literatūra

- [1] Wagenaar R, D. et al. Head and neck IMPT probabilistic dose accumulation: Feasibility of a 2 mm setup uncertainty setting. *Radiotherapy and Oncology*, 2021, 154: 45-52.
- [2] Sminia P. et al (2023) *Clinical Radiobiology for Radiation Oncology*. In: Baatout, S. (eds) *Radiobiology Textbook*. Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-031-18810-7\\_5](https://doi.org/10.1007/978-3-031-18810-7_5)

# The impact of propofol on the functional activity of vascular Cx37 channels

Kotryna Naujokaitė<sup>1</sup>, Orestas Makniusevičius<sup>1</sup>, Tadas Kraujalis<sup>1,2</sup>, Mindaugas Šnipas<sup>1,3</sup>, Lina Kraujalienė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Lithuanian University of Health Sciences, Medical Academy, Institute of Cardiology, Kaunas, Lithuania

<sup>2</sup>Kaunas University of Technology, Department of Applied Informatics, Kaunas, Lithuania

<sup>3</sup>Kaunas University of Technology, Department of Mathematical Modelling, Kaunas, Lithuania

[kotryna.naujokaite@stud.lsmu.lt](mailto:kotryna.naujokaite@stud.lsmu.lt)

Propofol is a widely utilized general anesthetic that facilitates rapid induction and recovery of anesthesia. A major adverse effect of propofol is the reduction in systemic vascular resistance, which frequently results in hypotension. This hemodynamic alteration may precipitate cardiac arrhythmias and myocardial ischemia due to compromised coronary perfusion and diminished oxygen delivery. One principal mechanism underlying propofol-induced hypotension is peripheral vasodilation. Propofol exerts direct relaxant effects on vascular smooth muscle and attenuates sympathetic nervous system activity, thereby decreasing vascular tone. Consequently, systemic vascular resistance declines, leading to a fall in arterial blood pressure. Currently, there is no consistently effective clinical intervention to fully mitigate propofol-induced hypotension, and alternative strategies are often insufficient.

The cardiovascular side effects of propofol may involve multiple molecular targets. Previous studies have demonstrated that propofol can modulate intercellular communication via gap junction (GJ) channels composed of connexin 43 (Cx43). Nevertheless, the comprehensive effects of propofol on other vascular connexins remain poorly characterized. Cx45, Cx43, Cx40, and Cx37 are all known to form GJ channels in the vascular system, contributing to vasodilation, synchronization of vascular tone, and the pathogenesis of various vascular disorders, including hypertension and atherosclerosis.

The present study aimed to elucidate the effects of propofol on cardiovascular connexins. To this end, we examined the impact of propofol on GJ channels formed by Cx45, Cx43, Cx40, and Cx37, which were exogenously expressed in human cervical epithelial adenocarcinoma (HeLa) cells. Junctional conductance was assessed using the double whole-cell patch-clamp technique. Our results indicated that Cx40 and Cx43 channels exhibited comparable sensitivity to propofol, whereas Cx45 channels responded only at substantially higher drug concentrations. Notably, Cx37 demonstrated the highest susceptibility, displaying significant sensitivity even at low propofol concentrations. Based on these findings, we hypothesized that Cx37 may play a central role in propofol-induced hypotension. Physiologically, Cx37 mediates the transmission of vasodilatory signals, thereby contributing to reductions in vascular resistance. Knockout models have demonstrated that the absence of Cx37 alters vascular

responsiveness to diverse stimuli, resulting in endothelial dysfunction. Consequently, we focused on elucidating the mechanistic basis of propofol action on Cx37.

Previous reports have suggested that propofol modulates Cx43 GJ channels via activation of protein kinase C (PKC), leading to phosphorylation of Cx43 and reduced intercellular coupling. To determine whether a similar pathway mediates propofol effects on Cx37, we employed the kinase inhibitor GF109203X. Low concentrations of GF109203X selectively inhibit PKC, whereas higher concentrations inhibit both PKC and protein kinase A (PKA). Neither concentration abrogated propofol-induced inhibition of Cx37 channels, indicating that neither PKC nor PKA mediates this effect. To further investigate the underlying mechanism, channel gating experiments were performed using a  $-90$  mV, 45 s ramp protocol. These studies revealed minimal differences between control and propofol conditions, suggesting that propofol mechanism of action is independent of gating alterations. However, further studies are needed to investigate the mechanism of propofol's effect on Cx37.

*Key words: connexin, hypotension, propofol, kinases, action mechanism.*

# Gimdos kaklelio vėžio tyrimas netiesinės mikroskopijos ir statistinės analizės metodais

## Cervical cancer investigation using non-linear microscopy and statistical analysis methods

Elena Osteikaitė<sup>1,2</sup>, Martynas Riauka<sup>2</sup>, Viktoras Mažeika<sup>2</sup>, Mykolas Mačiulis<sup>1,2</sup>, Edvardas Žurauskas<sup>3</sup>, Virginijus Barzda<sup>2,4</sup>

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

<sup>2</sup>Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, 10223, Vilnius

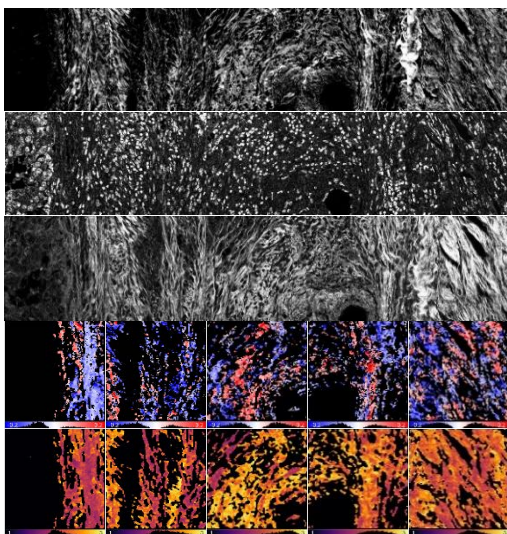
<sup>3</sup>Valstybinis patologijos centras, Vilniaus universiteto ligoninės Santaros klinikos filialas, P. Baublio g. 5, 08406, Vilnius

<sup>4</sup>Department of Physics, University of Toronto, 60 St George St, Toronto

[elena.osteikaite@ff.vu.lt](mailto:elena.osteikaite@ff.vu.lt)

Netiesinės mikroskopijos metodai gali būti potencialiai naudingi vėžinių susirgimų diagnostikoje dėl selektyvaus vaizdinimo galimybių. Antrosios harmonikos generacija (SHG) leidžia stebėti ląsteles supančiame audinyje esantį kolageną, o trečiosios harmonikos generacija (THG) ląstelių membranas, matomas dėl lūžio rodiklio pokyčio. Šio tyrimo metu, naudojant poliarimetrinę netiesinę mikroskopiją, buvo vaizdinti penki gimdos kaklelio vėžio mėginiai. Gauti rezultatai buvo analizuoti su dvigubos Stokso-Miulerio poliarimetrijos (DSMP), tekstūrinės analizės ir principinių komponentų analizės (PCA) metodais.

Tyrimo metu mėginiai yra sužadinami skirtingos poliarizacijos lazerinės spinduliuotės impulsais. Generuojamo kolageno SHG atsako poliarizacinė būsena yra nustatoma naudojant poliarizacinių būsenų analizatorių. Gauti duomenys yra naudojami DSMP metodu apskaičiuojant kolageno molekulių ultrastruktūrinius parametrus, pvz.: *C*-santykį (nusako molekulių orientaciją atsižvelgiant į vaizdo plokštumą, susijęs su molekulių poliškumu [1]) ir *R*-santykis (nusako kolageno dipolių orientaciją fibrilių atžvilgiu [2]). Tyrimo eigoje sugeneruojami šių ir kitų poliarimetrinių parametrų verčių žemėlapiai leidžia įvertinti parametrų verčių kitimą lyginant skirtingas mėginio vietas (1 pav.).

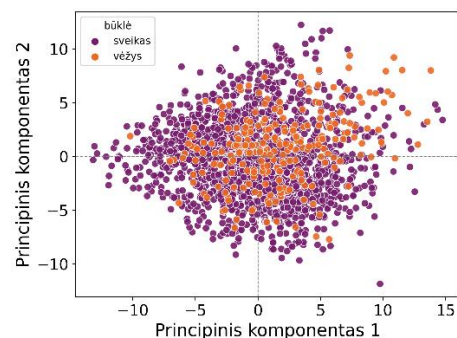


1 pav. Žmogaus gimdos kaklelio endometrioidinės karcinomos netiesinės mikroskopijos vaizdai. Nuo viršaus į apačią: SHG, THG, dvifotonės sužadinimo fluorescencijos vaizdai, *C*-santykio ir *R*-santykio verčių

žemėlapiai.

Gauti žemėlapiai toliau yra analizuojami naudojant tekstūrinę analizę, kurios metu yra apskaičiuojami poliarimetriniai-tekstūriniai parametrai. Tokiu būdu galima vaizdiškai įvertinti audinio parametrų bei struktūros pokyčius.

Gauti duomenys taip pat yra analizuojami naudojant Kruskal-Wallis statistinį testą ir PCA metodą. Statistinio testo metu yra išskiriami statistiškai reikšmingą skirtumą tarp vėžio paveiktų ir nepaveiktų plotų parodantys poliarimetriniai-tekstūriniai parametrai. Šiems parametrais yra pritaikomas PCA metodas, kuris sugeneruoja principinius komponentus – poliarimetrinių-tekstūrinių parametrų kombinacijos, geriausiai apibūdinančios vėžio audinio skirtumus.



2 pav. Vėžio paveiktų ir sveikų audinių principinių komponentų verčių variacija.

Kombinuojant netiesinės mikroskopijos, DSMP, tekstūrinės analizės ir PCA metodus, yra stebimi kolageno struktūros pokyčiai vėžiniame audinyje. Rezultatuose išryškėja pagrindiniai audinio skirtumus nurodantys parametrai, pvz.: SHG signalo intensyvumas ir *R*-santykis.

*Reikšminiai žodžiai: netiesinė mikroskopija, antrosios harmonikos generacija, trečiosios harmonikos generacija, dviguba Stokso-Miulerio poliarimetrija, principinių komponentų analizė.*

### Literatūra

- [1] K. Mirsanaye, *Digital Histopathology with Second Harmonic Generation Microscopy*, PhD thesis, University of Toronto (2022).
- [2] A. Golaraei, *Polarimetric second-harmonic generation microscopy of the hierarchical structure of collagen in stage i-iii non-small cell lung carcinoma*, Biomedical Optics Express (2020).

# CdTe ir CdSe/ZnS kvantinių taškų neigiamo poveikio vienaląsčiams dumbliams slopinimas antioksidantais

## Inhibition of negative effects of CdTe and CdSe/ZnS quantum dots on green microalgae by antioxidants

Augustė Paciukonytė, Danielė Gedminaitė, Rasa Miliukaitė, Agnė Kalnaitytė-Vengeliienė  
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius  
[auguste.paciukonyte@ff.stud.vu.lt](mailto:auguste.paciukonyte@ff.stud.vu.lt)

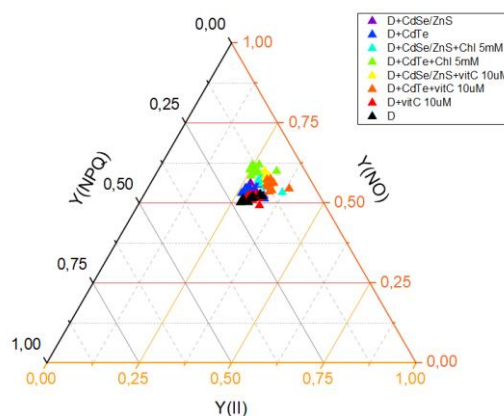
Kvantiniai taškai (KT) – puslaidininkinės nanodalelės – (nuo 3 nm iki 100 nm) sudaryti iš branduolio ir galintys būti padengti papildomu struktūra ir optines savybes stabilizuojančiu apvalkalu [1]. KT naudingi ląstelių sistemų stebėjimui, nes pasižymi plačiais sugerties ir siaurais emisijos spektrais. Tai leidžia tiksliai vaizdinti ir sekti įvairius dinaminis pokyčius ląstelėse, stebint jų fluorescenciją skirtinguose bangų ilgiuose [2]. Veikiant šviesa arba kitais išoriniais veiksniais, KT gali generuoti aktyvias deguonies formas (ROS), kurios gali sukelti oksidacinę pažaidos grandinę, pažeisdamos ląstelių DNR, mitochondrijas ir membranas. Šis poveikis pasireiškia KT esant artimoje sąveikoje su ląstele arba dėl jų mažo dydžio patekus į ląstelės vidų. Ekosistemose labai svarbūs fotosintetinantys vienaląsčiai žalieji dumbliai, kurie vieni pirmųjų susiduria su į gamtinius vandenį patenkančiais teršalais. Siekiant apsaugoti ląsteles nuo KT generuojamų ROS žalos, gali būti panaudoti antioksidantai, neutralizuojantys ROS ir mažinantys oksidacinį stresą.

Šio tyrimo tikslas – įvertinti Mg-chlorofilino (Chl,  $C_{34}H_{31}MgN_4Na_3O_6$ , Carl Roth, Vokietija) bei L-askorbo rūgšties, kitaip žinomos kaip vitaminas C (vit C, Sigma-Aldrich, JAV) įtaką CdTe-COOH (570 nm, PlasmaChem GmbH, Vokietija) ir CdSe/ZnS-COOH (620 nm, Invitrogen, JAV) kvantinių taškų sukeltiems *Scenedesmus* sp. dumblių autofluorescencijos (AF) ir fotosintezės parametrų pokyčiams. Dumblių kultūra auginta universalių augalų trąšų tirpale (pH 6,2, Schultz All Purpose Water Soluble Plant Food 20-20-20, Schultz Company, JAV),  $20 \pm 1^\circ C$  temperatūroje, taikant 12 val. dienos ir 12 val. nakties režimo,  $13 \mu mol$  fotonų/ $m^2 s$  intensyvumo apšvietimą dienos šviesos diodine lempa 6 W, 8000 K. Eksperimento metu matuoti dumblių AF spektrai ir moduluotos amplitudės impulsų fluorimetru (Junior PAM, Heinz Walz GmbH, Vokietija) nustatyti fotosintezės parametrai: santykinis elektronų pernašos greitis (ETR), antrosios fotosistemos (PSII) efektyvus fotocheminis kvantinis našumas Y(II), reguliuojamo nefotocheminio fluorescencijos gesinimo kvantinis našumas Y(NPQ) ir nereguliuojamo energijos išsklaidymo kvantinis našumas Y(NO).

Atlikus matavimus bei palyginus tik antioksidantais paveiktų dumblių AF spektrus ir fotosintezės parametrus su dumblių kontrolės (D) vertėmis, nenustatyta, jog vieni antioksidantai terpėje turėtų neigiamos įtakos tirtiems *Scenedesmus* sp. dumblių parametrams. Abiejų tipų KT sukėlė dumblių Y(NPQ) ir Y(II) sumažėjimą, bei Y(NO) padidėjimą (1 pav.). Šis poveikis Y(NPQ) ir Y(NO) dar

sustiprėjo į 24 val. KT veikėtų dumblių bandinius užnešus L-askorbo rūgšties. Y(II) parametrai vit. C įtaka buvo neįreiki.

Tiriant Mg-chlorofilino įtaką KT poveikiui, nustatyta, kad į abiejų tipų KT paveiktus bandinius užnešus Chl, Y(NPQ) vertės sumažėjo, o Y(NO) tapo aukštesnės nei dumblių, nepaveiktų KT. Šis neigiamas poveikis ypač išryškėja su CdTe KT. Dumblių, paveiktų su šiais KT bei Mg-chlorofilinu, ETR vertės sumažėjo, lyginat su vertėmis, užregistruotomis nepaveikuose arba tik KT paveikuose dumbliuose. Taigi, tikėtina, kad buvo nustatytas ne antioksidacinis, bet fotosensibilizuojantis Mg-chlorofilino poveikis *Scenedesmus* sp. dumbliams, kuris tirtoje terpėje su CdTe kvantiniais taškais buvo sustiprintas.



1 pav. *Scenedesmus* sp. dumblių (D), 48val. veikėtų kvantiniais taškais (CdTe ir CdSe/ZnS) ir 24val. – su antioksidantais (Mg-chlorofilinu ir L-askorbo rūgštimi), kvantiniai našumai aktyvinėje šviesoje.

**Reikšminiai žodžiai:** nanodalelės, antioksidantai, dumbliai, autofluorescencija, PAM.

### Literatūra

- [1] Nhi Le, Min Zhang, Kyoungtae Kim, *Quantum Dots and Their Interaction with Biological Systems*, International Journal of Molecular Sciences (2022)
- [2] Maureen A Walling, Jennifer A Novak, Jason R E Shepard, *Quantum Dots for Live Cell and In Vivo Imaging*, International Journal of Molecular Sciences (2009)

# PAMAM dendrimerų nanoklasteriai: sintezė, savybės ir taikymo perspektyvos fototerapijoje

## PAMAM Dendrimer Nanoclusters: Synthesis, Properties and Application Prospects in Phototherapy

Emilė Pečiukaitytė<sup>1,2</sup>, Alėja Marija Daugėlaitė<sup>1,3</sup>, Vilius Poderys<sup>1</sup>, Vitalijus Karabanovas<sup>1,4</sup>, Hsiu-Pen Lin<sup>5,6</sup>, Yaw-Kuen Li<sup>5</sup>, Tung-Kung Wu<sup>5,7</sup>, Ričardas Rotomskis<sup>1,5</sup>, Simona Steponkienė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Biomedical Physics Laboratory, National Cancer Institute, Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Life Sciences Center, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

<sup>3</sup>Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

<sup>4</sup>Department of Chemistry and Bioengineering, Vilnius Gediminas Technical university, Vilnius, Lithuania

<sup>5</sup>Center for Emergent Functional Matter Science, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsin-Chu, Taiwan

<sup>6</sup>Department of Applied Chemistry, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsin-Chu, Taiwan

<sup>7</sup>Department of Biological Science and Technology, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsin-Chu, Taiwan

<sup>8</sup>Biophotonics Group of Laser Research Center, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

[emile.peciukaityte@nvi.lt](mailto:emile.peciukaityte@nvi.lt)

Targeted delivery of chemotherapeutic drugs using nanocarriers is increasingly relevant, offering enhanced therapeutic efficacy while reducing side effects through controlled release triggered by external stimuli like light or ultrasound [1]. However, stability, encapsulation efficiency, and controlled release remain key challenges limiting clinical application. PAMAM dendrimer nanoclusters (DNCs) show promise due to their porous, branched structure that allows functionalization of its outer part by attaching various molecules or compounds, thus conferring desired properties to the dendrimers [2]. Examples of such molecules are the chemotherapeutic drug doxorubicin (DOX) and the dye indocyanine green (ICG).

The chemotherapeutic drug DOX is widely used for treating various types of cancer. DOX's mechanism of action involves intercalation and interaction with DNA, disrupting its function and ultimately inducing apoptosis of cancer cells. ICG is a clinically approved fluorescent marker characterized by the most intense light absorption in the near-infrared light region [3]. Such light absorption by ICG creates conditions for deep tissue imaging and labeling due to the opening of the biological optical transparency window. Therefore, loading PAMAM dendrimer clusters with DOX and ICG would create a multifunctional nanosystem (Fig. 1) that combines chemotherapy and phototherapy.

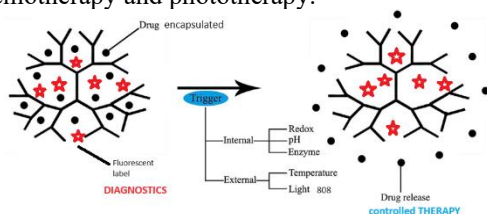


Fig.1 Principal scheme of multifunctional dendrimer-based nanosystem.

**Research objective** – to synthesize and investigate the physicochemical properties of PAMAM dendrimer clusters loaded with doxorubicin and indocyanine green, evaluate colloidal stability, photostability and phototherapeutic effect *in vitro*.

PAMAM dendrimer nanoclusters were loaded with ICG and DOX through ionic interaction, and polyethylene glycol (PEG) was subsequently covalently attached to the nanocluster [4]. The optical properties of DNCs-ICG-DOX-PEG clusters were measured using an FLS920 spectrometer (Edinburgh Instruments Ltd) and a UV–VIS spectrometer Cary 50 (Varian, Australia). The hydrodynamic diameter of DNCs-ICG-DOX-PEG nanoclusters was determined using a ZetaPals (Brookhaven Inc., USA) particle size analyzer. Photobleaching and phototherapeutic effect experiments on human cells were performed using an 808 nm wavelength laser.

It was determined that DNCs-ICG-DOX-PEG nanoclusters are optically more stable and exhibit better substance retention in the nanocluster in various biological media, compared to nanoclusters without PEG. Photobleaching experiments showed that upon irradiation of the DNCs-ICG-DOX-PEG cluster with 808 nm light resulted in the decrease of ICG absorption and an increase in DOX absorption intensity, indicating substance release from the cluster structure. The *in vitro* study with human cells showed that irradiation with an 808 nm laser decreased the metabolic activity of cells in a dose-dependent manner.

This project has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No S-LT-TW-17 and National Council of Science and Technology of Taiwan agreement No NSTC 113-2923-M-A49-006-MY2.

**Keywords:** *nanocarriers, dendrimers, phototherapy, mesenchymal stem cells*

### Literature

- [1] Vázquez-González, M., & Willner, I. (2021). ACS Applied Materials & Interfaces, 13(8), 9520–9541.
- [2] Weng, C.-C., Yang, T.-A., & Li, Y.-K. (2021). Materials & Design, 197, 109230.
- [3] Gowsalya, K., Yasothamani, V., & Vivek, R. (2021). Nanoscale Advances, 3(12), 3332–3352.
- [4] Weng, C.-C., Yang, T.-A., & Li, Y.-K. (2021). Materials & Design, 197, 109230.

# Ilgaamžių dirbtinių radionuklidų erdvinis pasiskirstymas ir nevienalytiškumas Lietuvoje

## Spatial Distribution and Heterogeneity of Long-Lived Artificial Radionuclides in Lithuania

Andrius Puzas<sup>1</sup>, Marina Konstantinova<sup>1</sup>, Rasa Gvozdaite<sup>1</sup>, Rūta Druteikienė<sup>1</sup>, Nikolaj Tarasiuk<sup>1</sup>, Ch. Berndhardsson<sup>2</sup>, Guillaume Pédehontaa-Hiaa<sup>2</sup>, Sören Mattsson<sup>2</sup>, Diana Adlienė<sup>3</sup>, James V. Cizdziel<sup>4</sup>, Šarūnas Buivydas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Medical Radiation Physics Malmö, Lund University, Malmö, Sweden

<sup>3</sup>Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania

<sup>4</sup>University of Mississippi, Mississippi, University, United States of America  
andrius.puzas@ftmc.lt

Radionuclide migration in the environment is a complex physicochemical process that is still actively studied. In Lithuania, as in the rest of Europe, two major radionuclide fallout events have been identified: global nuclear weapons testing and the 1986 Chernobyl Nuclear Power Plant accident.

Also before 1986, the distribution of long-lived radionuclides in soil was heterogeneous, with the highest activities recorded in central and western parts of Lithuania [1]. This pattern was determined by a number of factors that promoted radionuclide accumulation on the soil surface, especially in forests, areas with high precipitation, and wetlands, where migration downwards was facilitated. After the Chernobyl accident, new contaminated areas were identified in Lithuania, ranging in size from a few square meters to several square kilometers. The formation of large radioactive hotspots has been attributed to specific features of vertical air-mass mixing [1].

Anthropogenic radionuclides such as <sup>137</sup>Cs and <sup>239,240</sup>Pu, as well as their isotopic and activity ratios, are widely used to address various questions related to their transport and accumulation in environmental compartments [2]. Understanding the distribution of these radionuclides in natural or semi-natural environments makes it possible to predict potential future contamination by artificial radionuclides. The activities and isotopic ratios of artificial radionuclides, together with stable-element isotopic ratios, provide valuable information about the origin of contamination in ecological systems [3]. Understanding how radioactive isotopes are distributed under different environmental and soil conditions is crucial for assessing the consequences of nuclear power plant accidents or potential nuclear weapon detonations.

In order to determine the origin of artificial radionuclides deposited in soil and to identify fallout anomalies, almost one hundred topsoil samples (0–5 cm depth) were collected from meadow and forest areas in Lithuania, especially in regions where radionuclide dispersion after the 1986 Chernobyl accident was likely. Samples were dried, weighed, and the activity of <sup>137</sup>Cs was determined using a gamma spectrometer with an HPGe detector (Canberra, USA) with a relative efficiency of 25 %. A sequential two-step actinide separation procedure, involving ion exchange and

subsequent ion chromatography, was applied. Plutonium isotope activities were measured by alpha-particle spectrometry (Ortec alpha spectrometer with a SILENA gamma spectrometric system and coaxial detector) and by isotopic mass spectrometry using a double-focusing high-resolution inductively coupled plasma mass spectrometer (Element 2, Thermo Fisher, USA).

The activity concentration of <sup>137</sup>Cs in the upper soil layer in north-western and western Lithuania ranged from 1 to 198 Bq kg<sup>-1</sup> (d.wt.), while in southern Lithuania the maximum value reached 250 Bq kg<sup>-1</sup> (d.wt.). The mean activity concentration was 39 ± 21 Bq kg<sup>-1</sup> overall (46 ± 28 Bq kg<sup>-1</sup> (d.wt.) in the south and 32 ± 9 Bq kg<sup>-1</sup> in the west). The activity concentration of <sup>238</sup>Pu and <sup>239+240</sup>Pu were two orders of magnitude lower, with greater variability. The values ranged from below the detection limit to 0.25 Bq kg<sup>-1</sup> (d.wt.) for <sup>238</sup>Pu, and from 3.6 mBq kg<sup>-1</sup> (d.wt.) to 1.8 Bq kg<sup>-1</sup> (d.wt.) for <sup>239+240</sup>Pu. The highest values were observed in southern Lithuania, where the average <sup>238</sup>Pu activity was 2.2 ± 1.6 mBq kg<sup>-1</sup> (d.wt.)

In north-western Lithuania, the average was 32 ± 2 mBq kg<sup>-1</sup> (d.wt.), while <sup>239+240</sup>Pu activity concentration was 0.01 ± 0.009 Bq kg<sup>-1</sup> (d.wt.) and 0.49 ± 0.40 Bq kg<sup>-1</sup> (d.wt.), respectively. For comparison, in eastern Lithuania the <sup>137</sup>Cs specific activity in topsoil ranged from 0.6 to 7.0 Bq kg<sup>-1</sup> (d.wt.)

An elevated <sup>238</sup>Pu/<sup>239,240</sup>Pu activity ratio of up to 0.30 and a <sup>240</sup>Pu/<sup>239</sup>Pu isotopic ratio of up to 0.26 in southern, south-eastern, and western Lithuania indicate a contamination source associated with the Chernobyl nuclear accident.

**Keywords:** Radionuclides, <sup>137</sup>Cs (Cesium-137), <sup>239</sup>Pu, <sup>240</sup>Pu (Plutonium Isotopes), Isotopic Ratios, Soil Contamination, Spatial Heterogeneity, Lithuania, Chernobyl fallout.

### Literature

- [1] D. Butkus et al., 2001, *Geochem. Intern.*, 39, 719-724.
- [2] G. Matisoff, 2017, *J. Environ. Rad.*, 167, 222-234
- [3] B. Lukšienė et al., 2014, *J. Radioanal. Nucl. Chem.*, 300, 277-2867

# Mezenchiminių kamieninių ląstelių formos ir dydžio įtaka plazminės membranos ir lipidinių lašelių mikroklampai

## Influence of Cell Shape and Size on Lipid Droplet and Plasma Membrane Microviscosity in Mesenchymal Stem Cells

Jekaterina Skibickaja<sup>1,3</sup>, Džiugas Jurgutis<sup>1,3</sup>, Airina Mazėtytė-Godienė<sup>4</sup>, Martynas Gavutis<sup>4</sup>,  
Jelena Dodonova-Vaitkūnienė<sup>2</sup>, Ramūnas Valiokas<sup>4</sup>, Vitalijus Karabanovas<sup>1,5</sup>

<sup>1</sup>Nacionalinis vėžio institutas, Biomedicininės fizikos laboratorija, P. Baublio g. 3b, 08406 Vilnius

<sup>2</sup>Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas, Naugarduko g. 24, 03225 Vilnius

<sup>3</sup>Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 7, 10257 Vilnius

<sup>4</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Nanoinžinerijos skyrius, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

<sup>5</sup>Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Chemijos ir bioinžinerijos katedra, Saulėtekio al. 11, 10223 Vilnius  
[jekaterina.skibickaja@gmc.stud.vu.lt](mailto:jekaterina.skibickaja@gmc.stud.vu.lt)

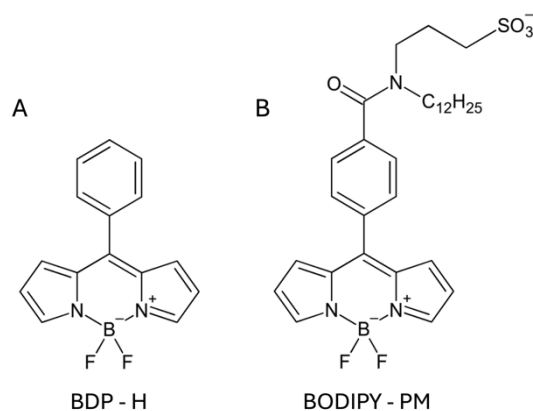
Ląstelių biofizikinės savybės yra glaudžiai susijusios su jų būsena ir funkcijomis. Viena iš tokių savybių – viduląstelinė klampa (mikrokampa), daranti įtaką visų ląstelėje esančių molekulių difuzijos greičiui, taip paveikdama ląstelių metabolizmą. Mikrokampas pokyčiai ląstelių viduje stebimi vykstant įvairiems ląsteliniams procesams, pavyzdžiui, piktybėjimui, apoptozei ar mezenchiminių kamieninių ląstelių (MKL) diferenciacijai [1]. MKL laikomos perspektyviu terapiniu įrankiu, ir šių ląstelių biofizikinių savybių tyrimai gali padėti jas geriau charakterizuoti ir suprasti su MKL susijusius biologinius procesus bei sutrikimus. Viena iš svarbių MKL parametrų yra jų forma, kurios pokyčiai gali turėti įtakos plazminės membranos struktūrai, citoskeleto išsidėstymui ir diferenciacijos potencialui. Tačiau vis dar nėra aišku, kaip MKL formos pokyčiai paveikia jų biofizikines savybes, tokias kaip mikrokampa.

Mikrokampai įvertinti šiame darbe buvo taikyta fluorescencijos gyvavimo trukmės vaizdinimo mikroskopija (FLIM) kartu su molekuliniais rotoriais – BDP-H (1A pav.) ir BODIPY-PM (1B pav.). Klampesnėje aplinkoje molekulių rotorių fluorescencijos gyvavimo trukmės ilgėja, o jas paversti į klamos vertes galima taikant kalibracines kreives, sudarytas jau žinomos klamos tirpaluose [2–3].

Šio tyrimo tikslas – įvertinti mikrokampas pokyčius žmogaus odos MKL, augintose ant skirtingos formos ir dydžio adhezinių raštų. MKL geometrijos pokyčiai sukelti naudojant polietilenglikolio hidrogelius, ant kurių tam tikra forma buvo imobilizuotas fibronektinas. Suformuoti trijų formų (disko, lašo, trikampio) ir trijų dydžių (710  $\mu\text{m}^2$ , 1260  $\mu\text{m}^2$ , 2000  $\mu\text{m}^2$ ) adheziniai raštai. Fluorescencijos gyvavimo trukmės matavimai gyvuose ląstelėse atlikti lazeriniu konfokaliu mikroskopu, naudojant FLIM su laiku koreliuotos pavienių fotonų skaičiavimo įranga (TCSPC).

Rezultatai parodė, kad BDP-H kaupiasi MKL lipidiniuose lašeliuose ir citozolyje, o BODIPY-PM – MKL plazminės membranos. MKL, augančių monoslouksnyje ir ant skirtingos formos bei dydžio adhezinių raštų, lipidinių lašelių mikrokampas vertės statistiškai reikšmingai nesiskyrė. Tuo tarpu MKL plazminės membranos mikrokampa kito priklausomai

nuo ląstelių geometrijos. Taigi, MKL formos pokyčiai skirtingai veikia viduląstelių struktūrų mikrokampą – plazminės membranos mikrokampa kinta priklausomai nuo ląstelių geometrijos, tuo tarpu lipidinių lašelių mikrokampa išlieka nepakitusi.



1 pav. Klamos jutiklių BDP-H (A) ir BODIPY-PM (B) struktūrinės formulės.

**Reikšminiai žodžiai:** mezenchiminės kamieninės ląstelės, molekuliniai rotorai, FLIM, mikrokampa, lipidiniai lašeliai, plazminė membrana, adheziniai raštai

### Literatūra

- [1] M. Paez-Perez and M. K. Kuimova, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 63(6): e202311233 (2024).
- [2] D. Jurgutis et al., *Int. J. Mol. Sci.*, 23, 5687 (2022).
- [3] A. Polita et al., *RSC Adv.*, 13(28): 19257-19264 (2023).

# Molekuliniai ir membraniniai greito fotosintezės atsistatymo po rehidratacijos mechanizmai dykumos samanoje

## Molecular and membrane-level mechanisms of rapid photosynthetic recovery in the desert moss upon rehydration

Simona Streckaitė<sup>1</sup>, Jevgenij Chmeliiov<sup>1,2</sup>, Lena Golubewa<sup>1</sup>, Yaroslau Padrez<sup>1</sup>, Vilius Čirgelis<sup>1</sup>, Andrius Gelžinis<sup>1,2</sup>, Marius Franckevičius<sup>1</sup>, Leonas Valkūnas<sup>1</sup>, Chunhong Yang<sup>3</sup>, Bruno Robert<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Department of Molecular Compound Physics, Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio 3, 10257 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Institute of Chemical Physics, Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio 9, 10222 Vilnius, Lithuania

<sup>3</sup>Institute of Botany, Chinese Academy of Sciences, Beijing-100093, China

<sup>4</sup>Université Paris-Saclay, CEA, CNRS, Institute for Integrative Biology of the Cell, 91198 Gif-sur-Yvette, France  
[simona.streckaite@ftmc.lt](mailto:simona.streckaite@ftmc.lt)

Global climate change and the resulting increase in aridity pose major challenges for terrestrial vegetation. Understanding the survival strategies of plants capable of withstanding extreme environments has therefore become an important topic in plant biology. The desert moss *Syntrichia caninervis* (*S. caninervis*) is one of the most stress-resistant bryophytes thriving under conditions of intense solar radiation, limited precipitation, prolonged snow cover, and temperature fluctuations ranging from  $-43^{\circ}\text{C}$  to  $+44^{\circ}\text{C}$ . Previous research has shown that this moss is desiccation and dehydration tolerant [1], and extremely heat resistant [2], making *S. caninervis* not only a valuable model for studying resilient photosynthetic organisms, but also a promising candidate for applications in agriculture under climate stress and for astrobiological studies focused on extraterrestrial colonization [1].

*S. caninervis* survives dehydration by entering a state in which metabolic and biochemical processes are suspended, yet the plant retains the remarkable ability to resume growth and photosynthesis within seconds to minutes after rehydration [3–5]. The morphological and physiological features of *S. caninervis*, that support its resilience, has been mostly studied at the level of cell or organism [1–3], but its specialized photosynthetic machinery, capable of modulating PSI and PSII activity according to hydration state, is still unknown. In particular, little is known about the molecular and membrane-level mechanisms underlying the immediate recovery of photosynthetic activity upon rehydration, including how the pigment–protein complexes, and energy transfer pathways reorganize during the dehydration–rehydration cycle.

In this work, we study the moss *S. caninervis* – one of the dominant species of biological soil crusts in the Gurbantunggut Desert in northwest China. We investigated the dynamics of the photosynthetic apparatus of *S. caninervis* using a combination of steady-state and time-resolved fluorescence (FL) spectroscopy, FLIM microscopy and theoretical analyses.

Spectral decomposition of streak camera data proposes the presence of three distinct fluorescent components whose dynamics changes between the dry and hydrated states. The reddest component is more

pronounced in the dehydrated state. Overall, the behaviour of observed components is reminiscent to LHCII aggregates. In dehydrated state, FL of PSII is strongly quenched, indicating suppression of photochemical activity. Notably, the additional spectral signature is observed at  $\sim 600$  nm (Fig. 1, left). We speculate, that this FL, which is weaker for the rehydrated sample, belongs to the carotenoids, as in dehydrated sample we might observe carotenoid aggregation. These preliminary results indicate complex reorganization of pigment–protein complexes during dehydration–rehydration. Further, by applying machine learning methods we will perform the principal component analysis of the obtained FL maps (Fig. 1, right) to reveal the most significant features and to elucidate the mechanisms underlying the immediate recovery of the photosynthetic activity in *S. caninervis*.

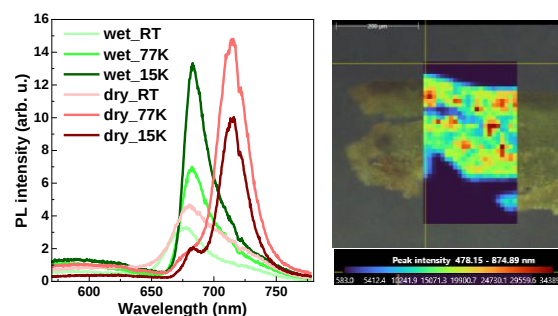


Fig. 1. FL spectra of dry and wet *S. caninervis* under 515 nm excitation (left) and FL intensity map of wet sample under 532 nm excitation at room temperature (right). Pixel size is  $22 \times 22 \mu\text{m}$ ; 10x objective was used.

**Key words:** *Syntrichia caninervis*, photosynthesis, photosystems, streak camera, fluorescence.

### Acknowledgements

This research has received funding from European Union NextGenerationEU (agreement No 10-036-T-0009).

### References

- [1] X. Li, et al., *Innovation* **5**, (2024).
- [2] L. Zhuo, et al., *Plant Physiol. Biochem.* **223**, (2025).
- [3] N. Wu, et al., *J. Bryol.* **34**, 1 (2012).
- [4] M. C. F. Proctor and N. Smirnov, *J. Exp. Bot.* **51**, 1695 (2000).
- [5] Y. Li, et al., *J. Plant. Physiol.* **167**, 1390 (2010).

# Doksorubicino fluorescencinės savybės: laisvos formos ir dendrimerinėse dalelėse inkapsuliuoto doksorubicino palyginimas

## Fluorescence Properties of Doxorubicin: Comparison of Free and Dendrimer-Encapsulated Forms

Skaistė Talanovaitė<sup>1</sup>, Džiugas Jurgutis<sup>1</sup>, Vilius Poderys<sup>1</sup>, Hsiu-Pen Lin<sup>2</sup>, Yaw-Kuen Li<sup>2,3</sup>, Tung-Kung Wu<sup>4</sup>, Ričardas Rotomskis<sup>1,5</sup>

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

<sup>2</sup> Center for Emergent Functional Matter Science, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsin-Chu, Taiwan.

<sup>3</sup> Department of Applied Chemistry, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsin-Chu, Taiwan.

<sup>4</sup> Department of Biological Science and Technology, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsin-Chu, Taiwan

<sup>5</sup> Biofotonikos grupė, Lazerių tyrimų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 9, c.3, LT-10222, Vilnius, Lietuva  
[skaiste.talanovaitė@gmc.stud.vu.lt](mailto:skaiste.talanovaitė@gmc.stud.vu.lt)

Doksorubicinas (DOX) yra plačiai naudojamas chemoterapinis vaistas, kurio veikimas yra paremtas DNR replikacijos ir RNR sintezės nutraukimu [1]. Šis vaistas naikina vėžines ląsteles, tačiau patekęs į sveiką audinį jį pažeidžia, taip apsunkinant gydymą. Tai galima išspręsti pasinaudojus nanodalelėmis, kurios tikslingai pristatytų DOX į vėžines ląsteles.

Tyrime nagrinėjame dendrimerinius nanoklasterius (DNC), sudarytus iš G3 poliamidoamino (PAMAM) dendrimerų, su patalpintu DOX bei fototerminiu pigmentu indocianino žaliuoju (ICG), galinčiu padėti atpalaiduoti DOX naviką. Konfokalinės mikroskopijos metodu ištyrėme DNC pasiskirstymą ląstelėse, o 32 kanalų spektriniu priedu išmatavome DOX, susikaupusio skirtingose ląstelių vietose, fluorescencijos spektrus. Taip pat ištyrėme DOX agregaciją ir spektrines savybes įvairiose terpėse.

DOX sugerties ir fluorescencijos spektrai išmatuoti fosfatinio buferio druskų tirpale (PBS), ląstelių mitybinėje terpėje Opti-MEM bei Opti-MEM su 10% jaučio embriono serumo (Opti-MEM+ 10% FBS). PBS terpėje užfiksuotas sugerties spektro poslinkis į ilgabangę pusę bei fluorescencijos spektro intensyvumo silpnėjimas rodo, kad tirpale vyksta DOX agregacija dėl didelės tirpalo joninės jėgos ir tarp DOX molekulių veikiančios  $\pi$ - $\pi$  sąveikos. Opti-MEM + 10% FBS terpėje DOX agregacija yra mažiausia, kadangi DOX pasižymi sąveika su baltymais [2], kuri sustabdo agregaciją. Didėjant inkubacijos laikui, spektriniai pokyčiai stiprėja, o vėliau pasireiškia DOX disociacija, kurios kinetika kinta priklausomai nuo terpės.

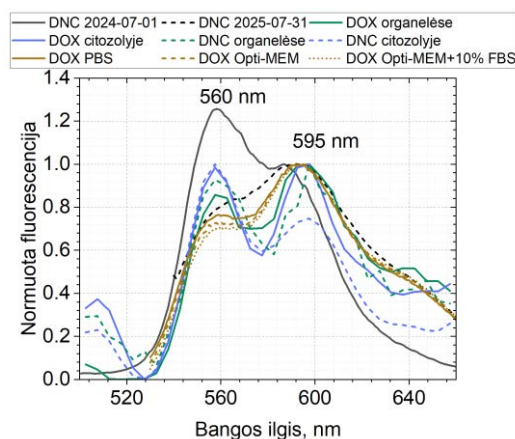
DNC, su inkapsuliuotu DOX bei ICG, sugerties spektre yra matomos DOX 480 nm bei ICG 780 nm sugerties juostos, o fluorescencijos spektre DOX būdinga plati juosta su maksimumais ties 560 nm ir 595 nm, kurių forma ir santykinis intensyvumas priklauso nuo aplinkos.

Tiek laisvo DOX, tiek DOX patalpinto DNC fluorescencijos spektrai buvo išmatuoti ir iš žmogaus odos išskirtose mezenchiminėse kamieninėse ląstelėse (MKL) (1 pav.). DOX susikaupia MKL vezikulinėse struktūrose ir branduolyje, tuo tarpu DOX inkapsuliuoto DNC fluorescencija buvo stebima tik vezikulinėse struktūrose. Po inkubacijos su DOX MKL branduoliuose stebima fluorescencija parodo, kad DOX yra mažo

dydžio, gali praeiti pro kelių nanometrų dydžio branduolio poras ir interkaluoti į branduolio DNR. Tuo tarpu DNC yra daug didesni ir negali patekti į branduolį.

Šiame tyrime spektrinės analizės metodais išnagrinėta DOX agregacijos bei stabilumo priklausomybė nuo koncentracijos įvairiose terpėse. Ištirtos DNC, turinčių įterptas DOX ir ICG molekules, spektrinės savybės. Konfokalinės mikroskopijos metodu nustatyti laisvo DOX ir DOX inkapsuliuoto į DNC akumuliacijos ir pasiskirstymo ląstelėse dėsningumai.

Tyrimas finansuotas Lietuvos mokslo tarybos (Nr. S-LT-TW-17) ir Taivano nacionalinės mokslo ir technologijų tarybos (Nr. NSTC 113-2923-M-A49-006-MY2) lėšomis.



1 pav. Doksorubicino (DOX) ir nanoklasterių (DNC) fluorescencijos spektrai skirtingose terpėse ( $c=4,12 \mu\text{M}$ )

*Reikšminiai žodžiai: doksorubicinas, fluorescencija, agregacija, dendrimeriniai nanoklasteriai.*

### Literatūra

- [1] Shah, S., Chandra, A., Kaur, A., Sabnis, N., Lacko, A., Gryczynski, Z., Fudala, R., & Gryczynski, I. Fluorescence properties of doxorubicin in PBS buffer and PVA films. *Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology*, 170, 65-69 (2017).
- [2] Agudelo, D., Bourassa, P., Bruneau, J., Berube, G., Asselin, É., & Tajmir-Riahi, H. A. Probing the binding sites of antibiotic drugs doxorubicin and N-(trifluoroacetyl) doxorubicin with human and bovine serum albumins (2012).

# Neutralioje vandeninėje terpėje susidariusių TPPS<sub>4</sub> agregatų fluorescencinių savybių tyrimai

## Studies of the fluorescent properties of TPPS<sub>4</sub> aggregates formed in neutral aqueous medium

Greta Tamoliūnaitė<sup>1</sup>, Vilius Poderys<sup>1</sup>, Ričardas Rotomskis<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis Vėžio institutas, P. Baublio g. 3b, LT-08406 Vilnius, Lietuva

<sup>2</sup>Biofotonikos grupė, Lazerinių tyrimų centras, Fizikos fakultetas, Vilniaus Universitetas, Sauletekio al. 9, LT-10222

Vilnius, Lietuva

[greta.tamoliunaite@gmc.stud.vu.lt](mailto:greta.tamoliunaite@gmc.stud.vu.lt)

Porfirino tipo junginiai, vykdančys įvairias funkcijas, yra plačiausiai paplitę biologiniuose objektuose. Dėl struktūrinių ypatybių jie dalyvauja savaiminės agregacijos procesuose, formuojant įvairių tipų agregatus. Intriguojanti šių achiralinių supramolekulinių junginių savybė yra tai, kad tirpale jie dažniausiai sudaro J- ir H-agregatų darinius, kurių dydis svyruoja nuo nano- iki mikrometrų [1] bei priklauso nuo aplinkos terpės savybių. Todėl labai svarbu išsiaiškinti kaip agregacijos procesas priklauso nuo terpės savybių ir kaip tai siejasi su porfirinų fluorescencija, nes biologiškai aktyvių pigmentų fluorescencijos matavimai biologiniuose objektuose yra vienas iš pagrindinių gyvosios gamtos ir žmogaus organizmo optinių tyrimo metodų.

Vienas iš plačiausiai tyrinėjamų buvo tetraanijoninis mezo-5,10,15,20-Tetrakis (4-sulfonatofenil) porfiras (TPPS<sub>4</sub>), kuris, kaip įrodyta, dėl rūgštėjimo ir (arba) sąveikos su katijoninėmis medžiagomis sudaro sudėtingus savitvarkius erdvinis darinius - J-agregatus [2]. Jų susidaryme dalyvauja TPPS<sub>4</sub> cviterjonai, sąveikaujantys per tarpusavio elektrostazines sąveikas [1]. Neseniai mes užfiksavome, kad ir neutraliuose vandeniniuose tirpaluose (pH=7), esant didelėms koncentracijoms, kai TPPS<sub>4</sub> cviterjonas nesiformuoja, agregacijos procesas vyksta [3]. Didinant TPPS<sub>4</sub> koncentraciją, vyksta matomos srities sugerties juostų persiskirstymas ir paskutinė sugerties juosta pasistumia į raudonąją spektro pusę (Pav.1). Tai parodo agregacijos procesą, nebūdingą J-agregatų formavimuisi.

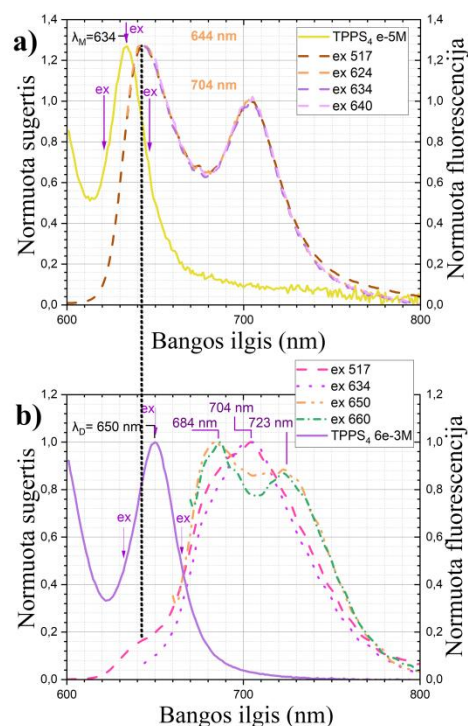
Agregacija pakeičia monomerinei formai būdingas fotofizikines ir fotochemines savybes, išvelgiamas sugerties bei fluorescencijos spektrų pokyčiuose.

Išmatuotą TPPS<sub>4</sub> monomerų fluorescencijos spektrą neutraliame pH sudaro dvi juostos kurių maksimumai yra ties 644 ir 704 nm (Pav.1a) ir jo forma nepriklauso nuo žadinančios šviesos bangos ilgio bei yra būdinga visai grupei porfirinio tipo molekulių.

Tuo tarpu tokios pačios aplinkos, didelės koncentracijos TPPS<sub>4</sub> tipalo fluorescencijos spektras nepanašus į TPPS<sub>4</sub> J-agregatų rūgščioje vandeninėje terpėje fluorescencijos spektrą ir priklauso nuo žadinančios šviesos bangos ilgio. Žadinant į TPPS<sub>4</sub> agregatų sugerties juostos maksimumą ties 650 nm fiksuojamos dvi fluorescencijos juostos su maksimaliomis vertėmis ties 684 ir 723 nm. Žadinant į trumpabangį TPPS<sub>4</sub> agregatų sugerties juostos sparną ties 634 nm fiksuojamos fluorescencijos spektrą sudaro viena plati juosta su maksimalia verte ties 704 nm.

Žadinant į ilgabangį TPPS<sub>4</sub> agregatų sugerties juostos sparną ties 660 nm fiksuojamos dvi fluorescencijos juostos su maksimaliomis vertėmis, atitinkančiomis spektrą, gautą žadinant į agregatų sugerties juostos maksimumą Pav.1b).

Tokia fluorescencijos spektro priklausomybė nuo žadinančios šviesos bangos ilgu rodo, kad TPPS<sub>4</sub> neutralioje vandeninėje terpėje formuoja kelis agregatų tipus, kurie turi skirtingus fluorescencijos spektrus.



1 pav. Matomos srities TPPS<sub>4</sub> labiausiai ilgabangės sugerties juostos (Q<sub>4</sub>) ir fluorescencijos spektrai, žadinant įvairiais bangos ilgiais į TPPS<sub>4</sub> Q<sub>1</sub> ir Q<sub>4</sub> sugerties juostas.

*Reikšminiai žodžiai:* TPPS<sub>4</sub>, fluorescencija, agregatai.

### Literatūra

- [1] R. Rotomskis, B. Liedberg et al., *Journal of Physical Chemistry B*, 108(9), 2833–2838, (2004).
- [2] M. Pleckaitis, R. Rotomskis, V. Barzda et al., *Nano Research*, 15(6), 5527–5537, (2022).
- [3] V. Poderys, G. Tamoliūnaitė, R. Rotomskis et al., *in press*, (National Cancer Institute, 2025).

# Aukštos raiškos dinaminė optinė koherentinė mikroskopija

## High-resolution dynamic optical coherence microscopy

Erikas Tarvydas<sup>1,2</sup>, Austėja Trečiokaitė<sup>1</sup>, Egidijus Aukšorius<sup>1</sup>

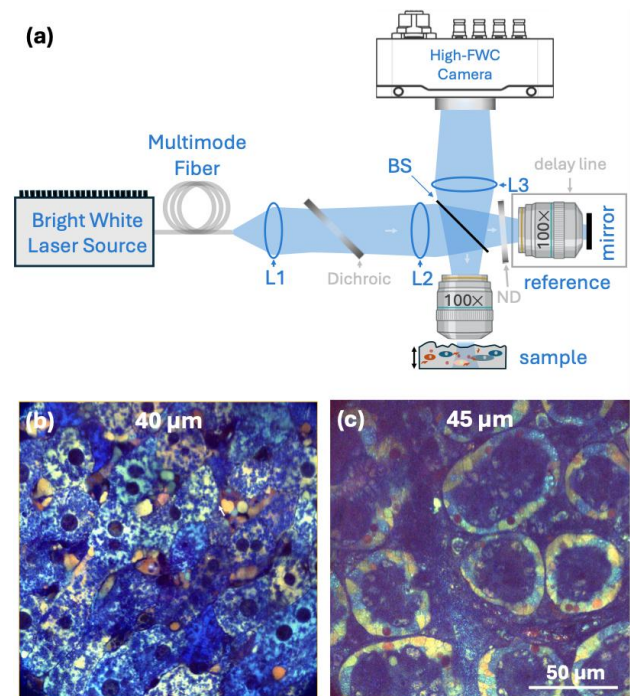
<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Medicinos fakultetas, M. K. Čiurlionio g. 21, Vilnius.

[erikas.tarvydas@ftmc.lt](mailto:erikas.tarvydas@ftmc.lt)

Biomedicinos moksle ypatingas dėmesys yra skiriamas tobulėjančioms sistemoms bei įvairiems metodams leidžiantiems vaizdinti audinius, jų ląsteles bei subląstelines komponentus, tačiau dauguma šių metodų susiduria su bandinio paruošimo problema. Dažnai tenka bandinį specialiai preparuoti, jį dažant, įvedant fluorescuojančius darinius, šaldant arba kitaip pažeidžiant jo struktūrą, kas gali lemti netikslumus vaizdinant bandinio struktūrą. Šiame darbe pristatome interferometrinės mikroskopijos pagrindu paremtą dinaminės pilno lauko optinės koherentinės mikroskopijos *d*-PL-OKM (angl. dynamic full field optical coherence microscopy *d*-FF-OCM) sistemą. Ši sistema išsprendžia bandinio paruošimo problemą ir nereikalauja jokio papildomo specifinio apdorojimo, geba vaizdinti įvairių biologinių audinių struktūras, ląsteles bei jų komponentus, iki 100  $\mu\text{m}$  gylyje su iki šiol aukščiausia žinoma skersine ( $\approx 270 \text{ nm}$ ) bei ašine ( $\approx 500 \text{ nm}$ ) optinėmis skyromis [1]. Gaunami vaizdai kontrastu prilygsta fluorescencinės mikroskopijos metodais gaunamiems vaizdams. Sistema pasižymi gebėjimu registruoti ląstelėse vykstančius smulkius dinامينius procesus atliekant laikinę vaizdų analizę iš užregistruotų 512 vaizdų per vieną sekundę, ir analizuojant šių vaizdų kiekvieno pikselio intensyvumo kitimą laike. Atlikus vaizdų laikinę analizę, ši informacija Furjė transformacijos būdu yra apdorojama ir kiekvienai dažniui juostai yra priskiriama spalva, tokiu būdu kiekvienas pikselis yra nuspalvinamas atitinkamomis spalvomis ir yra gaunami vaizdai remiantis skirtingų ląstelių bei jų komponentų virpesių dažniais [2, 3]. Mėlyna spalva priskiriama žemų, žalia vidurinių, raudona aukštų dažnių virpesiams. Šis metodas leidžia gerokai pagerinti vaizdų kontrastą dėl ko galime aiškiau išskirti biologines struktūras, lyginant su standartine PL-OKM. Šiuos rezultatus pasiekėme naudojant didelio intensyvumo, mažo koherentiškumo šviesos šaltinį (LS–WL1, Lightsources.tech), bei aukštos skaitinės apertūros ( $\text{NA} = 1.25$ ) 100 kartų didinančius objektyvus. Vaizdai registruojami specializuota kamera kurios kiekvienas pikselis gali registruoti virš milijono fotonų. Pirmajame paveikslėlyje (a) skiltyje nurodyta principinė *d*-PL-OKM sistemos schema. Apačioje pateikti vaizdai gauti naudojant dinaminį PL-OKM metodą: kepenų ląstelės (hepatocitai) 40  $\mu\text{m}$  gylyje (b), bei pelės plonojo žarnyno kriptose esančios epitelio ląstelės, 45  $\mu\text{m}$  gylyje (c). Mėlyna spalva atitinka žemus vibracijų dažnius (1-2 Hz), žalia – vidutinius (3-100 Hz), o raudona – aukštus dažnius (100-250 Hz). Pateiktuose, vaizduose galime aiškiai išskirti ląstelines struktūras bei

jų komponentus stebint jų ląstelinį aktyvumą. Šis metodas gali praversti ne tik fundamentiniuose biomediciniuose tyrimuose, bet ir vėžio bei kitų ligų diagnostikos tikslais.



1 pav. (a) PL-OKM principinė schema: nekoherentinis baltos šviesos lazerinis šaltinis, dichroinis filtras, pluošto daliklis – BS, lęšiai – L1-L3 bei du identiški  $\times 100$  objektyvai ( $\text{NA} = 1.25$ ). (b) pelės hepatocitų ląstelės užregistruotos 40  $\mu\text{m}$  gylyje, (c) pelės žarnyno epitelio ląstelės kriptose užregistruotos 45  $\mu\text{m}$  gylyje.

*Reikšminiai žodžiai: mikroskopija, dinaminė optinė koherentinė tomografija.*

### Literatūra

1. E. Tarvydas, et al., "High-Resolution Dynamic Full-Field Optical Coherence Microscopy: Illuminating Intracellular Activity in Deep Tissue," arXiv preprint arXiv:2508.03657 (2025).
2. C. Apelian, et al., "Dynamic full field optical coherence tomography: subcellular metabolic contrast revealed in tissues by interferometric signals temporal analysis," Biomedical Optics Express 7, 1511–1524 (2016).
3. T. Monfort, et al., "Dynamic full-field optical coherence tomography module adapted to commercial microscopes allows longitudinal in vitro cell culture study," Communications Biology 6, 992 (2023).

# Netiesinė optinė mikroskopija įvairiai dažytiems histologiniams audiniams

## Nonlinear optical microscopy of variously stained histology samples

Dominyka Vienažindytė<sup>1</sup>, Mykolas Mačiulis<sup>1</sup>, Viktoras Mažeika<sup>1,2</sup>, Martynas Riauka<sup>1</sup>, Arvydas Laurinavičius<sup>3</sup>, Virginijus Barzda<sup>1,4,5</sup>

<sup>1</sup>Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223, Vilnius, Lietuva

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

<sup>3</sup>Valstybinis patologijos centras, VšĮ Vilniaus universiteto ligoninės Santaros klinikų filialas, P. Baublio 5, LT-08406, Vilnius, Lietuva

<sup>4</sup>Chemical and Physical Sciences, University of Toronto Mississauga, Mississauga, ON, Canada

<sup>5</sup>Department of Physics, University of Toronto, Toronto, ON, Canada  
dominykavienazindyte@gmail.com

Histopatologija tyrinėja ligų metu audiniuose įvykusius pokyčius. Tam dažniausiai naudojama šviesaus lauko mikroskopija, tačiau pritaikius netiesinės optinės mikroskopijos metodus galima gauti naujus kontrastus ir suteikti papildomos informacijos medikams apie audinio struktūrą, kuri leistų padidinti ligos diagnozavimo tikslumą.

Auksiniu standartu histopatologijoje laikomas hematoksilino ir eozino (H&E) dažymo metodas [1]. Hematoksilinas nudažo ląstelių branduolius, o eozinas – tarpląstelinį užpildą. Dažymo metu terpei pereinant iš rūgštinės į šarminę hematoksilinas agreguojasi ir sukuria nanostruktūras, kurios efektyviai generuoja trečios harmonikos spinduliuotę (THG). Dėl šios priežasties hematoksilinas vadinamas harmonoforu [2].

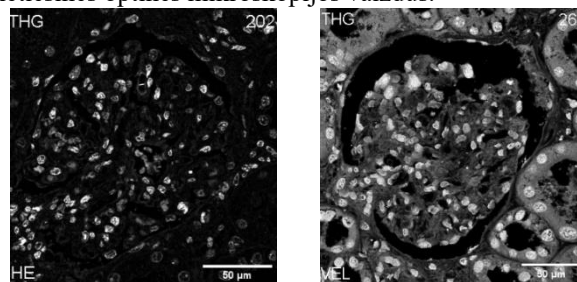
Harmonoforai yra molekulės ir molekulinės struktūros, galinčios generuoti aukštesniųjų harmonikų signalą. Histopatologijoje naudojami įvairūs dažai ir dažymo metodai, kurie gali efektyviai generuoti harmonikas, ir išskiria skirtingas struktūras normaliam ir ligos pažeistame audiniuose. Vieni dažai nudažo branduolius, kiti, tokie kaip Van Gieson dažymo metodas elastinui (EL), Verheoff hematoksilino, rezorcino fuksino dažymo metodas elastinui (VEL) išryškina elastiną, dar kiti dažai išryškina kolageną.

Skirtinguose dažymo metoduose harmonoforų vaidmenį atlieka įvairios dažų molekulės. Kadangi įvairūs harmonoforai ir jų netiesinio signalo atsakas nėra pakankamai išnagrinėti, šio tyrimo metu buvo iškeltas tikslas: ištirti netiesinės mikroskopijos atsaką naudojant įvairius histologinius dažymo metodus ir nustatyti, kurie metodai potencialiai gali suteikti papildomos informacijos naudojant netiesinę mikroskopiją.

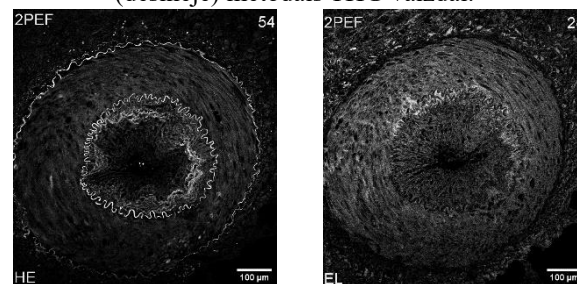
Siame darbe buvo ištirta trylika skirtingais dažymo metodais paruoštų žmogaus inkstų bandinių. Penki bandiniai buvo nudažyti su Majerio hematoksilinu, kurio sudėtyje yra aliuminio, keturi bandiniai – su Veigerto geležies hematoksilinu, kurio sudėtyje yra geležies, vienas bandinys – su Verheoff hematoksilinu, kurio sudėtyje taip pat yra geležies. Dviejų bandinių dažymų eigoje nebuvo naudojamas hematoksilinas ir vienas bandinys buvo nedažytas.

Tyrimo metu histologiniai bandiniai buvo vaizdinami naudojant tris netiesinius optinius vaizdinimo kontrastus: antros harmonikos generacija (SHG), THG ir dviejų fotonų sužadavimo fluorescencija (2PEF).

Tyrimo metu nustatyta, jog bandiniuose, kurių dažymo eigoje naudojamas Veigerto geležies arba Verheoff hematoksilinas, iš branduolių registruojamas THG signalas buvo stipresnis, nei bandiniuose, kurių dažymo eigoje naudojamas Majerio hematoksilinas. Rasti keli dažymo metodai, kurių THG signalas buvo stipresnis už auksiniu standartu laikomą H&E (1 pav.). Taip pat rasti keli dažymo metodai, kurie davė gerus 2PEF signalus (2 pav.). Šie rezultatai leistų parinkti dažymo būdą, su kuriuo būtų galima gauti geresnius netiesinės optinės mikroskopijos vaizdus.



1 pav. Inkstų glomerulų nudažytų H&E (kairėje) ir VEL (dešinėje) metodais THG vaizdai.



2 pav. Arterijos nudažytos H&E (kairėje) ir EL (dešinėje) metodais 2PEF vaizdai.

*Reikšminiai žodžiai: histopatologija, netiesinė mikroskopija.*

### Literatūra

- [1] Dapson R. W., Horobin R. W., 2009, Dyes from a twenty-first century perspective, *Biotech Histochem.* **84** (4): 135–7. doi:10.1080/10520290902908802
- [2] Tuer A., Tokarz D., Prent N., Cisek R., Alami J., Dumont D. J., Bakueva L., Rowlands J., Barzda V., 2010 Mar-Apr, Nonlinear multicontrast microscopy of hematoxylin-and eosin-stained histological sections, *J Biomed Opt.* **15**(2):026018. doi: 10.1117/1.3382908. PMID: 20459263.

# Mašininio mokymosi pagrindu atlikta *Syntrichia caninervis* hiperspektrinių vaizdų analizė dehidratacijos/rehidratacijos sąlygomis

## Machine learning based analysis of hyperspectral images of *Syntrichia caninervis* under dehydration/rehydration conditions

Yaraslau Padrez<sup>1</sup>, Simona Streckaitė<sup>1</sup>, Patricija Žemaitytė<sup>1,2</sup>, Lena Golubewa<sup>1,3</sup>, Vilius Čirgelis<sup>1</sup>, Andrius Gelžinis<sup>1,3</sup>, Jevgenij Chmeliov<sup>1,3</sup>, Leonas Valkūnas<sup>1</sup>, Chunhong Yang<sup>4</sup>, Bruno Robert<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Department of Molecular Compound Physics, Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio 3, 10257 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Institute of Biosciences, Life Sciences Center, Vilnius University, Saulėtekio 7, 10257 Vilnius, Lithuania

<sup>3</sup>Institute of Chemical Physics, Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio 9, 10222 Vilnius, Lithuania

<sup>4</sup>Institute of Botany, Chinese Academy of Sciences, Beijing-100093, China

<sup>5</sup>Université Paris-Saclay, CEA, CNRS, Institute for Integrative Biology of the Cell, 91198 Gif-sur-Yvette, France  
[patricija.zemaityte@gmc.stud.vu.lt](mailto:patricija.zemaityte@gmc.stud.vu.lt)

Desert ecosystems are among the harshest on Earth, and climate change is causing extreme heat and prolonged drought to extend beyond deserts, posing a challenge to agriculture. Mosses adapted to these conditions, such as *Syntrichia caninervis* (*S. caninervis*), play a key role in stabilizing biological soil crusts and are valuable models for studying survival strategies. Photosynthesis is one of the most important life-sustaining processes on Earth and the mechanisms of its restoration in desiccation-tolerant mosses are of high research significance. Hyperspectral fluorescence microscopy is a powerful label-free technique that allows the photosynthetic apparatus to be studied based on the fluorescence spectra of photosynthetic pigments. The addition of unsupervised machine learning (ML) algorithms enables the resolution of the overlapping spectral features of the photosynthetic pigments and can potentially pave the way to understanding the molecular mechanisms underlying the rapid recovery of the photosynthetic apparatus of mosses in dehydration/rehydration cycles.

In the present study, hyperspectral imaging of dehydrated and rehydrated samples of *S. caninervis* was performed, followed by ML-based segmentation of the spectral data. Fluorescence emission spectra were measured in the range of 530–900 nm at an excitation of 510 nm [1]. Segmentation of the hyperspectral images was performed by k-means clustering based on principal components covering >95% of the data variance.

The segmentation revealed seven distinct clusters in the dehydrated and six in the hydrated samples (Fig. 1A and 1B) ranging in size from 20–40 to hundreds of  $\mu\text{m}$ , indicating considerable spatial heterogeneity of emission spectra within the moss leaf. Both dehydrated and rehydrated moss samples show fluorescence in the 530–650 nm range, with dehydrated samples exhibiting significantly higher relative intensity and variance in the fluorescence peak position (Fig. 1C) than rehydrated moss leaves (Fig. 1D), probably resulting from partially disassembled pigments, e.g. carotenoids. The intensity ratio  $I_{686}/I_{720}$  varies in both the dehydrated and rehydrated samples, but is 15–50 times lower in the dehydrated sample, indicating the dominance of photosystem (PS) I. However, the fluorescence emission peaks related to PSII and centered at 686–707 nm are also present and more

pronounced in the edge clusters, probably indicating the contact of these regions with humid air and the onset of PSII recovery. The gradual shift of the peak from 690 nm to 707 nm when moving the outer segments towards the inner parts of the dehydrated moss leaf could refer to different phases of PSII recovery described in [1]. The revealed spatial heterogeneity can serve as a suitable model to study the rapid recovery of photosynthesis after rehydration by analyzing the spatially separated regions within the leaf.

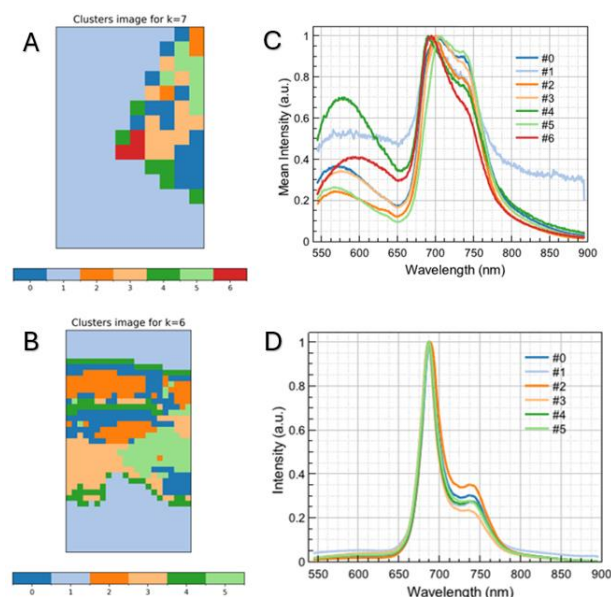


Fig. 1. The cluster map of *S. caninervis* samples (A – dehydrated, B – rehydrated) and normalized mean spectra corresponding to clusters (C – dehydrated, D – rehydrated).

**Key words:** *Syntrichia caninervis*, hyperspectral imaging, fluorescence, machine learning, spatial analysis

### References

[1] Y. Li, Z. Wang et al., J. Plant Physiol. **167**, 1390–1397, (2010).

# Karštųjų elektronų pernašos savybių tyrimai GaN dariniuose stipriame elektriniame lauke

## Determination of hot-electron transport properties in GaN subjected to a high electric field

Linās Ardaravičius, Oleg Kiprijanovič, Artur Šimukovič, Emilis Šermukšnis, Justinas Jorudas, Liudvikas Subačius, Irmantas Kašalynas

Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio av. 3, LT-10257, Vilnius

[linas.ardaravicius@ftmc.lt](mailto:linas.ardaravicius@ftmc.lt)

Gallium nitride (GaN) has a great potential for high-speed and high-power electronics applications [1]. Recently, electron transport characteristics have been investigated experimentally at room temperature with the usage of nanosecond-pulsed technique in epitaxial GaN grown with relatively low electron density of  $\sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  and high electron drift velocity of  $\sim 2.6 \times 10^7 \text{ cm/s}$  [2,3]. The goal of this work is to extend the pulsed measurements in GaN to region of higher electron densities ( $10^{17}$ - $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ) and to compare with the results of two-dimensional electron gas (2DEG) channels. Samples were grown by MOCVD at Virginia Commonwealth University, USA. A thin AlN layer was initially grown on sapphire followed by an undoped GaN and then nanometer-thick n-doped GaN channel with a thickness of 300 nm. Transmission line model patterns with the ohmic contacts were processed and had electron channel lengths  $L$  of 3.9  $\mu\text{m}$ , 9.9  $\mu\text{m}$ , 15.8  $\mu\text{m}$ , 19  $\mu\text{m}$ , and 23.2  $\mu\text{m}$ . All samples were mesa etched down to undoped GaN. The contact resistance varied from 1  $\Omega$  to 4  $\Omega$  (0.15-0.6  $\Omega \cdot \text{mm}$ ). The Hall effect experiments in the van der Pauw structures revealed the electron densities  $n$  in the investigated GaN channels as  $4.4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,  $6.4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , and  $1.4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , and the low-field mobilities 325  $\text{cm}^2/\text{Vs}$ , 214  $\text{cm}^2/\text{Vs}$ , 181  $\text{cm}^2/\text{Vs}$ , and 144  $\text{cm}^2/\text{Vs}$ , respectively. Crystal lattice self-heating effects were minimized by usage of nanosecond duration electrical pulses being as short as 5 ns. The highest measured current density was  $1.5 \times 10^4 \text{ A/mm}^2$  for  $4.4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  electron density. The electron drift velocity  $v_{\text{dr}}$  was estimated from data of measured current density and the Hall electron density,  $v_{\text{dr}} = j/en$ , where  $e$  is elementary charge. For the electron density of  $4.4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , maximum electron drift velocities were estimated as  $2.1 \times 10^7 \text{ cm/s}$  at 200 kV/cm for 3.9  $\mu\text{m}$  long sample,  $2.2 \times 10^7 \text{ cm/s}$  at 166 kV/cm for 9.9  $\mu\text{m}$  and 116 kV/cm for 15.8  $\mu\text{m}$  samples, respectively. The lowest drift velocity of  $1.85 \times 10^6 \text{ cm/s}$  at 35 kV/cm was estimated for GaN channels with the electron density  $1.4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . The velocity measurement results at intermediate-high electric fields were explained by the influence of non-equilibrium longitudinal optical phonon (hot) scattering. The hot phonon scattering plays the role in hot-electron transport in GaN channels [2,4] and this is supported by recent Monte Carlo simulations and deterministic approach [5]. The measurement results in GaN were compared with those in AlGaIn/AlN/GaN on sapphire with relatively high electron mobility of 1880  $\text{cm}^2/\text{Vs}$ . Figure 1 compares the drift velocity data in GaN for  $L = 3.9 \mu\text{m}$  and 9.9  $\mu\text{m}$  with the Hall electron density of  $4.4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  and in AlGaIn/AlN/GaN measured using

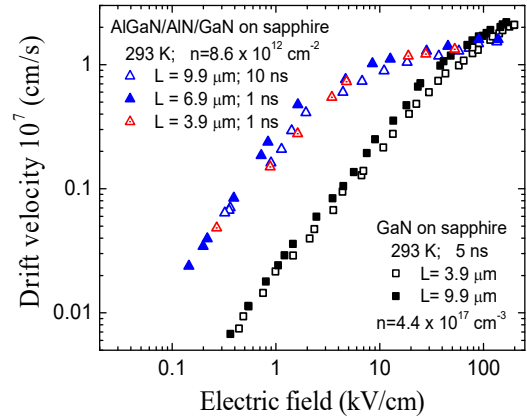


Fig. 1. Electron drift velocity dependence on the average applied electric field at room temperature in AlGaIn/AlN/GaN heterostructures and epitaxial GaN grown on sapphire substrates.

1-10 ns pulses for  $L = 3.9, 6.9$ , and  $9.9 \mu\text{m}$  with the 2DEG density of  $8.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . The electron velocity in the heterostructures grown with the AlN spacer was found higher than in epitaxial GaN up to 50-60 kV/cm. The highest electron velocity of  $1.3 \times 10^7 \text{ cm/s}$  at 55 kV/cm and  $1.6 \times 10^7 \text{ cm/s}$  at 140 kV/cm was attained for the AlGaIn/AlN/GaN on sapphire and is, respectively, 15% and 45% higher than that of AlGaIn/AlN/GaN on SiC [2]. The drift velocity at high electric fields ( $> 90 \text{ kV/cm}$ ) in the epitaxial GaN is higher than in AlGaIn/AlN/GaN heterostructure due to smaller hot-phonon effect [2,4].

**Funding:** This work was supported by the Research Council of Lithuania (Lietuvos mokslo taryba) under the “MasklessLMP” project grant No. S-LT-TW-24-10.

**Keywords:** electric field strength, nanosecond electrical pulses, electron drift velocity, GaN, AlGaIn/AlN/GaN, 2DEG, electron density, sapphire

### References

- [1] U. K. Mishra, L. Shen, T. E. Kazior, and Y. Wu, *Proc. IEEE*, **96**, 287 (2008); J. Wei et al., *IEEE Trans. Electron Devices* **71**, 1365 (2024).
- [2] L. Ardaravičius, O. Kiprijanovic, E. Šermukšnis, J. Jorudas, R. M. Balagula, L. Subačius, P. Prystawko, and I. Kašalynas, *Appl. Phys. A* **130**, 725 (2024).
- [3] R. M. Balagula, L. Subačius, J. Jorudas, V. Janonis, P. Prystawko, M. Grabowski, and I. Kašalynas, *Materials* **15**, 2066 (2022).
- [4] J. Liberis, M. Ramonas, O. Kiprijanovic, A. Matulionis, N. Goel, J. Simon, K. Wang, H. Xing, and D. Jena, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 202117 (2006).
- [5] M. Ramonas, J. Liberis, A. Šimukovič, E. Šermukšnis, A. Matulionis, V. Avrutin, Ü. Özgür, and H. Morkoç *J. Appl. Phys.* **128**, 055702 (2020); A. Dyson, D. R. Naylor, and B. K. Ridley, *IEEE Trans. Electron Devices* **62**, 3613 (2015).

# Iškaitinimų nulemti elektrinių charakteristikų pokyčiai silicio dalelių sensoriuose su vidiniu stiprinimu

## Impact of annealing on the electrical characteristics of silicon Low Gain Avalanche Detectors

Margarita Biveinytė<sup>1</sup>, Tomas Čeponis<sup>1</sup>, Laimonas Deveikis<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius  
margarita.biveinyte@ff.stud.vu.lt

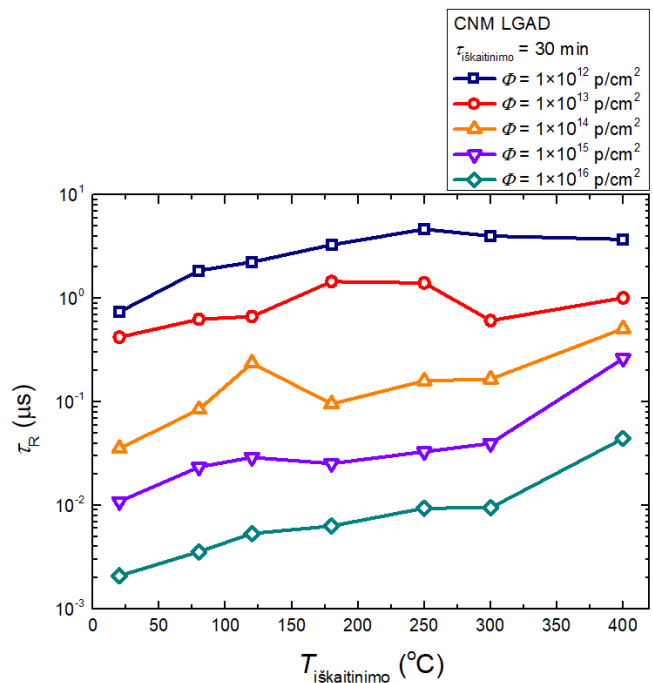
Silicio pagrindu pagaminti dalelių sensoriai yra plačiai taikomi aukštųjų energijų bei branduolinės fizikos eksperimentuose, vykdomuose Europos branduolinių mokslinių tyrimų organizacijoje (CERN). Per pastaruosius kelerius metus silicio sensoriai su vidiniu stiprinimu (angl. *Low Gain Avalanche Detectors*, LGADs) pasižymėjo puikiais rezultatais registruojant aukštos energijos daleles [1]. Dėl savo geros laikinės skyros, tokia sensorių architektūra yra perspektyvi LHC vykdomuose ATLAS ir CMS eksperimentuose, o jos įdiegimas numatomas didelio šviesumo Didžiajame hadronų priešpriešinių srautų greitintuvo (angl. *High-Luminosity Large Hadron Collider*, HL-LHC) atnaujinimo metu, kur puslaidininkiniai dalelių sensoriai susidurs su itin dideliais apšvitais įtėkiais ( $> 10^{16} \text{ n}_{eq}/\text{cm}^2$ ) [2]. Aukštųjų energijų spinduliuotė, priklausomai nuo tipo ir energijos, sąveikaudama su medžiaga, sukuria įvairius kristalinės gardelės defektus, kurie nulemia energijos lygmenis draustinių energijų tarpe [3]. Dėl to išauga nuotėkio srovė, mažėja krūvininkų gyvavimo trukmė, krūvio surinkimo efektyvumas, bei degradoja kitos elektrinės sensorių charakteristikos. Defektų aptikimas ir jų identifikavimas yra neatsiejami veiksniai, siekiant patobulinti medžiagų auginimo procesus, puslaidininkinių prietaisų veikimo principus bei padidinti jų ilgaamžiškumą. Šio darbo tyrimai yra aktualūs CERN DRD3 programoje, siekiant nustatyti aukštos energijos spinduliuotės poveikį dalelių sensorių funkcinėms charakteristikoms.

Šiame darbe buvo ištirtas prototipinių *Centro Nacional de Microelectrónica* (CNM) gamybos  $n^+p^+p^+$  struktūros LGAD sensorių rinkinys. Bandiniai, bendradarbiaujant su CERN, buvo apšvitinti 24 GeV skvarbiaisiais protonais. Minėtąjį sensorių rinkinį sudaro  $10^{12} - 10^{16} \text{ p}/\text{cm}^2$  įtėkių intervale apšvitinti bandiniai. Vėliau, siekiant ištirti santykinai aukštų temperatūrų iškaitinimų nulemtas defektų transformacijas, sensoriai buvo izochroniškai (30 min intervalais), iškaitinti skirtingose temperatūrose: 80°C, 120°C, 180°C, 250°C, 300°C ir 400°C.

Siekiant įvertinti iškaitinimų poveikį didelės energijos protonais apšvitintų silicio dalelių sensorių su vidiniu stiprinimu elektrinėms ir funkcinėms savybėms, buvo taikoma volt-amperinių (I-V), volt-faradinių (C-V) charakteristikų matavimų analizė, mikrobangomis zondojuojamo fotolaidumo kinetiką (angl. *Microwave Probed Photoconductivity*, MW-PC) registravimo bei fotojonizacijos spektroskopijos metodai. Atlikus tyrimus prieš ir po sensorių iškaitinimų, buvo įvertintos nuotėkio srovės ir sensorių stiprinimo sluoksnio nuskurdinimo

įtampas, nustatytos efektingos legirantų koncentracijos, išmatuotos nepusiausvirųjų krūvininkų gyvavimo trukmės, taip pat fotojonizacijos spektruose identifikuoti energijos lygmenys bei jiems priskirtini defektai.

Pranešime bus pristatytos I-V, C-V, MW-PC bei fotojonizacijos spektroskopijos eksperimentų metodikos, įranga bei aptarta iškaitinimų įtaka dideliais protonų įtėkiais apšvitintų LGAD sensorių funkcinėms charakteristikoms.



1 pav. Krūvininkų rekombinacijos trukmės priklausomybė nuo izochroninio iškaitinimo temperatūrų, esant skirtingiems protonų apšvitais įtėkiais

**Reikšminiai žodžiai:** silicis, puslaidininkiniai dalelių sensoriai, LGAD, CERN, HL-LHC, radiacinė pažeida, defektai, aukštųjų energijų spinduliuotė, iškaitinimai, protonų apšvita

### Literatūra

- [1] X. Shi et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **979**, 164382 (2020).
- [2] M. Moll, IEEE Trans. Nucl. Sci. **65**, 1561 (2018).
- [3] C. Claeys and E. Simoen, *Basic radiation damage mechanisms in semiconductor materials and devices* (Berlin, Springer, 2002).

# p-tipo silicio mažo stiprinimo lavinos detektorių (LGAD) spinduliuotės atsparumo tyrimai aukštos energijos fizikai

## Radiation hardness studies of p-type silicon Low-Gain Avalanche Detectors for high-energy physics

Faustina Kiaušaitė<sup>1</sup>, Tomas Čeponis<sup>1</sup>, Jevgenij Pavlov<sup>1</sup>

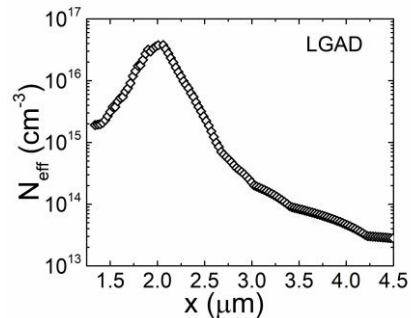
<sup>1</sup>Fotonikos ir Nanotechnologijų Institutas, Fizikos Fakultetas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius  
[faustina.kiausaite@ff.stud.vu.lt](mailto:faustina.kiausaite@ff.stud.vu.lt)

Mažo stiprinimo lavinos detektorius (LGAD) yra perspektyvi technologija, naudojama Didžiajame hadronų greitintuve (LHC). LGAD detektoriai pasižymi dideliu laiko matavimo tikslumu (skyra), kuris yra būtinas didelio šviesingumo (High-Luminosity) LHC detektoriams, turintiems atlaikyti iki dešimt kartų didesnes spinduliuotės dozes. Šiuo principu pereita nuo n-tipo Si puslaidininkio prie p-tipo, dėl geresnio atsparumo spinduliuotei. Tačiau stipriai boru legiruotas stiprinimo sluoksnis yra jautrus spinduliuotės sukeltai boro priemaišų dezaktyvacijai, vadinamai akceptorių pašalinimo efektu (acceptor removal effect) [1,2]. Norint užtikrinti patikimą šių detektorių veikimą sudėtingose spinduliuotės aplinkose, itin svarbu suprasti su boru susijusius giliuosius defektus.

Šiame darbe buvo taikyta šiluma skatinamų srovių spektroskopijos (TSC) matavimo metodika. Ištirti bandiniai, apšvitinti subatominių dalelių srautais, kurių įteklių diapazonas siekė nuo  $1 \times 10^{12}$  iki  $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . 1 pav. pateikta LGAD diodo schema. 2 pav. pavaizduotas neapšvitinto LGAD bandinio efektyvios priemaišų koncentracijos profilis.

Šis tyrimas atskleidė defektų atsiradimo dinamiką priklausomai nuo įteklių bei leido geriau suprasti BiOi defekto įtaką LGAD veikimo parametrų, taip pat parodė legiravimo mažinimo svarbą krūvininkų dauginimo sluoksnyje.

Šis tyrimas praplečia mūsų supratimą apie krūvininkų rekombinacijos procesus lavinos diodų sluoksniuose ir prisideda prie spinduliuotei atsparesnių detektorių kūrimo.



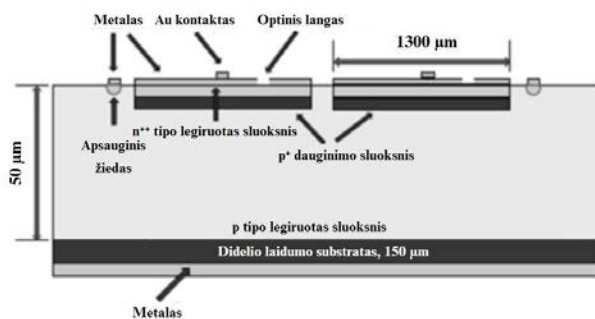
2 pav. Neapšvitinto LGAD bandinio efektyvios priemaišų koncentracijos profilis

*Reikšminiai žodžiai:* LGAD, radiaciniai defektai, silicis.

Konferencijoje bus pristatomi TSC matavimo metodika atlikti tyrimai bei jų analizė, lyginant skirtingais įtekiais apšvitintus LGAD bandinius.

### Literatūra

- [1] A. Himmerlich, N. Castello-Mor, E. C. Rivera, Y. Gurinskaya, V. Maulerova-Subert, M. Moll, I. Pintilie, E. Fretwurst, C. Liao, J. Schwandt. Defect characterization studies on irradiated boron-doped silicon pad diodes and Low Gain Avalanche Detectors. Nuclear Inst. And Methods in physics Reseach, A 2023, 1048, 167977.
- [2] M. Moll, Acceptor removal- Displacement damage effects involving the shallow acceptor doping of p-type silicon devices, PoS(Vertex2019)027



1 pav. LGAD diodo struktūra

# Judančios S-N ribos būsenos apibrėžimas YBaCuO plonų sluoksnių impulsinio S-N perjungimo metu

## Determination of a moving S-N border condition during pulsed S-N switching of YBaCuO thin films

Oleg Kiprijanovič, Linas Ardaravičius

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

[oleg.kiprijanovič@ftmc.lt](mailto:oleg.kiprijanovič@ftmc.lt)

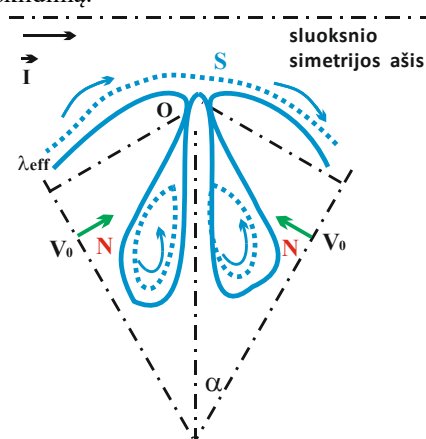
Naudojant trumpus optinius impulsus parodyta, kad superlaidžioji (S) būsena, kaip kolektyvinė kvantinė būsena (KKB), reaguodama į lokalias kritines perturbacijas, atitraukia S-N ribą į naują padėtį Fermio greičiu, tai yra apie  $10^6$  m/s [1]. Taikant idealizuotą modelį, aprašytas impulsinis perjungimas iš S į normalią būseną (S-N perjungimas) plonuose YBaCuO sluoksniuose [2]. Sklindančios N zonos S-N riba sutelkta į plotį  $\lambda_{\text{eff}}$  (Pirlio ilgis) dėka Meisnerio efekto. Eksperimentiškai buvo nustatyta, kad subnanosekundinis virškritinio impulso frontas sukuria sutelktos ant juostelės kraštų nestabilią srovės būklę. Tai yra 50-70  $\mu\text{m}$  ilgio bangų paketai, charakterizuojami kaip magneto hidrodinaminis išlinkimo nestabilumas. Jie pradeda judėti nuo sluoksnio kraštų iki jo centro, įvykdami S-N perjungimą. Šitas idealizuotas modelis paaiškina didelį N zonos sklidimo greitį  $\sim 6.1 \cdot 10^5$  m/s [2], tačiau reali S-N ribos formos keitimo dinamika N zonos sklidimo metu lieka neatskleista. S-N ribos nestabilios būsenos apibrėžimas taip pat lieka neišaiškintas.

Idealizuotame modelyje aprašytas N zonos sklidimas kumuliacinio tekėjimo būdu. Kai srovės koncentracija dviejų gretimų paketo išgaubimų viršūnėse tampa artima kritinei, KKB išlygina S-N ribą. Tuo metu vyksta slėnių peršokimai į išgaubimus, atsiradus kumuliacinėms čiurkšlėms. Kitame žingsnyje peršokimo procesas kartojasi tęsiant N zonos sklidimą [2].

Kaip rodo skenuojančiojo elektroninio mikroskopo vaizdai yra ir kitų S-N ribos evoliucijos bifurkacinių atvejų. Išgaubimo viršutinis taškas dėl Meisnerio (M) ir Lorencio (L) jėgų priešpriešos tampa nestabilu. Po dvejimo atsiranda jau du išgaubimai su slėniu. Jei dešinysis ir kairinis išsišakojimai nuo dviejų gretimų išgaubimų gali liestis, tada KKB išlaiko savo S-N ribas perjungdama srovės linijas. Šiuo atveju, uždara S sritys yra atskiriamos nuo pagrindinės S būsenos ir vėliau greitai išnyksta (žr. 2 pav. ir 3 pav. [2] darbe). Tokių S sričių išnykimo procesą galima pavadinti magnetine antikumuliacija. Atnaujintoje S-N riboje dvejimo procesas kartojasi, tęsiant N zonos sklidimą.

1 pav. aiškiai pademonstruotas KKB veikimas. Dažniausiai tai atsitinka, jei  $\lambda_{\text{eff}}$  yra 2-3  $\mu\text{m}$  pločio. KKB blokuoja čiurkšlės griaujamąjį poveikį taške O. Šiuo atveju, po srovės linijų persijungimo formuojasi išgaubimas ir dvi uždaros nykstančios antikumuliacinės sritys. Skaiciavimas rodo, kad čiurkšlės greitis yra labai artimas  $(1/2)V_0 \text{ctg}(\alpha/2)$ , o pagal kumuliacinio efekto hidrodinaminę teoriją  $1/2$  rodo, kad čiurkšlės terpė yra tokio pat tankio, kaip ir terpė, į kurią ji prasiskverbia.

Atnaujintoje S-N riboje procesas kartojasi tęsiant N zonos sklidimą.



1 pav. KKB blokuoja kumuliacinės čiurkšlės prasiskverbimą. Vaizdas iš viršaus

Realaus S-N ribos judėjimo metu, dėl M ir L jėgų priešpriešos, įvairios bifurkacinės situacijos atsiranda skirtingose ribos vietose. Dvejimo dinamikai nagrinėti galima pritaikyti subkrizinę pitėforko bifurkaciją su vienu kintamojo parametru [3]. Peršokimo atveju sprendimams rasti naudojamas klostės katastrofų paviršius priklausantis nuo dviejų kintamųjų [3]. Norint modeliuoti tokį N zonos sklidimą, būtina nurodyti S-N ribos „mechanines“ charakteristikas. Tačiau jie žymiai skirsis nuo tiriamų mechaninių objektų charakteristikų.

Dėl skirtingų bifurkacijų, išlenkta S-N riba N zonos sklidimo metu nuolat keičia formą laike ir erdvėje. Jos momentinė forma labai panaši į ribą tarp dviejų skysčių, iškraipytą po smūginės bangos praėjimo. Tai yra Rihtmajerio-Meškovo nestabilumas.

Galima padaryti išvadą, kad N zonos sklidimas yra palaikomas S srovės energija, paversta šiluma ir zonos kraštas nuolat ją gauna, o tai atitinka degimo bangos savybę. Todėl galima apibrėžti S-N ribą kaip nuolat esančią Rihtmajerio-Meškovo nestabilumo būsenoje.

*Reikšminiai žodžiai:* YBaCuO sluoksniai, S-N perjungimas, S-N riba, kumuliacinis efektas, bifurkacijos, Rihtmajerio-Meškovo nestabilumas, degimo banga

### Literatūra

- [1] J. Vestgård, P. Mikheenko, Y. Galperin, T. Johansen, New J. Phys. **15**, 093001 (2013) doi:10.1088/1367-2630/15/9/093001
- [2] O. Kiprijanovič, L. Ardaravičius, Thin Solid Films **748**, 139159 (2022) doi.org/10.1016/j.tsf.2022.139159
- [3] K. Pyragas, *Netiesinės dinamikos pagrindai* (Ciklonas, Vilnius, 2003).

## **CsPbCl<sub>3</sub>: Yb<sup>3+</sup> structural analysis using HYSCORE spectroscopy**

G. Kuktaite, G. Usevičius, M. Šimėnas

Fizikos fakultetas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius, Lietuva

I CsPbCl<sub>3</sub> perovskito gardelę įterpus Yb<sup>3+</sup> jonus, ši medžiaga pasižymi ypatingai efektyvia artimosios infraraudonosios šviesos emisija per kvantinę dalijimą. Dėl šios savybės šis perovskitas yra perspektyvi medžiaga kvantinėms technologijoms, saulės panelių, šviestukų (LED), lazerių bei fotodetektorių tobulinimui. Tačiau nėra žinoma kokią padėtį užima Yb<sup>3+</sup> kristalo gardelėje ir šios struktūros supratimas leistų ją efektyviai panaudoti bei kryptingai tobulinti perovskitų technologijas.

Šioje vasaros praktikoje, naudojant elektronų paramagnetinio rezonanso (EPR) ir hipersmulkiosios polygių koreliacijos (HYSCORE) spektroskopijas, metodus skirtus

analizuoti medžiagas su nesuporuotais elektronais, tyrėme CsPbCl<sub>3</sub>: Yb<sup>3+</sup> struktūrą. Jau anksčiau laboratorijoje buvo nustatyti kai kurie Yb<sup>3+</sup> parametrai, hipersmulkioji sąveika tarp laisvojo elektrono bei Yb<sup>3+</sup> branduolio ir elektrono g-faktorius, bet Yb<sup>3+</sup> jonų pozicija perovskito gardelėje nebuvo išsiaiškinta. Yb<sup>3+</sup> jonai sąveikauja su artimais Cs<sup>1+</sup>, Pb<sup>2+</sup> bei Cl<sup>1-</sup> branduoliais ir šių - hipersmulkiosios, sąveikos tarp elektrono ir branduolio, ir kvadrupolinės, sąveikos tarp nesferinio branduolio ir elektrinio lauko gradiento - sąveikų analizė leidžia detaliai tirti lokalią Yb<sup>3+</sup> aplinką kristalo gardelėje bei nustatyti Yb<sup>3+</sup> jonų padėtį. Naudojantis eksperimento duomenimis buvo nustatyta Yb<sup>3+</sup> jonų pozicija ir sąveikos su artimais branduoliais.

## Karštųjų krūvininkų fotosrovė - papildomi saulės elementų nuostoliai

### Hot carrier photocurrent as an additional loss in solar cells

Oleksandr Masalskyi<sup>1,2</sup>, Vladyslav Kyshchun<sup>1</sup>, Jonas Gradauskas<sup>1,2</sup>, Steponas Ašmontas<sup>2</sup>, Algirdas Sužiedėlis<sup>2</sup>, Aurimas Čerškus<sup>1,2</sup>, Aleksej Rodin<sup>2</sup>, Ihor Zharchenko<sup>1,2</sup>, Edmundas Širmulis<sup>2</sup>, Kazimieras Petrauskas<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilnius Gediminas Technical University, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius

<sup>2</sup>Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius  
oleksandr.masalskyi@vilniustech.lt

Reducing the difference between the theoretically predicted maximum efficiency of solar cells and the lower efficiencies achieved remains one of the fundamental challenges in photovoltaic research. Addressing this gap requires not only advancements in material science and fabrication technologies but also the introduction of novel physical concepts and mechanisms.

Hot carriers (HCs) are one of the modern candidates for solving this problem. Light can heat the carriers in two cases. First, if the photon energy  $h\nu$  is lower than the bandgap  $E_g$ , heating results from the intraband absorption. Such free carrier absorption is not spectrally selective and follows the classical Drude–Zener law. Another possibility for creating hot carriers is the interband absorption of photons with energy  $h\nu > E_g$ ; the excess energy is given to the generated electron or hole [1]. Regardless of the type of excitation, HCs transfer their energy to the lattice, a process characterized by the energy relaxation time which is typically on a picosecond scale.

In this work, we review formation of hot carrier photocurrent across inorganic Si [2] (Fig. 1) and GaAs, and organic-inorganic hybrid perovskite solar cells (Fig. 2) [3].

Short nanosecond-long laser pulses of various photon energies used for the excitation enabled to reveal existence of photocurrent having polarity opposite to the classical generation-caused photocurrent. This “opposing” photocurrent was detected under the excitation of both high and low energy photons. It was fast, it followed laser pulse shape. Deep analysis of its features like polarity, response speed, independence of excitation wavelength, rise with forward bias voltage, - allowed definitely attributing this photocurrent to the HC effect.

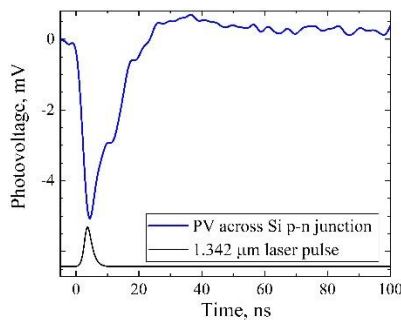


Fig.1. Photoresponse across Si solar cell at zero bias under excitation of 1.342  $\mu\text{m}$  laser pulse ( $h\nu < E_g$ ).

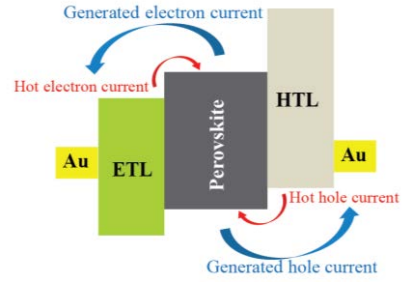


Fig.1 b)

Fig.2. Schematic formation of generation-induced photocurrent (blue arrows) and hot carrier photocurrent (red arrows) across a perovskite solar cell.

We also show, that, in case of  $h\nu < E_g$ , the carriers can be heated not only by the intraband absorption, but also, depending on the excitation intensity, by the excess energy left after the two-photon absorption-caused carrier generation, just like it takes place in the case of  $h\nu > E_g$ .

Four points to conclude:

First, hot carrier photocurrent is present regardless of solar cell material and excitation wavelength.

Second, Hot carrier photocurrent flows in the direction opposite to the generation-caused current.

Third, the maximum power point of a solar cell operation is within the region of the forward bias, which is advantageous for the flow of the HC photocurrent.

Fourth, the hot carrier photocurrent should be admitted as a new intrinsic fundamental loss, pre-thermalization loss, which opposes the approach of the realized solar cell efficiency to the theoretically predicted one.

**Keywords:** hot carriers, solar cell, Si, GaAs, organic-inorganic hybrid perovskite, intrinsic loss, photocurrent.

#### References

- [1] I. Zharchenko, J. Gradauskas, O. Masalskyi, and A. Rodin, *Opto-Electron. Rev.* **32**, e150181 (2024).
- [2] J. Gradauskas, O. Masalskyi, S. Asmontas, A. Sužiedelis, A. Rodin, and I. Zharchenko, *Ukr. J. Phys. Opt.* **25** (1), 01106 (2024).
- [3] M. Mujahid, A. Čerškus, J. Gradauskas, A. Grigučevičienė, R. Giraitis, K. Leinartas, A. Lučun, K. Petrauskas, A. Selskis, A. Sužiedėlis, A. Šilėnas, E. Širmulis, and S. Ašmontas, *Mater.* **18**, 85 (2025).

# Daugiamatis InGaN V defektų charakterizavimas

## Multidimensional characterization of InGaN V-defects

Mantas Migauskas, Gabija Soltanaitė, Žydrūnas Podlipskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius  
mantas.migauskas@gmail.com

InGaN kvantiniai dariniai yra plačiai tiriami ir taikomi optoelektronikoje, o defektų inžinerija reikšmingai prisidėjo prie šviestukų našumo didinimo. Nors dėl InGaN vyraujančių V formos defektų prigimties ir struktūros yra sutariama, jų įtaka krūvininkų dinamikai bei luminescencijai išlieka neaiški, dažnai prieštaringai interpretuojama arba tik apytiksliai nuspėjama.

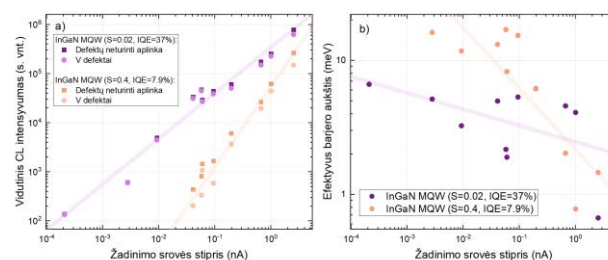
Šiame darbe atlikta masinė individualių V defektų analizė, pasitelkiant hibridinę skenuojančio elektronų mikroskopo (SEM) ir katodoluminescencijos (CL) sistemą. Tyrimo tikslas – mikroskopiniu lygmeniu įvertinti V defektus supantį potencialinį barjerą, nustatyti jų aktyvumo lygį  $S$  (arba gebėjimą veikti kaip nespindulinės rekombinacijos centrai), bei palyginti lokalų CL intensyvumą pačiuose defektuose ir gretimose, defektų neturinčioje srityje. Siekiant ištirti laisvųjų krūvininkų tankio įtaką krūvininkų dinamikos procesams, visi parametrai buvo išmatuoti naudojant 11 skirtingų elektronų patrankos srovių.

Tyrimo metu nagrinėti 7 MOCVD būdu užauginti InGaN daugybinių kvantinių duobių dariniai, pasižymintys skirtingais kvantinių duobių bei barjerų storiais, ir skirtingu vidiniu kvantiniu našumu – IQE (7 – 37 %). Duomenims pritaikyti trys analizės metodai. Pirmas įvertina efektyvų V defektus supantį potencialinį barjerą iš CL matavimais gautų bangos ilgio ties luminescencijos maksimumu žemėlapių (angl. *peak wavelength shift*, PWS). Šie žemėlapiai apdoroti specialiai sukurtu programiniu kodu, kuris identifikuoja defektus ir automatiškai apskaičiuoja jų žiedinius profilius. Kiekvieno bandinio charakteristikai naudotas šimtų ar tūkstančių individualių defektų profilių vidurkis, o energijos pokytis interpretuotas kaip efektyvus potencialinis barjeras. Antras atskiria defektų sritis nuo gretimų, defektų neturinčių regionų, tuomet abiejose zonose nustato CL intensyvumo pokytį nuo žadinimo srovės stiprio. Trečias remiasi difuzija ribotos rekombinacijos modeliu [1], pritaikytu lokalaus CL intensyvumo priklausomybei nuo V defektų tankio, siekiant apskaičiuoti defektų aktyvumo lygį  $S$  ( $0 \div 1$ ). Priklausomybė gauta CL žemėlapius suskirstant į tūkstančius mažesnių sričių ir kiekvienoje iš jų įvertinant tiriamus parametrus.

Rezultatai parodė, kad vidutinis CL intensyvumas tiek V defektuose, tiek homogeniškame paviršiuje, auga tiesiškai su srovės stipriu, o lyginant juos tarpusavyje skirtumai buvo nedideli – CL santykis tarp defektų neturinčio paviršiaus ir pačių defektų skyresi nuo 1 iki 1.5 karto. Maža V defektų įtaka luminescencijai matoma ir apskaičiuojant defektų aktyvumo lygį  $S$ , vyrausį tarp 0.01 ir 0.05, o IQE siekė 25 – 37 %. Pastebėjome, kad

visi šie parametrai seka panašias tendencijas. Bandinyje, kuriame ties kiekviena žadinimo srove užfiksuotas didžiausias CL intensyvumo santykis tarp defektų ir juos supančios aplinkos (tarp 2 – 3 kartų), V defektai nespindulinėje rekombinacijoje veikia aktyviausiai ( $S = 0.4$ ) ir IQE mažiausias – 7 %.

Tiriant krūvininkų dinamiką dažnai diskutuojamas V defektus supantis potencialinio barjero aukštis ir jo įtaka luminescencijai. Mūsų matavimuose jis priklausė atvirkščiai nuo žadinimo srovės, mažėdamas nuo 20 iki 0.5 meV: didesnė srovė sukuria daugiau laisvųjų krūvininkų, kurie užima giliausius energijos lygmenis, taip dirbtinai sumažindami barjero aukštį. Kita vertus, gautos absoliutinės reikšmės yra mažos, nesiekiančios net kambario temperatūros terminės energijos (~26 meV), kas kelia abejonių barjero daromai įtakai krūvininkų dinamikai. Be to, nors CL intensyvumo skirtumai tarp bandinių su skirtingais  $S$  yra akivaizdūs, barjerų aukštis visuose atvejuose išliko panašus. Tai netikėtas rezultatas, nes yra plačiai manoma, kad aukšti barjerai turėtų slopinti krūvininkų patekimą į nespindulinius rekombinacijos centrus V defektų viduje ir taip sąlygoti aukštesnį bandinio našumą. Tai rodo, kad vien barjero aukštis nėra pakankamas kriterijus bandinio kokybei, CL intensyvumo ir IQE pokyčiams paaiškinti – papildomi parametrai kaip defektų aktyvumas gali jį charakterizuoti tiksliau.



1 pav. Tų pačių bandinių a) vidutinio CL intensyvumo V defektuose ir juos supančioje aplinkoje ir b) efektyvaus barjero aukščio priklausomybės nuo žadinimo srovės stiprio

*Reikšminiai žodžiai: InGaN, V defektai, defektų aktyvumas, potencialinis barjeras.*

### Literatūra

- [1] Karpov, S. Y., & Makarov, Y. N. (2002). Dislocation effect on light emission efficiency in gallium nitride. *Applied Physics Letters*, 81(25), 4721–4723.

# Laikinės skyros katodoluminescencija nitridinių junginių V defektuose

## Transient cathodoluminescence in nitride V defects

Gabija Soltanaite<sup>1</sup>, Žydrūnas Podlipskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT -10257 Vilnius  
gabija.soltanaite@ff.vu.lt

Trečios grupės nitridų junginiuose sutinkami V-tipo defektai (angl. V-defects, V-pits) formuojasi dėl šių medžiagų sluoksniuose esamų dislokacijų ir gali tapti įrankiu, norint sumažinti neigiamą dislokacijų įtaką junginio našumui (angl. trumpinys IQE). Visgi, esami V-tipo defektų tyrimai izoliuoja tik spektrinį ar laikinį domenų ir aprašo V-defektų įtaką tik dalinai bei makroskopiškai, neįvertinant krūvininkų dinamikos individualaus defekto lygmenyje.

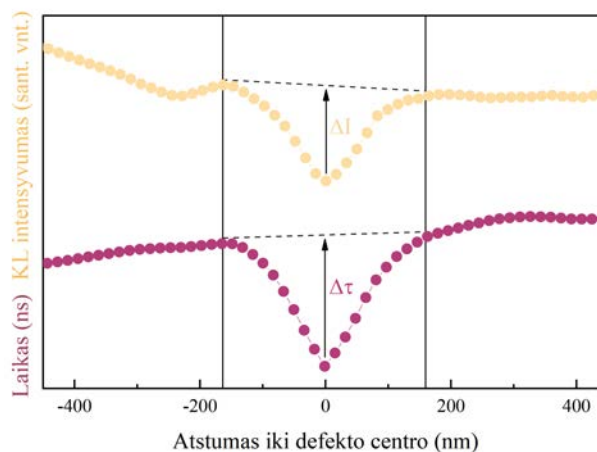
Šio tyrimo tikslas yra paaiškinti ryšį tarp V-defektų architektūros ir krūvininkų gyvavimo trukmės bei katodoluminescencijos intensyvumo defektų aplinkoje, pasitelkiant katodoluminescencijos spektroskopiją su erdvine ir laikine skyra (TRCL).

Pirmasis tyrimo eigos žingsnis – įgalinti erdvinį orientavimąsi išmatuojant antrinių elektronų (angl. trumpinys SE) ir katodoluminescencijos (angl. trumpinys CL) vaizdų porą. Vėliau matuojamos katodoluminescencijos gesimo kinetikos pavieniuose taškuose pasirinkta ašimi, kertančia defekto geometriją ir Python programiniu kodu apdorojami kiekviename taške *Streak* kameros surinkti duomenys. Aproximuojant kinetikas, nustatytos krūvininkų gyvavimo trukmės susiejamos su taškų erdvinėmis koordinatėmis ir katodoluminescencijos intensyvumu. Iš SE-CL vaizdų nustatomas defektų dydis, pagal šį parametą defektai grupuojami į artimiausių matmenų grupes.

Visi prieš tai minėti žingsniai leidžia vaizdinti krūvininkų gyvavimo trukmės ( $\tau$ ) ir katodoluminescencijos intensyvumo ( $I$ ) priklausomybes (profilus) nuo atstumo iki defekto centro (1 pav.). Apskaičiuojami profilių gyliai  $\Delta\tau$  ir  $\Delta I$  pagal grupės vidutinį defekto skersmenį  $d$  (gylį apibūdinant santykiu tarp  $\tau$  vertės periferijoje vidurkio taškuose  $\pm 2d$  nuo defekto centro) ir vertės geometriniam defekto centre.

Ši matavimų ir analizės seka buvo atlikta tiriant skirtingos struktūros ir našumo InGa<sub>N</sub> darinius, pasižyminčius varijuojančio dydžio V-tipo defektais. Matavimai atlikti skirtingo sužadinimo sąlygomis. Pastebima, jog didesnio skersmens defektai linkę prasčiau „ekranuoti“ savo centre esančias dislokacijas. Tai patvirtina didesni profilių gyliai  $\Delta\tau$  ir  $\Delta I$ , vaizduojantys krūvininkų gyvavimo trukmės ir intensyvumo variacijas tarp defekto periferijos, šlaito ir centro. Daugiau krūvininkų, pasiekiančių dislokacijas ir dalyvaujančių nespindulinėje rekombinacijoje didesnio skersmens defektuose galima tikėtis dėl mažesnio potencialinio barjero, krūvininkams jaučiamo defekto šoninėse sienose. Auginimo metu formuojantis didesnio skersmens V-defektui, kvantinių duobių struktūra

defekto šlaituose formuojasi tolygiau, jų storis tampa pastovesnis. Didelio skersmens defekto šlaitai turi didesnę plotą, lyginant su mažo skersmens defektais, todėl juose pastovesnis patenkančių medžiagų, ypač In srautas. Taigi, mažiau krūvininkų lokalizuojama šoninėse sienose esančiose kvantinėse duobėse, daugiau jų pasiekia defekto centre esančią dislokaciją ir rekombinuoja nespinduliniu būdu.



1 pav. Tipinis vieno dydžio defektų grupės pasirinktame InGa<sub>N</sub> kvantinių duobių darinyje krūvininkų gesimo trukmės ir katodoluminescencijos intensyvumo profilis

*Reikšminiai žodžiai:* InGa<sub>N</sub>, V-defektai, katodoluminescencija, rekombinacija, dislokacijos.

### Literatūra

- [1] M. K. Kim *et al.*, Sci. Rep. **7**, 42221 (2017).
- [2] M. H. Sheen *et al.*, J. Electron. Mater. **44**, 4134 (2015).

# X-defektas ir $\text{BiO}_i$ radiaciniai defektai p tipo silicyje: lyginamasis tyrimas dalelių jutiklių taikymams

## X-Defect and $\text{BiO}_i$ Radiation Defects in p-Type Silicon: A Comparative Study for Particle Sensor Applications

*Mykolas Strigūnas, Jevgenij Pavlov, Tomas Čeponis*

Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 3, Vilnius, Lietuva  
[mykolas.strigunas@ff.stud.vu.lt](mailto:mykolas.strigunas@ff.stud.vu.lt)

Silicis yra plačiausiai naudojamas puslaidininkis, dėl savo gerai atidirbtos ir pigios gamybos technologijos. Plačiai naudojamas saulės elektrinėse, medicinoje bei aukštos energijos fizikos eksperimentuose, tokiuose kaip LHC. Naujame HL-LHC tikimasi pasiekti 10 kartų didesnes apšvitos ir radiacijos dozes nei LHC, todėl priimtas sprendimas pakeisti technologiją nuo n tipo silicio.

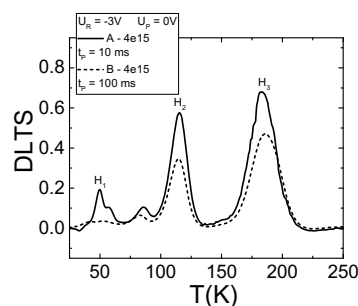
Prognozuojama, kad boro priemaiša legiruotas p tipo silicis atliks svarbų vaidmenį būsimuose CERN eksperimentuose dėl savo atsparumo radiacijai ir santykinai mažos kainos. Vis dėlto jis išlieka jautrus radiacijos pažeidimams, ypač vadinamajam „akceptorų pašalinimui“, kai radiacija sukelia regimą priemaišos deaktivaciją [2]. Šis reiškinys yra paaiškinamas  $\text{BiO}_i$  komplekso kūrimu. Šis defektas yra bistabilus ir atsiranda dėl radiacijos paveiktų Bs atomų, kurie tampa  $\text{Bi}$  atomais, pastarieji keliaudami pro kristalo gardelę gali reaguoti su  $\text{O}_i$  atomais, taip sukurdami  $\text{BiO}_i$  kompleksą [1].

Be to, ties 0.19 eV pastebėtas defektas, kol kas vadinamas X-defektu, kuris yra skylių spąstai su stipriai nuo temperatūros priklausančiu pagavimo skerspjūviu; manoma, kad tai gali būti divakansija, tačiau šiuo metu tvirtai to priskirti negalima [3].

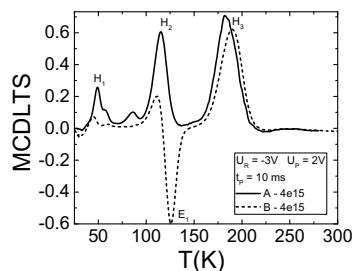
Tokie defektai turi tiesioginę įtaką krūvininkų gyvavimo laikui ir detektorių našumui, todėl jų tyrimas yra būtinas tobulinant ateities dalelių jutiklius.

Šiame darbe tiriamos dvi skirtingomis dozėmis ( $2 \times 10^{15}$  ir  $4 \times 10^{15}$ ) apšvitintų p tipo silicio bandinių poras ir atliekame jų palyginamąją analizę. Eksperimentams naudojame DLTS (Deep level transient spectroscopy), BELIV (Barrier evaluation by linearly increasing voltage) ir PIS (Photoionization spectroscopy) metodus, leidžiančius nustatyti defektų energetinius lygius, jų dinamiką bei sąveiką su krūvininkais.

Įvairių metodų derinimas (DLTS, BELIV, PIS) suteikia išsamesnį vaizdą apie defektų prigimtį – DLTS tiksliai identifikuoja energijos lygius, BELIV – diodo sando būseną, o PIS – optines defektų savybes.



1 pav. DLTS spektras A ir B bandiniams – šiame spektre matome pagrindinių krūvininkų gaudykles, kur  $\text{H}_2$  yra X-defektas



2 pav. MCDLTS spektras A ir B bandiniams – čia galime matyti šalutinių krūvininkų gaudykles, kur  $\text{E}_1$  yra  $\text{BiO}_i$ .

Šiame darbe bus palyginti ir apibendrinti skirtingomis metodikomis tirti bandiniai, bus analizuojami skirtumai tarp jų, kodėl viename matome  $\text{BiO}_i$  piką - kitame ne, bus įvertinti BELIV metodo (impulsinis barjerinės talpos matavimas, pritaikant tiesiškai didėjančią įtampą) rezultatai.

Galutiniai rezultatai bus pristatyti konferencijoje.

**Reikšminiai žodžiai:** p tipo silicis; boro legiravimas; radiacijos defektai; akceptorų pašalinimas;  $\text{BiO}_i$  kompleksas; DLTS; BELIV; PIS

### Literatūra

- [1] C. Besleaga, A. Kuncser, A. Nitescu, G. Kramberger, M. Moll, and I. Pintilie, *Bistability of the  $\text{BiO}_i$  complex and its implications on evaluating the “acceptor removal” process in p-type silicon*, Nucl Instrum Methods Phys Res A 1017, 165809 (2021).
- [2] M. Moll, *Acceptor removal - Displacement damage effects involving the shallow acceptor doping of p-type silicon devices*, Proceedings of Science 373, (2019).
- [3] A. Himmerlich et al., *Defects and acceptor removal in 60Co  $\gamma$ -irradiated p-type silicon*, Nucl Instrum Methods Phys Res A 1081, 170886 (2026).

# Naujų medžiagų tyrimas perovskitiniuose saulės elementuose taikant kinetinio fotolaidumo metodą

## Investigation of new materials in perovskite solar cells using the kinetic photoconductivity method

Dovilė Vasiliauskaitė<sup>1</sup>, dr. Ernestas Kasparavičius<sup>1</sup>, prof. habil. dr. Vidmantas Gulbinas<sup>1</sup>, dr. Lauryna M. Svirskaitė<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup> Kauno technologijos universitetas, Cheminės technologijos fakultetas, Radvilėnų pl. 19, A-302, LT-50254 Kaunas

[dovile.vasiliauskaite@ff.stud.vu.lt](mailto:dovile.vasiliauskaite@ff.stud.vu.lt)

Šiuolaikiniame pasaulyje vis didėja poreikis elektros energiją išgauti naudojant atsinaujinančius energijos šaltinius, tokius kaip saulės šviesa, vėjas, vandens ir geoterminė energija. Šis augantis susidomėjimas ekologiškais energijos šaltiniais skatina spartų įvairių technologijų vystymą, ypač fotovoltinių įrenginių sferoje.

Pastarąjį dešimtmetį fotovoltinių technologijų srityje didelio mokslinio susidomėjimo sulaukė perovskitiniai saulės elementai. Nuo 2009 m. iki 2024 m. saulės celių, naudojančių perovskitą kaip fotoaktyvų puslaidininkį, galios konversijos koeficientas, žymimas PCE, padidėjo nuo vos 3,8 % iki 26,1 % [1,2]. Šis spartus perovskitinių saulės elementų efektyvumo augimas ir technologijos patrauklumas yra paaiškinamas palankiomis medžiagos fizikinėmis savybėmis (didelis krūvininkų judris, difuzijos ilgis), paprasta gamybos metodika, modifikuojamu draustinių energijų tarpu ir saulės elemento struktūros inovacijomis. Taip pat yra itin svarbus fundamentalių fizikinių reiškinių, tokių kaip rekombinacija, gardelės ir sluoksnių defektai, krūvių generacija, transportas ir jų tarpusavio sąveikos supratimas.



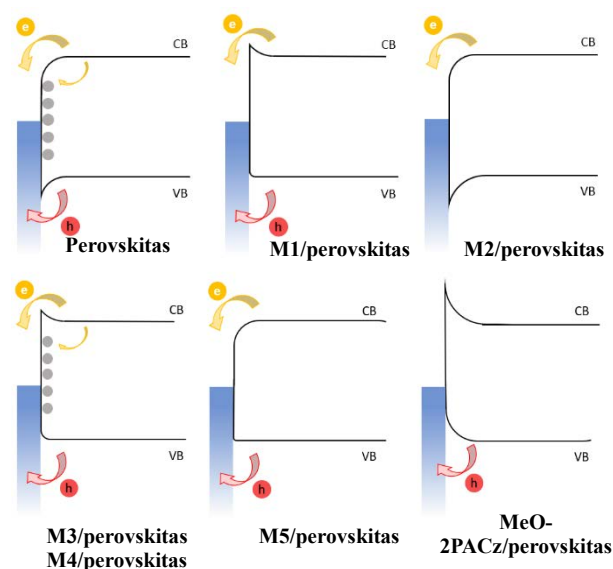
1 pav. Bandinio struktūros schema (kairėje) ir paruošto bandinio nuotrauka (dešinėje).

Šiame darbe yra nagrinėjama skirtingų susintetintų organinių cheminių junginių, atliekančių elektronų transporto funkciją, daroma įtaka perovskitinių saulės celių krūvininkų dinamikai taikant kinetinio fotolaidumo metodą.

Tyrimo metu bandiniai buvo gaminami sukamojo liejimo metodu, paruošiami (žr. 1 pav.) ir patalpinami į pritaikytą laikiklį. Saulės elementai buvo žadinami lazeriu, o matavimai atliekami skirtingomis apšvietimo ir spinduliuotės intensyvumo sąlygomis. Taip pat buvo atlikti saulės elementų charakteringųjų parametrų matavimai.

Remiantis eksperimentiškai gautais rezultatais buvo išnagrinėta darbe tiriamų cheminių junginių daroma įtaka

perovskitinių saulės elementų fotolaidumui ir sukurta apytikslė energijos lygmenų schema.



2 pav. Energijos lygmenų tarpusavio išsidėstymo schema.

Atlikus charakteringųjų dydžių matavimus buvo įvertinta tiriamų medžiagų daroma įtaka saulės elementų PCE vertei.

*Reikšminiai žodžiai: perovskitas, elektronus transportuojantis sluoksnis, kinetinis fotolaidumas.*

### Literatūra

- [1] S. Bhattarai, A. Mhamdi, I. Hossain, et. al, A detailed review of perovskite solar cells: Introduction, working principle, modelling, fabrication techniques, future challenges, Micro and Nanostructures, 172, 2773-0123, 2022.
- [2] Jiarong Wang, Leyu Bi, Qiang Fu, Alex K.-Y. Jen, Methods for Passivating Defects of Perovskite for Inverted Perovskite Solar Cells and Modules, Advanced energy materials, 14 (35), 2401414, 2024.

# Hibridinių kompozitų su anglies ir metalo nanodalelių užpildais žemo dažnio triukšmas

## Low Frequency Noise of Hybrid Composites with Carbon and Metal Nanofillers

Frydrichas Mireckas<sup>1</sup>, Sandra Pralgauskaitė<sup>1</sup>, Jan Macutkevič<sup>1</sup>, Jonas Matukas<sup>1</sup>, Darya Meisak<sup>1</sup>

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

[frydrichas.mireckas@ff.vu.lt](mailto:frydrichas.mireckas@ff.vu.lt)

Hibridiniai anglies nanodalelių kompozitai yra perspektyvios medžiagos taikymams nanoelektronikos srityje [1, 2]. Dėl sąveikos tarp skirtingų užpildų kylantys sinergijos efektai gali būti pravartūs formuojant norimų savybių kompozitus naudojant mažesnes užpildų koncentracijas, tačiau tokių kompozitų savybės yra sunkiai nuspėjamos ir reikalauja nuodugnių tyrimų, norint identifikuoti optimalias užpildų koncentracijas [3].

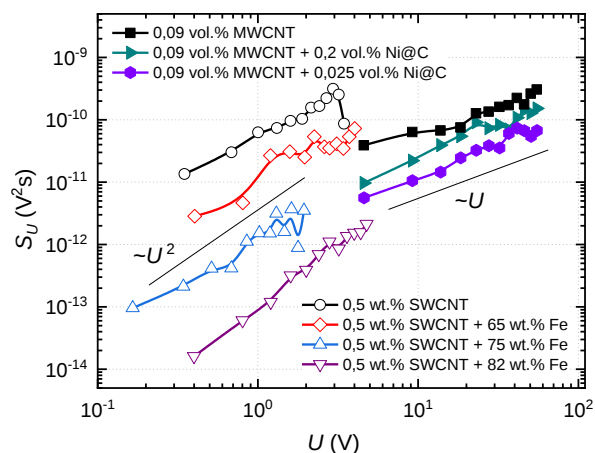
Žemo dažnio triukšmo matavimai yra efektyvus bei nedestruktyvus metodas tirti elektrinio laidžio charakteristikas ir krūvininkų pernašos reiškinius kompozitinėse medžiagose. Medžiagos, turinčios daugiau struktūrinių defektų, pasižymi didesniu triukšmo intensyvumu, todėl žemo dažnio triukšmo lygis leidžia įvertinti medžiagos kokybę [4].

Šiame darbe pateikiame hibridinių kompozitų su anglies nanovamzdeliais ir skirtingomis metalų nanodalelėmis žemo dažnio triukšmo tyrimo rezultatus. Tyrimo tikslas yra nustatyti triukšmo šaltinius ir vyraujančius krūvio pernašos mechanizmus tiriamosiose kompozitinėse medžiagose.

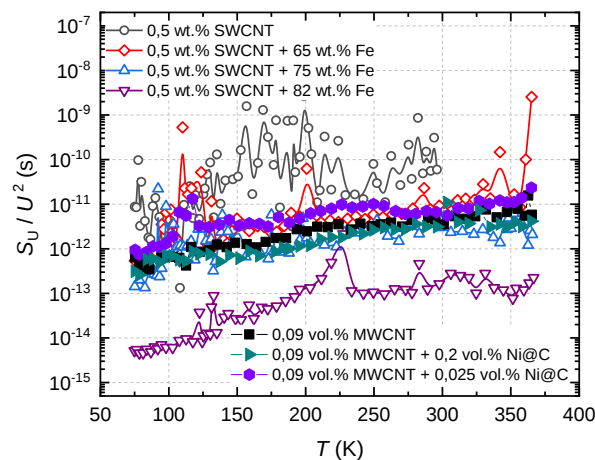
Tyrimė nagrinėtos dviejų tipų kompozitinės medžiagos: epoksidinės dervos matricos kompozitai su daugiasienių anglies nanovamzdelių (MWCNT) ir anglimi dengto nikelio (Ni@C) užpildais, bei polidimetilsiloksano (PDMS) matricos kompozitai su vienasienių anglies nanovamzdelių (SWCNT) ir geležies nanodalelių užpildais. Ištirtos skirtingos užpildų koncentracijos medžiagos. Kompozitų savitosios varžos ir žemo dažnio (10 Hz – 20 kHz) triukšmo charakteristikų tyrimai atlikti temperatūros intervale nuo 75 K iki 365 K.

Tirtų kompozitinių medžiagų įtampos fliktuacijų spektrai sudaryti iš  $1/f$  tipo komponentų. Kompozitų su SWCNT įtampos fliktuacijų spektrinis tankis yra proporcingas įtampos kvadratu (1 pav.). Tuo remiantis teigtina, kad triukšmo šaltinis šiuose kompozituose yra varžos fliktuacijos. Kompozitų su MWCNT įtampos fliktuacijų spektrinis tankis yra proporcingas įtampai, kas indikuoja žymesnį tuneliavimo reiškinių indėlį į šių kompozitų laidumą.

PDMS matricos SWCNT kompozitai yra mažiau termiškai stabilūs nei epoksido matricos MWCNT kompozitai: kylant temperatūrai, stebimi atsitiktiniai triukšmo lygio pokyčiai (2 pav.). Kompozitai, turintys mažiau užpildo, yra labiau jautrūs temperatūros pokyčiams, kadangi juose vidutinis atstumas tarp laidžių užpildo dalelių yra didesnis ir, atitinkamai, didesnė tikimybė, kad, atstumui didėjant dėl šiluminės plėtros, bus nutrauktas perkoliacinis tinklas.



1 pav. Įtampos fliktuacijų spektrinio tankio priklausomybė nuo įtampos kambario temperatūroje 86 Hz dažniui.



2 pav. Normuoto įtampos fliktuacijų spektrinio tankio priklausomybė nuo temperatūros 86 Hz dažniui ( $U = 9,2$  V).

*Reikšminiai žodžiai:* anglies nanovamzdeliai, polimeriniai kompozitai, žemo dažnio triukšmas.

### Literatūra

- [1] V. Choudhary, B.P. Singh, and R.B. Mathur, *Syntheses and Applications of Carbon Nanotubes and Their Composites* (2013).
- [2] C. Barone, G. Landi, C. Mauro, S. Pagano, and H.C. Neitzert, *Diam. Relat. Mater.* **65** (2016).
- [3] U. Szeluga, B. Kumanek, and B. Trzebiecka, *Compos. - A: Appl. Sci. Manuf.* **73** (2015).
- [4] S. Pralgauskaitė, J. Matukas, M. Tretjak, J. Macutkevič, J. Banys, A. Selskis, A. Cataldo, F. Micciulla, S. Bellucci, V. Fierro, and A. Celzard, *J. Appl. Phys.* **121** (2017).

# Anizotropinių aukso nanodalelių masyvų konfigūracijos parinkimas SERS padėklams skirtiems nanoplastikų aptikimui

## Theoretical engineering of anisotropic gold nanoparticle arrays for SERS-based nanoplastic detection

H. SARIGUL<sup>1</sup>, T. TAMULEVIČIUS<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, Kaunas University of Technology, Studentų St. 50, Kaunas, LT-51368, Lithuania

<sup>2</sup>Institute of Materials Science, Kaunas University of Technology, K. Baršausko St. 59, LT-51423, Kaunas, Lithuania  
hasan.sarigul@ktu.lt

Plastic waste, especially microplastics and nanoplastics, has a severe negative impact on environmental sustainability and various ecosystems. The initial plastic wastes quickly deteriorate to nanoplastics (NPs) sizes ( $<100$  nm) in the environment after being affected by UV-Vis irradiation, high temperature, and other natural environmental interactions. Then the pollutants spread even more rapidly[1]. NPs are challenging to detect due to their small size. Surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) is widely used for analyte detection at trace levels and has the potential to become one of the standard analytical methods for the analysis of NPs.

In this study, optimization of anisotropic gold nanoparticle arrays, *i.e.*, (i) a bowtie and (ii) a nanotriangle (comb-like bowtie), was performed using the Finite-difference time-domain (FDTD) method, and their suitability for NPs was investigated in detail, including hot spot temperature analysis. The spectral sensitivity was tailored to  $\sim 785$  nm, which is commonly used in experimental studies as an excitation wavelength. Triangle bow-tie and Au notriangle arrays with a corner radius of 15 nm and side length of 200 nm were designed and investigated for different thicknesses and periods. The maximum temperature increase that the hot-spots can reach under the light irradiation used for Raman measurements was determined to be  $\Delta T \sim 50.85^\circ\text{C}$ , which should not damage the NPs structures. Furthermore, the SERS enhancement factor was determined to be as high as  $1.9 \times 10^7$  for a 150 nm gold thickness and a 60 nm nanogap.

These bow-tie geometric parameters were later used to form Au nanotriangles, where an even higher SERS EF of  $3.71 \times 10^6$  was obtained. The nanogap locations of the hotspots were determined and compared. Overall, the numerical simulation results indicate that anisotropic gold structures can be considered as promising SERS substrates as a platform for reliable trace-level detection of NPs.

### Acknowledgments

This work was supported by the Research Council of Lithuania (RCL) (Project no.: S-PD-24-115).

*Keywords: Nanoplastics (NPs), Surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS), Finite-difference time-domain (FDTD), Anisotropic gold nanostructures, Hotspot analysis.*

### Literature

[1] N.K Mogha, D. Shin, TrAC Trends in Analytical Chemistry. 158:116885 (2023).

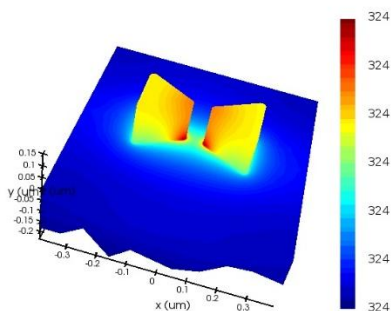


Figure 1. Heat analysis of the gold bow-tie array on a silicon substrate; the color scale bar represents temperature in Kelvin (K).

## **Stendinė sesija 3**

Funkcinės medžiagos ir dariniai,  
medžiagų technologijos

# Tunelinių reiškinių magnetinėse nanostruktūrose valdymas magnetiniu lauku

## Tunning of tunnelling effects in magnetic nanostructures by magnetic field

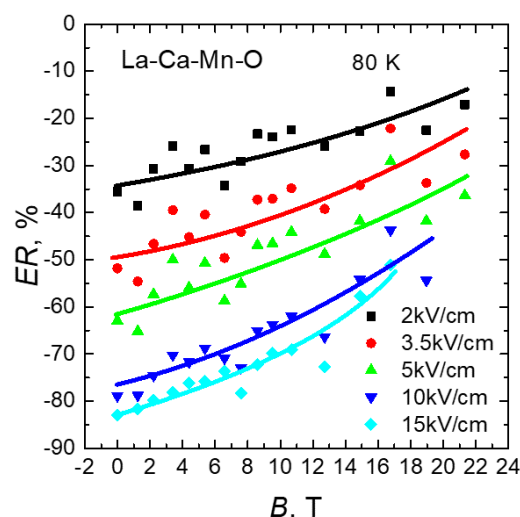
Darius Antonovič, Vilius Vertelis, Skirmantas Keršulis, Nerija Žurauskienė  
VMTI Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257, Vilnius  
[darius.antonovic@ftmc.lt](mailto:darius.antonovic@ftmc.lt)

Tuneliavimo reiškinių valdymas magnetinėse nanostruktūrose yra itin svarbus tiek fundamentiniams tyrimams, tiek pažangių magnetoelektrinių įrenginių, magnetinių jutiklių ir didelio greičio perjungimo komponentų kūrimui [1]. P olikristaliniai manganitai, tokie kaip  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ , pasižymi sudėtinga sukinio, krūvio ir gardelės sąveika, dėl kurios atsiranda tokie reiškiniai kaip neigiama kolosali magnetovarža (CMR) ir neigiama elektrovarža (ER). Šie efektai stipriai priklauso nuo mikrostruktūros, ypač nuo tarpkristalinių ribų, kurios veikia kaip natūralūs tuneliavimo barjerai. Norint optimizuoti nanostruktūrų savybes, būtina suprasti ir valdyti krūvio pernašą per tarpkristalines ribas, veikiant sinchronizuotais elektriniais ir magnetiniais laukais.

Šiame darbe t iriamos netiesinės plonųjų nanostruktūrizuotų manganitų sluoksnių krūvio pernašos savybės, juos veikiant sinchronizuotais nanosekundžių trukmės elektrinio lauko impulsais ir milisekundiniais magnetinio lauko impulsais (iki 20 T). Toks metodas leidžia sumažinti Džaulinio šilimo poveikį ir tirti tuneliavimo procesus esant kvazistacionaraus magnetinio lauko sąlygoms. Voltamperinės charakteristikos rodo aiškų perėjimą nuo tiesinės prie stipriai netiesinės priklausomybės didėjant elektrinio lauko stipriui. Analizė, paremta Glazmano–Matvejevo modeliu [2], atskleidė, kad, esant stipriems elektriniams laukams, dominuoja neelastinis tuneliavimas per kelias lokalizuotas būsenas tarpkristalinėje srityje. Be to, nustatyta, kad voltamperinės charakteristikos netiesiškumas ir elektrovaržos dydis  $ER$ , apibūrinamas (1) lygtimi, yra itin jautrūs magnetinio srauto tankiui (1 pav.) bei temperatūrai, kas rodo stiprią sąveiką tarp sukinų orientacijos ir elektroninės pernašos.

$$ER = \frac{R(E) - R(0)}{R(0)} \cdot 100\% \quad (1)$$

Tuneliavimo efektų valdymo magnetiniu lauku galimybė suteikia naujų įžvalgų apie fundamentinius krūvio pernašos mechanizmus koreliuotuose oksiduose. Gauti rezultatai atveria kelią kurti magnetinio lauko valdomas tunelines įngtis ir projektuoti sparčius magnetoelektrinius prietaisus, galinčius suveikti per subnanosekundes. Potencialios taikymo sritys apima srovės ribotuvus, magnetinio lauko jutiklius ir išliekamąją atmintį, kur tiksli tuneliavimo charakteristikų kontrolė yra kritškai svarbi prietaiso patikimumui.



1 pav.  $\text{La}_{0.83}\text{Ca}_{0.17}\text{MnO}_3$  elektrovaržos priklausomybė nuo magnetinio lauko feromagnetinėje fazėje.

*Reikšminiai žodžiai:* magnetovarža, elektrovarža, manganitai, nanosekundžių trukmės elektrinis laukas, impulsinis magnetinis laukas.

### Literatūra

- [1] Zheng, C et. al, *Magnetoresistive sensor development roadmap (non-recording applications)*, IEEE Transactions on Magnetics **55**, 0800130 (2019).
- [2] L. I. Glazman and K. A. Matveev, *Inelastic tunneling across thin amorphous films*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **94**, 332-343 (1988) [Sov. Phys. JETP **67**, 1276-1282 (1988)].

## Metalinų priemaišų (Ni, Nb, Co, Cr) įtaka feroelektrinėms $\text{Pb}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ savybėms

### Influence of metallic dopants (Ni, Nb, Co, Cr) on the ferroelectric properties of $\text{Pb}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$

Benas Beklešovas<sup>1</sup>, Vytautas Stankus<sup>1</sup>, Aleksandras Iljinas<sup>1</sup>, Ugnė Balčiūnaitė<sup>1</sup>, Jurgita Čyviienė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Fizikos katedra, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas

Multiferioikai – tai medžiagos, kurioms būdingos bent dvi pirminės feroinės savybės (magnetizmas, feroelektrinis ar feroelastinis reiškiniai) ir egzistuoja toje pačioje fazėje ar tuo pačiu metu. Viena iš unikalių multiferioikų savybių yra magnetoelektrinis reiškinys, kai magnetinės medžiagos savybės valdomos išoriniu elektriniu lauku ir atvirkščiai. Tai leidžia vystyti naujų tipų atmintis (feroelektrinę laisvosios kreipties atmintį (FRAM), magnetovaržinę operatyviąją (MRAM) atmintį) bei kitą aukštųjų technologijų elektroniką. Vis dėlto multiferioikai – gamtoje retai sutinkamos medžiagos, net jei medžiaga ir pasižymi multiferioinėmis savybėmis tai būna žemesnėse nei kambario temperatūrose [1]. Viena iš medžiagų, kuri demonstruoja magnetoelektrinį reiškinį yra švino feritas ( $\text{Pb}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ , PFO) [2]. Visgi praktiniam pritaikymui būtina spręsti problemas, tokias kaip aukšta nuotėkio srovė ar mažas magnetoelektrinis koeficientas. Vienas efektyviausių sprendimų – PFO savybių modifikavimas legiruojant pereinamųjų metalų jonais.

Šiame darbe buvo suformuotos PFO dangos, legiruotos pereinamaisiais metalais (chromu, kobaltu, niobiu bei nikeliu, keičiant legiruojančio elemento kiekį) esant skirtingoms sintezės temperatūroms (500–600 °C) reaktyviojo magnetroninio nusodinimo metodu.

PFO plonasluoksnės dangos buvo legiruotos nikeliu (3–10 % masės), taip sąlygojant PFO gardelės iškraipymus, kurios turėjo įtakos feroelektrinėms savybėms, ypač esant 5 % Ni koncentracijai bei 600 °C sintezės temperatūrai. Gautas didžiausias liktinis poliarizuotumas  $P_r \approx 66,7 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ . Tuo pačiu padidėjo kristalitų dydis, susiformavo tankesnė morfologija, tačiau išliko išsūkis dėl švino ir nikelio oksidų fazių priemaišų.

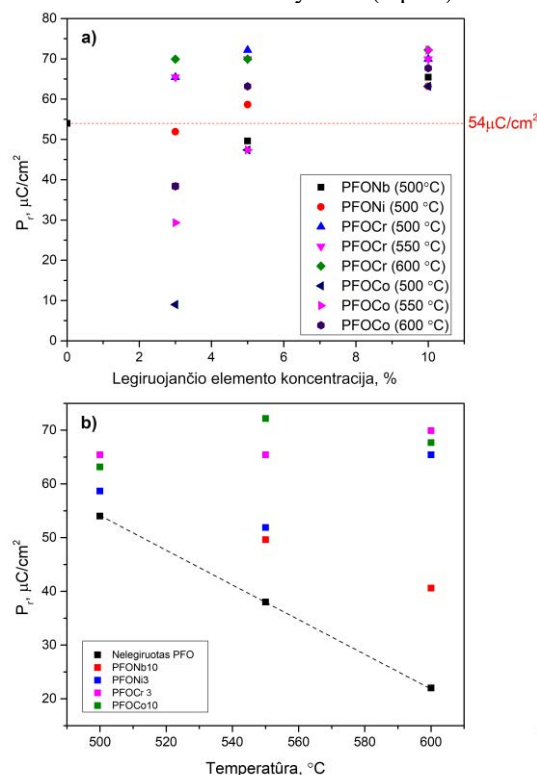
Legiruojant PFO dangas kobaltu (3–10 % masės), taip pat buvo pastebimas žymus feroelektrinių savybių pagerėjimą. Nustatyta, kad optimali sintezės temperatūra yra 550 °C, o esant 5 % Co koncentracijai  $P_r$  pasiekė 72  $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ , kartu padidėjo ir koercinis laukas (105 kV/cm). Kaip ir nikeliu legiruotose dangose, nepavyko išvengti antrinių kobalto oksidų fazių formavimosi.

Chromu legiruotose PFO dangose taip pat išmatuotas feroelektrinių savybių pagerėjimas, didinant chromo koncentraciją (iki 5%) liktinis poliarizuotumas pasiekia 72,2  $\mu\text{C}/\text{cm}^2$  esant 500 °C sintezės temperatūrai. Be to, pastebėtas struktūros fazių persiskirstymas, atsirandant švino ir chromo oksidų antrinėms fazėms.

PFO dangose legiruotose niobiu pastebimas PFO fazės smailių intensyvumo pokytis, tačiau nepavyko išvengti nesustabdo antrinių fazių susiformavimo. Feroelektriniai matavimai parodė teigiamą koreliaciją

tarp Nb kiekio ir liekamosios poliarizacijos –  $P_r$  padidėjo nuo 38  $\mu\text{C}/\text{cm}^2$  (mažiausios Nb koncentracijos dangoje) iki 65  $\mu\text{C}/\text{cm}^2$  (didžiausios Nb koncentracijos dangoje) esant 500 °C sintezės temperatūrai.

Apibendrinant, visi keturi pereinamieji metalai – Ni, Co, Nb ir Cr – pagerino  $\text{Pb}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$  feroelektrines savybes. Reguluojant priemaišų koncentraciją ir sintezės temperatūrą galima nustatyti optimalias sąlygas gauti geriausiomis feroelektrinėms savybėms (1 pav.).



1 pav. a) legiruotų PFO dangų liktinio poliarizuotumo priklausomybės nuo legiruojamųjų elementų koncentracijų palyginimas su nelegiuotu PFO; b) legiruotų PFO dangų liktinio poliarizuotumo priklausomybės nuo temperatūros palyginimas su nelegiuotu PFO

*Reikšminiai žodžiai: multiferioikai, švino feritas, reaktyvusis magnetroninis nusodinimas.*

#### Literatūra

- [1] K. F. Wang, J. M. Liu ir Z. F. Ren *Multiferroicity: the coupling between magnetic and polarization orders*. Adv. Phys., **58**(4), 321-448 (2009).
- [2] M. Wang ir G. Tan *Multiferroic properties of  $\text{Pb}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$  ceramics*. Mater. Res. Bull., **46**(3), 438-441 (2011).

# Krūvininkų pernašos dinamika 2D ir 3D perovskituose

## Charge Carrier Transport in 2D ir 3D Perovskites

Paula Baltaševičiūtė<sup>1,3</sup>, Vidmantas Jašinskas<sup>1</sup>, Vidas Pakštas<sup>2</sup>, Vidmantas Gulbinas<sup>1</sup>, Marius Franckevičius<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekulinių darinių fizikos skyrius, Saulėtekio al. 3, Vilnius

<sup>2</sup> Fizinių ir technologijos mokslų centras, Medžiagų struktūrinės analizės skyrius, Saulėtekio al. 3, Vilnius

<sup>3</sup> Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, Vilnius

[paula.baltaseviciute@ftmc.lt](mailto:paula.baltaseviciute@ftmc.lt)

Per pastaruosius penkiolika metų perovskitai tapo populiarūs dėl savo patrauklių optoelektrinių savybių ir jų galimo pritaikymo saulės elementų, šviesos diodų bei fotodetektorių gamyboje. Šios medžiagos yra unikaliaios tuo, kad keičiant jų cheminę sudėtį galima koreguoti jų savybes ir taip padaryti tinkamesnes skirtingiems taikymams [1-2]. Taip pat perovskitai gali formuotis įvairiomis struktūrinėmis formomis, įskaitant 3D, 2D ir kvazi-2D struktūras. Kiekviena jų pasižymi savita krūvio pernašos dinamika, kuri yra esminė prietaisų veikimui. Tarp dažniausiai stebimų procesų perovskituose ir kitose optoelektroninėse medžiagose galima išskirti krūvininkų migraciją ir sužadintos energijos migraciją (angl. *charge carrier migration and excitation energy migration*) [3]. Suprasti, kuris iš šių procesų dominuoja medžiagoje yra svarbu tiek fundamentaliam medžiagos supratimui, tiek prietaisų projektavimui bei optimizavimui [2].

Šiame tyrime buvo nagrinėjama, kaip keičiasi krūvininkų pernaša keičiant perovskito konfigūraciją nuo pilnai 3D iki kvazi-2D ir 2D. Keičiant mažų ir didelių organinių katijonų santykį ( $\text{PEA}^+$  ir  $\text{FA}^+$ ) perovskito gardelėje, buvo susintetinti perovskitai su skirtingu katijonų santykiu. Siekiant nustatyti dominuojantį krūvininkų pernašos mechanizmą, buvo atlikti fotoluminescencijos matavimai skirtingose temperatūrose bei žadinimo-zondavimo spektroskopijos tyrimai. Grynuose 2D perovskituose (žema Ruddlesden–Popper fazė  $n$ ) net ir aukštose temperatūrose susiformuoja stabilūs eksitonai. Papildomų smailių ar spektrinių pokyčių nebuvimas rodo, kad sužadinti eksitonai rekombinuoja lokaliai, nes žemesnės energijos sritys 2D perovskituose nesusiformuoja. Kvazi-2D perovskituose sudarytuose iš skirtingą sluoksnių skaičių ( $n$ ) turinčių fazių mišinio, emisijoje dominuoja domenai su mažiausiu draustinių energijos juostų tarpu (didžiausio  $n$ ), kurie stebimi kaip labiausiai į raudoną spektro pusę pasislinkusi FL juosta. Aušinimas slopina eksitonų nukreipimo procesą (angl. *funneling process*), todėl eksitonai / krūvininkai „įstringa“ didesnio draustinio juostos tarpo srityse ir ten rekombinuoja radiaciniu būdu, užuot migravę į žemesnės energijos sritis. Tai pasireiškia kaip atskiros FL smailės, atitinkančios fazes su skirtingu  $n = 1, 2, 3$  ir t.t. Lyginant 2D, kvazi-2D ir 3D atvejus stebimas pernašos elgsenos tęstinumas: nuo stipriai surištų eksitonų, kurie lieka lokalizuoti (2D), iki hibridinių sistemų, kuriose krūvininkai pernešami į žemesnės energijos sritis, kur jiems rekombinuoti yra palankiau (kvazi-2D), iki 3D laisvo krūvininkų judėjimo gardelėje, kur eksitonams susiformuoti maža tikimybė.

Apibendrinant galima teigti, kad krūvininkų pernašos mechanizmas yra dominuojantis kvazi-2D ir 3D perovskituose, o 2D perovskituose stebima lokali eksitonų rekombinacija. Priešingai nei 3D ar 2D perovskituose, kvazi-2D struktūros efektyviai nukreipia krūvininkus ir leidžia pasiekti didesnius spindulinės rekombinacijos efektyvumus, kas yra labai svarbu šviesos diodų ir kitų optoelektroninių prietaisų taikymuose.

*Reikšminiai žodžiai: perovskitai, eksitonai, fotoluminescencija, krūvininkų migracija.*

### Literatūra

- [1] A. Fakharuddin, M. K. Gangishetty, M. Abdi-Jalebi, S.-H. Chin, A. R. bin Mohd Yusoff, D. N. Congreve, W. Tress, F. Deschler, M. Vasilopoulou, and H. J. Bolink, *Nat. Electron.* **5**, 203 (2022).
- [2] G. Grancini ir M. K. Nazeeruddin, *Nat. Rev. Mater.* **4**, 4 (2019).
- [3] A. Fakharuddin, M. Franckevičius, A. Devižis, A. Gelžinis, J. Chmeliov, P. Heremans, V. Gulbinas, *Adv. Funct. Mater.* **31**, 2010076 (2021).

### Padėka

Tyrimai finansuoti Lietuvos mokslo tarybos projekto (paraškos registracijos Nr. P-MIP-24-77) lėšomis.

# Didelės tripletinių eksitonų energijos medžiagos su dibenzofurano ir dihidrobenzodoksino grupėmis mėlyniems TADF organiniams šviestukams

## High-Triplet-Energy Hosts employing Dibenzofuran and Dihydrobenzodioxin for Blue TADF Organic Light-Emitting Diodes

Domantas Berenis<sup>1</sup>, Kristupas Bagdonas<sup>1</sup>, Goda Grybauskaitė<sup>1</sup>, Dovydas Banevičius<sup>1</sup>, Gediminas Kreiza<sup>1</sup>, Eigirdas Skuodis<sup>1</sup>, Edvinas Orentas<sup>2</sup>, Karolis Kazlauskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius  
[domantas.berenis@ff.stud.vu.lt](mailto:domantas.berenis@ff.stud.vu.lt)

Organic light-emitting diodes (OLEDs) are leading display technology owing to their light weight, flexibility, simple fabrication, high contrast ratio and energy efficiency. Among them, thermally activated delayed fluorescence (TADF) OLEDs have attracted particular interest because they enable the harvesting of both singlet and triplet excitons through purely organic emitters, thereby approaching unity internal quantum efficiency [1]. However, developing stable and efficient blue OLEDs presents challenges due to high-energy exciton transitions, leading to increased degradation pathways. Thus, extending the operational stability of blue TADF OLEDs remains a major challenge and is critical for their integration into commercial applications.

Efficient and stable blue TADF devices require host materials with high triplet energies and well-balanced charge transport. Dihydrobenzodioxin- and dibenzofuran-based molecular scaffolds are promising candidates, as they combine wide energy gaps, high triplet energies, high bond dissociation energies, and rigid backbones that allow for extensive chemical modification [2–4].

In this study, we report the design of novel host materials incorporating dibenzofuran and dihydrobenzodioxin motifs (Fig. 1), and evaluate their application in blue TADF OLEDs. Comprehensive photophysical and electrochemical characterization, along with device performance studies, reveal how structural variations in these host frameworks influence energy-level alignment, charge balance, and device stability. Our findings highlight design principles for developing next-generation host materials aimed at improving both efficiency and operational lifetime in blue TADF OLEDs.

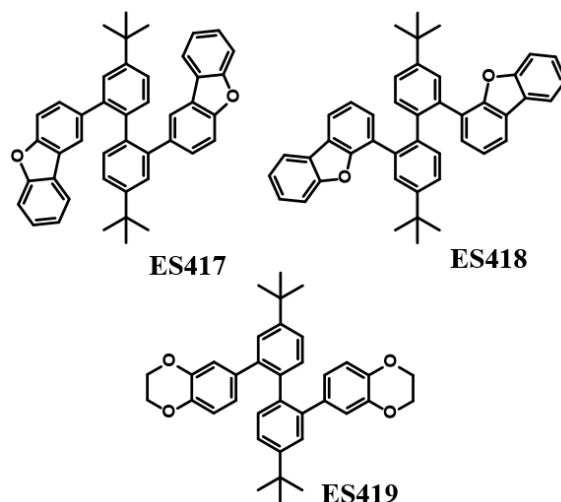


Fig. 1. Chemical structures of the studied hosts.

**Keywords:** OLED, electroluminescence, TADF, host, dibenzofuran, dihydrobenzodioxin

### References

- [1] J.M. Dos Santos, et al. Chem. Rev. 124, 13736 (2024).
- [2] P.A. Vecchi, A.B. Padmaperuma, H. Qiao, L.S. Sapochak, and P.E. Burrows, Org. Lett. 8, 4211 (2006).
- [3] A. Bucinskas, O. Bezikonny, D. Gudeika, D. Volyniuk, and J.V. Grazulevicius, Dyes Pigm. 172, 107781 (2020).
- [4] J. Jayaraman, R. Ramya, V. Thanikachalam, and P. Nethaji, RSC Adv. 8, 29031 (2018).

# Singuletinio eksitono susidarymo tikimybės nustatymas tripleto-tripleto anihiliacijos metu modeliniuose fotonų konversijos junginiuose

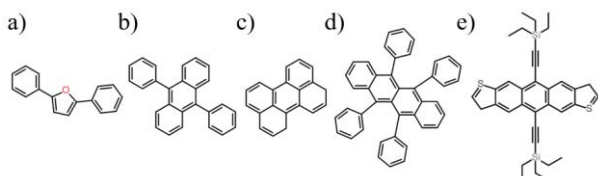
## Determination of the probability of singlet exciton formation during triplet-triplet annihilation in model photon upconversion compounds

Manvydas Dapkevičius<sup>1</sup>, Steponas Raišys<sup>1</sup>, Justas Lekavičius<sup>1</sup>, Karolis Kazlauskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius  
manvydas.dapkevicius@ff.vu.lt

Tripletinių eksitonų anihiliacija (TTA) yra procesas, kurio metu du mažesnės energijos tripletiniai eksitonai yra panaudojami vieno didesnės energijos singuletinio eksitono generacijai. TTA būdu galima realizuoti fotonų konversiją ir ją pritaikyti saulės celių efektyvumui gerinti, gilių audinių fototerapijai, 3D spausdinimui ar net kovai su klimato kaita [1-3]. Nors šios technologijos potencialas didžiulis, tačiau sukurti sistemą, kuri vykdo našią fotonų konversiją, yra sunku. Sistemą tipiškai sudaro dvi molekulės: ilgabangę šviesą sugerianti (sensibilizatorius) ir trumpabangę šviesą spinduliuojanti (anhiliatorius). Šių molekulių energiniai lygmenys turi būti suderinti taip, kad būtų užtikrinta efektyvi energijos pernaša.

Nepaisant vis didėjančio susidomėjimo ir intensyviai vykdomų tyrimų TTA fotonų konversijos srityje, skirtingų grupių tyrimuose, kuriuose naudojamos tos pačios medžiagos, dažnai pastebimi fotofizikinių parametrų neatitikimai. Pastarieji dažnai atsiranda dėl matavimų ir skaičiavimo metodų skirtumų. Tai trukdo tiesiogiai palyginti konversijos medžiagų efektyvumą ir stabdo fotonų konversijos technologijų pažangą. Dėl šios priežasties šiame tyrime buvo nuspręsta sistemingai ištirti dažniausiai naudojamas ir literatūroje aprašomas TTA molekules ir nustatyti jų parametrus. Visi eksperimentai buvo atlikti vienoje laboratorijoje, naudojant tą pačią eksperimentinę įrangą ir vienodus skaičiavimo metodus, siekiant užtikrinti duomenų palyginamumą bei rezultatų patikimumą. Tyrime naudotos anihiliatorių molekulės pavaizduotos 1 paveiksle.



1 pav. Anihiliatorių molekulės: a) 2,5-difenilfuranas (PPF), b) 9,10-difenilantracenas (DPA), c) Perilenas, d) Rubrenas, e) 5,11-bis(trietilsilietinil)antradiitiofeneas (TES-ADT).

Pagal šių anihiliatorių tripleto energijas buvo parinkti sensibilizatoriai: PPF parinktas BNCzPTZ, DPA – PtOEP, perilenui – PdTpBp, rubrenui ir TES-ADT – PdPc. Visi atitinkamų koncentracijų anihiliatoriaus/sensibilizatoriaus tirpalai buvo paruošti naudojant THF ar tolueno tirpiklius.

1 lentelė. Modelinių anihiliatorių fotofizikiniai parametrai.

| Anihil.          | Sensibil.           | $\phi_{FL}$ | $\phi_{UC}$ | $f$   |
|------------------|---------------------|-------------|-------------|-------|
| PPF, 10 mM       | BNCzPTZ, 10 $\mu$ M | 68%         | 7.1%        | 36.7% |
| DPA, 10 mM       | PtOEP, 10 $\mu$ M   | 100%        | 26%         | 52.0% |
| Perilenas, 0,1mM | PdTpBp, 10 $\mu$ M  | 50%         | 4.1%        | 17.9% |
| Rubrenas, 18 mM  | PdPc, 15 $\mu$ M    | 90%         | 5.7%        | 15.6% |
| TES-ADT, 5 mM    | PdPc, 15 $\mu$ M    | 81%         | 9.8%        | 33.0% |

Naudojant integruojančią sferą buvo nustatyti anihiliatorių fluorescencijos ( $\phi_{FL}$ ) bei fotonų konversijos kvantiniai našumai ( $\phi_{UC}$ ). Taip pat išmatuota fotonų konversijos gyvavimo trukmė bei apskaičiuotas tripletinių eksitonų pernašos efektyvumas ( $\phi_{TET}$ ). Nustačius fotonų konversijos slenkstį ( $I_{th}$ ) buvo įvertinta, kokia tripletinių eksitonų dalis dalyvauja TTA procese ( $\phi_{TTA}$ ). Pagal šią formulę:

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

buvo apskaičiuota kiekvienos sistemos statistinio faktoriaus tikimybė  $f$ , nusakanti tikimybę, kai du tripletiniai eksitonai susijungs į vieną singuletinį eksitoną. Eksperimentų rezultatai pateikiami 1 lentelėje. Pastebėta reikšminga  $f$  verčių variacija lyginant su literatūros duomenimis: DPA ir TES-ADT statistinio faktoriaus  $f$  vertės skiriasi iki 2 kartų, perilene ir rubrene iki 5 kartų. Pagrindinė šios variacijos priežastis – fluorescencijos ir konversijos našumo nesutapimas, dažniausiai atsirandantis dėl naudojamo skirtingo našumo nustatymo metodo.

*Reikšminiai žodžiai: fotonų konversija, statistinis faktorius.*

### Literatūra

- [1] K.J. Ramírez-Escárcega, K.J. Amaya-Galván, J.C. García-Prieto, F.J. Silerio-Vázquez and J.B. Proal-Nájera, J. Environ. Chem. Eng., 115594 (2025)
- [2] S.N. Sanders, T.H. Schloemer, M.K. Gangishetty, D. Anderson, M. Seitz, A.O. Gallegos and R.C. Stokes, Nature, 604, 474 (2022)
- [3] M. Klimezak, J. Chaud, A. Brion, F. Bolze, B. Frisch, B. Heurtault, A. Kichler and A. Specht, Adv. Healthcare Mater., 13, 2400354 (2024)

# Mišrios YSZ ir GDC keramikos impedanso spektroskopijos analizė

## Impedance spectroscopy analysis of mixed YSZ and GDC ceramics

Saulius Daugėla<sup>1</sup>, Shabir Ahmad Shah<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Vilnius University, Faculty of Physics, Saulėtekio ave. 3, LT-10222 Vilnius, Lithuania

[saulius.daugela@ff.vu.lt](mailto:saulius.daugela@ff.vu.lt)

This thesis presents an examination of the impedance spectroscopy of solid-state ionic materials yttria-stabilized zirconia (YSZ), gadolinium-doped ceria (GDC), and their composite mixtures. These materials are highly relevant for advanced energy applications, such as solid oxide fuel cells (SOFCs), owing to their good ionic conductivity and thermal stability.

Impedance spectroscopy was employed to assess the electrical characteristics of each material across a broad spectrum of frequencies and temperatures. The technique demonstrated the influence of the material's internal structure, grain boundaries, and compositional variations on ionic transport. The Nyquist plots derived from each sample exhibited typical characteristics, including semicircles that represent contributions from both grain (bulk) and grain boundaries. As the temperature rose, the diameter of the high-frequency semicircle diminished, thereby affirming that oxygen ion conductivity in YSZ is thermally activated.

Pure YSZ showed higher resistance and activation energy. Consequently, its ionic conductivity was lower than that of GDC. The conductivity of pure GDC was about  $7 \cdot 10^{-4}$  S/m at 500 K while the conductivity of pure YSZ was  $9 \cdot 10^{-6}$  S/m at the same temperature as demonstrated in Fig. 1.

GDC showed better conductivity and lower energy activation in the same temperature region. These results reflect the impact of its fluorite-type crystal structure and the role of gadolinium doping in enhancing oxygen vacancy mobility. The results confirmed the typical behavior of each material [1, 2].

The composite ceramics, made by combining YSZ and GDC, displayed more complex impedance behavior. The composite showed lower conductivity than pure YSZ, and much lower than pure GDC, suggesting that the interface between phases introduces additional resistive effects.

Surprisingly, the samples with higher YSZ percentage showed slightly better ionic conductivity than those with higher GDC concentration in mixed compositions. It seems that in mixed YSZ/GDC ceramics conduction pathways become very disturbed, and the increasing amount of GDC enhances that disturbance. Also, the effect of different grain size (GDC 0.28  $\mu\text{m}$  and YSZ 3.79  $\mu\text{m}$ ) between YSZ and GDC could play significant role in determining the favorable conductivity pathways.

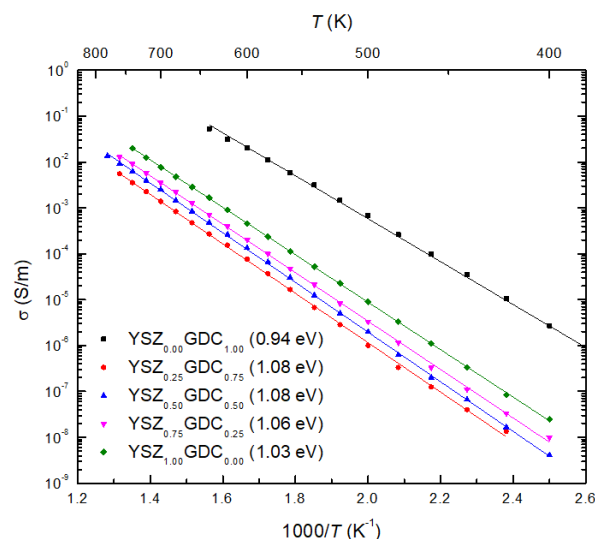


Fig. 1. The total ionic conductivity values of pure GDC, YSZ and their mixed compositions

**Keywords:** ceramics, SOFC, ionic conductivity, impedance spectroscopy.

### References

- [1] E. Ivers-Tiffe, A. Weber, D. Herbrist, *Materials and Technologies for SOFC-components*, Journal of the European Ceramic Society **21**, 1805-1811 (2001).
- [2] H. Inaba, H. Tagawa, *Ceria-based solid electrolytes*, Solid State Ionics **83**, 1-16 (1996).

# Dibenzofurano pagrindu paremtų matricos medžiagų pritaikymas mėlyniems trečios kartos šiluma aktyvuojamos uždelstosios fluorescencijos (TADF) organiniams šviestukams

## Application of dibenzofuran-based host materials for blue 3<sup>rd</sup> generation thermally activated delayed fluorescence (TADF) organic light emitting diodes

Goda Grybauskaitė<sup>1</sup>, Kristupas Bagdonas<sup>1</sup>, Domantas Berenis<sup>1</sup>, Gediminas Kreiza<sup>1</sup>, Edvinas Orentas<sup>2</sup>, Eigirdas Skuodis<sup>3</sup>, Karolis Kazlauskas<sup>1</sup>, Dovydas Banevičius<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, Vilnius, Lietuva

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Organinės chemijos katedra, Naugarduko g. 24, Vilnius, Lietuva

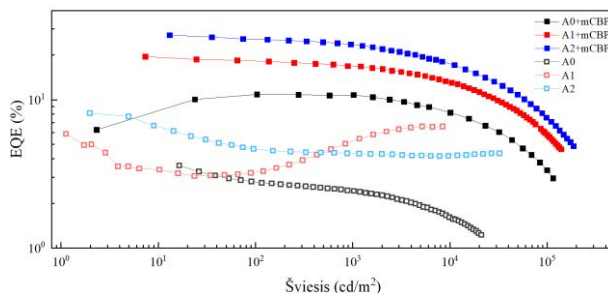
<sup>3</sup>Kauno technologijos universitetas, Cheminės technologijos fakultetas, Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Radvilėnų pl. 19, Kaunas, Lietuva  
[goda.grybauskaite@ff.vu.lt](mailto:goda.grybauskaite@ff.vu.lt)

Pastarąjį dešimtmetį aktyviai vykdomi tyrimai su organiniais šviestukais, naudojančiais šiluma aktyvuojamos uždelstosios fluorescencijos (TADF) spinduolius, kurių pagalba yra gaunamas 100% vidinis kvantinis našumas [1]. Pramonėje naudojami žali ir raudoni organiniai šviestukai yra itin našūs ir stabilūs, tačiau mėlyni šviestukai vis dar turi neišspręstų stabilumo problemų [2]. Vienas iš galimų būdų pagerinti mėlynų šviestukų stabilumą yra sintetinti ir šviestukų struktūroje panaudoti naujas matricos medžiagas. Spinduolio molekulės yra įterpiamos į matricos medžiagą taip užkertant kelią koncentraciniam gesinimui ir pagerinant krūvininkų pernašą. Sintetintamų matricos medžiagų tripleto energija privalo būti aukštesnė nei spinduolio, kad būtų išvengta atgalinės energijos pernašos iš spinduolio į matricą [3-4].

Šiuo tyrimu buvo siekiama įvertinti trijų naujų matricos medžiagų – A0, A1 ir A2 – paremtų dibenzofurano fragmentais tinkamumą našiems ir stabiliems mėlyniems TADF organiniams šviestukams gaminti. Matricos medžiagų tripleto energijos vertės nustatytos naudojantis sugerties ir liuminescencijos matavimais. Optimali naudoto spinduolio DMeCzIPN [5] koncentracija gauta iš fotoluminescencijos kvantinės išeigos (PLQY) matavimų. Šviestukai gaminti vakuuminio užgarinimo būdu bei elektriškai ir optiškai charakterizuoti, siekiant įvertinti jų našumą ir stabilumą.

Nustatyta, kad matricos medžiagų A0 ir A1 tripleto energijos sutampa su spinduolio tripleto energija, o medžiagos A2 tripleto energija - aukštesnė. Visose matricos medžiagose nustatyta vienoda optimali spinduolio koncentracija – 20%. Pagamintų prietaisų našumas neviršijo  $EQE = 8.1\%$ , o  $LT_{50}$  (ties pradiniu  $\sim 1000 \text{ cd/m}^2$  šviesiu) vertė, kuri parodo laiką, per kurį šviesis sumažėja perpus siekė tik 2.5 val. Viena iš priežasčių tokiems rezultatams paaiškinti galėtų būti prietaisuose pastebėta organinių sluoksnių kristalizacija. Taip pat buvo pastebėta, kad šviestukų spektras prie žemų įtampų buvo itin platus ir žalias, o papildomais tyrimais parodyta, kad to priežastis yra eksipleksas, susiformuojantis tarp spinduolio DMeCzIPN ir gretimo sluoksnio medžiagos Tris-PCz molekulių. Siekiant užkirsti kelią eksiplekso formavimuisi buvo įterptas 10 nm storio papildomas medžiagos mCBP sluoksnis.

Naujųjų šviestukų su mCBP tarp sluoksniu išorinis kvantinis našumas siekė net  $EQE = 27\%$ , o taip pat buvo pagerintas ir jų stabilumas.  $LT_{50}$  vertė ties pradiniu  $\sim 1000 \text{ cd/m}^2$  šviesiu siekė 11 val. Papildomo mCBP medžiagos tarp sluoksnio įterpimas ne tik pagerino šviestukų charakteristikas bet taip pat, kaip buvo pastebėta, leido suvaldyti organinių sluoksnių kristalizacijos problemą.



1 pav. Šviestukų su A0, A1 ir A2 matricos medžiagomis išorinio kvantinio našumo kreivės nuo šviesio.

**Reikšminiai žodžiai:** organiniai šviestukai, našumas, stabilumas, TADF.

### Literatūra

- [1] H. Uoyama, K. Goushi, K. Shizu, H. Nomura, ir C. Adachi, „Highly efficient organic light-emitting diodes from delayed fluorescence“, *Nature*, t. 492, nr. 7428, p. 234–238, gruodž. 2012, doi: 10.1038/nature11687.
- [2] D. Banevičius, G. Puidokas, G. Kreiza, S. Juršėnas, E. Orentas, ir K. Kazlauskas, „Prolonging blue TADF-OLED lifetime through ytterbium doping of electron transport layer“, *J. Ind. Eng. Chem.*, t. 128, p. 515–520, gruodž. 2023, doi: 10.1016/j.jiec.2023.08.016.
- [3] E. Tankelevičiūtė, I. D. W. Samuel, ir E. Zysman-Colman, „The Blue Problem: OLED Stability and Degradation Mechanisms“, *J. Phys. Chem. Lett.*, t. 15, nr. 4, p. 1034–1047, vas. 2024, doi: 10.1021/acs.jpcllett.3c03317.
- [4] M. Y. Wong ir E. Zysman-Colman, „Purely Organic Thermally Activated Delayed Fluorescence Materials for Organic Light-Emitting Diodes“, *Adv. Mater.*, t. 29, nr. 22, p. 1605444, 2017, doi: 10.1002/adma.201605444.
- [5] G. Kreiza ir kt., „High efficiency and extremely low roll-off solution- and vacuum-processed OLEDs based on isophthalonitrile blue TADF emitter“, *Chem. Eng. J.*, t. 412, p. 128574, geg. 2021, doi: 10.1016/j.cej.2021.128574.

## PVB/ZnO-T/NaPT nanokompozitinių dangų fizinių ir antimikrobinų savybių analizė

### Evaluation of PVB/ZnO-T/NaPT Nanocomposite Coatings: Physical and Antimicrobial Performance

Mindaugas Ilickas<sup>1</sup>, Asta Guobienė<sup>1</sup>, Simas Račkauskas<sup>1</sup>, Brigita Abakevičienė<sup>1,2</sup>

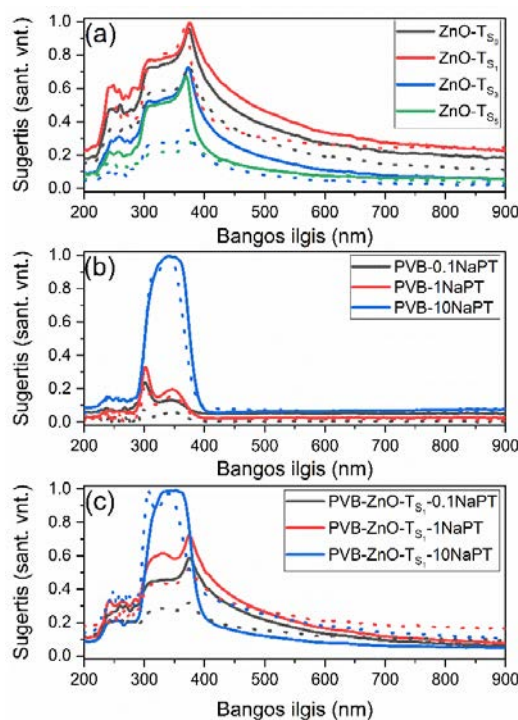
<sup>1</sup>Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas

<sup>2</sup>Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas  
[mindaugas.ilickas@ktu.edu](mailto:mindaugas.ilickas@ktu.edu)

COVID-19 pandemijos metu išryškėjo ryšys tarp gyvenimo būdo ir mikroorganizmų plitimo, todėl atsirado ilgaamžių biocidinių dangų poreikis. Antimikrobinės medžiagos, pavyzdžiui, biocidai ir antibiotikai, yra labai svarbios infekcijų kontrolei, tačiau atsparumas antimikrobinėms medžiagoms, PSO įvardytas kaip pasaulinė grėsmė, iki 2050 m. kasmet galinti sukelti 10 mln. mirčių [1]. Cinko oksidas (ZnO) ir 2-merkaptopiridino N-oksido natrio druska (NaPT) yra patvirtinti saugiam antimikrobiniam naudojimui. Tarp ZnO struktūrų unikalūs yra tetrapodai (ZnO-T), kurių keturios kojos per centrą yra sujungtos tarpusavyje [2].

Šiame tyrime sukurtos ilgaamžės PVB/ZnO-T/NaPT nanokompozitinės dangos ir įvertintos jų fizikinės bei antimikrobinės savybės. ZnO-T dydis buvo kontroliuojamas centrifuguojant (0-5000 aps/min,  $S_0$ - $S_5$ ), o NaPT koncentracija svyravo nuo 0,1 % iki 10 %. Fizikinės savybės analizuotos naudojant Rentgeno spindulių difrakciją (XRD), ultravioletinės – regimosios šviesos (UV-Vis-NIR) spektroskopiją, atominių jėgų mikroskopiją (AFM) ir vandens kontaktinio kampo (WCA) analizę.

ZnO-T miltelių XRD analizė parodė, kad didėjant centrifugavimo greičiui kristalitų dydis mažėja: nuo 42 nm, esant 0 aps/min ( $S_0$ ), iki 30 nm, esant 5000 aps/min ( $S_5$ ). UV-Vis-NIR spektroskopija patvirtino, jog PVB/ZnO-T/NaPT nanokompozitas buvo sėkmingai suformuotas (žr. 1 pav.). Dangų sugerties spektruose fiksuojami būdingieji bruožai tiek, ZnO-T, tiek NaPT medžiagoms. AFM analizė parodė, jog PVB ir PVB-NaPT dangų paviršiai yra lygūs ir panašūs vienas į kitą. Priešingai, PVB-ZnO-T ir PVB/ZnO-T/NaPT dangos pasižymi išsikišusiomis ZnO-T kojomis paviršiuje. PVB/ZnO-T/NaPT dangos paviršiaus aukštis yra beveik dvigubai didesnis nei PVB-ZnO-T dangos. WCA matavimai parodė, kad laikui bėgant visų bandinių kontaktinis kampas mažėja, o tai rodo, kad didėja paviršiaus drėkinamumas. Dangos su didesnėmis ZnO-T dalelėmis ( $S_0$  ir  $S_1$ ) pasižymi ZnO dominuojančiomis savybėmis, o dangos su mažesnėmis dalelėmis ( $S_3$  ir  $S_5$ ) pereina prie NaPT sukulto hidrofiliškumo. Įvertinus paviršiaus laisvąją energiją (SFE) paaiškėjo, kad visais atvejais, išskyrus PVB-ZnO- $T_{S_5}$ -NaPT dangas, SFE vertės buvo mažesnės iš karto po suformavimo, palyginti su vertėmis, išmatuotomis po 4 mėnesių. Be to, PVB-ZnO-T-10NaPT dangos pasižymėjo didesnėmis SFE vertėmis nei kiti bandiniai, o tai rodo, kad antimikrobinis veikimas gali būti prastesnis.



1 pav. Tirtų dangų UV-Vis spektrai: a) PVB dangos su skirtingo dydžio ZnO-T dalelėmis; b) PVB dangos su skirtinga NaPT koncentracija; c) PVB dangos su ZnO- $T_{S_1}$  dalelėmis ir skirtinga NaPT koncentracija

Šis tyrimas parodo, kaip svarbu optimizuoti dangos formavimo procesus, jog būtų pagerintas gaunamų dangų paviršių fizikinės bei antimikrobinės savybės.

*Reikšminiai žodžiai:* ZnO-T, biocidai, nanokompozitinė danga.

#### Literatūra

- [1] K.W.K. Tang, B.C. Millar, J.E. Moore, Antimicrobial Resistance (AMR), *Br J Biomed Sci* **80** (2023).
- [2] M. Ilickas, S. Rackauskas et al., ZnO tetrapod morphology influence on UV sensing properties, *Nanotechnology* **35** (2024).

# Polimerinių scintiliuojančių šviesolaidžių optinių ir mechaninių savybių tyrimas naudojant konfokalinę ir atominės jėgos mikroskopiją

## Investigation of the optical and mechanical properties of polymeric scintillating optical fibers using confocal and atomic force microscopy

Mikas Iršėnas<sup>1</sup>, Augustas Vaitkevičius<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus Universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, Vilnius  
Mikas.irsenas@ff.stud.vu.lt

Plastikiniai scintiliuojantys šviesolaidžiai yra plačiai taikomi aukštos energijos dalelių sekikliuose ir detektoriuose dėl savo trumpų scintiliacijos gesimo trukmių, aukštos energijos išeigos, lankstumo, mažo diametro ir žemos kainos [1,2]. Nuo 2021 metų jie tapo svarbia LHCb (Large Hadron Collider beauty) eksperimento dalimi, kai buvo pradėtas naudoti jais paremtas SciFi (Scintillating Fibre) dalelių sekiklis. Tai yra vienas pagrindinių LHCb komponentų, leidžiantis nustatyti pralekiančių dalelių trajektoriją ir impulsą. Tačiau dėl dar palyginti trumpo SciFi eksploatacijos laiko trūksta matavimų, kurie įvertintų aukštos energijos dalelių apšvitinimo sukeltų struktūros pakitimų poveikį šviesolaidžio erdvinėms optinėms ir mechaninėms savybėms. Siekiant prisidėti prie LHCb eksperimento šis darbas yra skirtas jame naudojamų neapšvitintų plastikinių scintiliuojančių šviesolaidžių, pagamintų Kuraray kompanijos, SCSF-78 (78MJ) ir SCSF-3HF (3HF) optinių ir mechaninių savybių charakterizavimui. Į šviesolaidžių šerdis yra įmaišyti aktyvuojantys ir išspinduliuojamą šviesos ilgį keičiantys luminoforai atsakingi už bandinių scintiliacines savybes.

Tyrimo tikslas – nustatyti, kaip skirtingi luminoforai veikia plastikinių šviesolaidžių erdvinės struktūros optines ir mechanines savybes, atitinkamai naudojant konfokalinę ir atominės jėgos mikroskopiją.

Plastikinių scintiliuojančių šviesolaidžių skerspjūvių paviršių fotoluminescencijos spektrai, intensyvumo ir vidutinio bangos ilgio pasiskirstymai buvo matuojami skenuojančio konfokalinio mikroskopo sistema WITec alpha300 S. Matavimai atlikti šviesolaidžių šerdies centre, krašte ir šviesolaidžio apvaskale, matuojant 80x80 μm<sup>2</sup> plotus sužadinant 22,5 tukstančių paviršiaus taškų. Mechaninės savybės matuotos tuo pačiu WITec alpha300 S mikroskopu kurį galima pritaikyti atominės jėgos mikroskopijai (AFM) pritaikius svirtelę su adata. Jėgos – atstumo kreivių matavimai atlikti bandinių skerspjūvių šerdies centre, krašte ir šviesolaidžio apvaskale. Visi matavimai atlikti kambario temperatūroje.

Bandinių skerspjūviai buvo paruošti poliravimo metodu naudojant šviesolaidžių poliravimo reikmenis: 10, 3 ir 1 μm rupumo padėkliukus, poliravimo staliuką, keramikinės ferules ir poliravimo diską. Atlikus bandinių poliravimą pavyko paruošti lengvai atkartojamos kokybės bandinius su matomais šerdies bei apvaskalo sluoksniais ir be didelių paviršiaus defektų.

Išmatavus fotoluminescencijos spektrus (1 pav.) buvo nustatyta, kad 78MJ šviesolaidžio pikas yra ties

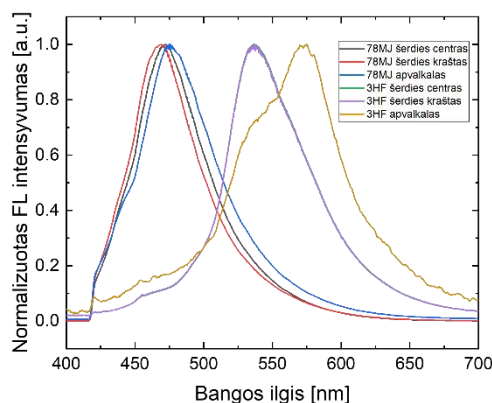
470 nm, vietoj gamintojo nurodomų 450 nm. Tai galimai įvyko dėl sužadinimo bangos ilgio apribojimų ir raudonojo krašto sužadinimo efekto. 3HF šviesolaidžio pikas atitinka gamintojo nurodytą 530 nm vertę.

Vidutinio bangos ilgio pasiskirstymų standartiniai nuokrypiai yra iki 0,5 %, kas rodo tolygų luminoforų pasiskirstymą šerdyje. Intensyvumo standartiniai nuokrypiai varijuoja nuo 11 % iki 60 %.

Jungo modulis skaičiuotas naudojant Snedono modelį, aproksimuojant jėgos – įspaudimo kreivę nuo kontaktnio taško.

1 lentelė. Gamintojo nurodyti šviesolaidžių parametrai.

| Pavadinimas | Diametras [μm] | Emisijos pikas [nm] | Gesimo trukmė [ns] |
|-------------|----------------|---------------------|--------------------|
| SCSF-78     | 250            | 450                 | 2,8                |
| SCSF-3HF    | 250            | 530                 | 7                  |



1 pav. Plastikinių scintiliuojančių šviesolaidžių fotoluminescencijos spektrai matuoti skirtingose skerspjūvių vietose.

*Reikšminiai žodžiai: scintiliatoriai, šviesolaidžiai, konfokalinė mikroskopija, atominės jėgos mikroskopija.*

### Literatūra

- [1] Bravar A., Buonaura A., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2024, 1058, 168766
- [2] Beattie T., Fischer A., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2014, 767, 245–251

# Band alignment of Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> with various electron transport layers by photoelectron spectroscopy

## Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> energijos juostų suderinamumas su įvairiais elektronų ištraukimo sluoksniais, naudojant fotoelektronų spektroskopiją

Gerarda Jocyte<sup>1</sup>, Arnas Naujokaitis<sup>1</sup>, Rokas Kondrotas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Center for physical sciences and technology, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

[gerarda.jocyte@ftmc.lt](mailto:gerarda.jocyte@ftmc.lt)

Antimony selenide (Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>) is a promising absorber material for optoelectronic devices because of its suitable band gap of approximately 1.2 eV, an absorption coefficient exceeding 10<sup>4</sup> cm<sup>-1</sup>, low toxicity, and because it is composed of low-cost, earth-abundant elements [1]. The most prominent application area of Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> is in the development of lightweight, low-cost thin film solar cells. To this day, the record power conversion efficiency of Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> solar cells (>10%) was achieved using cadmium sulphide (CdS) as an electron transport layer (ETL) [2,3]. However, Cd is a heavy cancerogenic metal which is restricted in electronic use and highly regulated in other applications. Therefore, there is a strong impetus in exploring alternative materials to use as ETL for developing high-efficiency Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> solar cells.

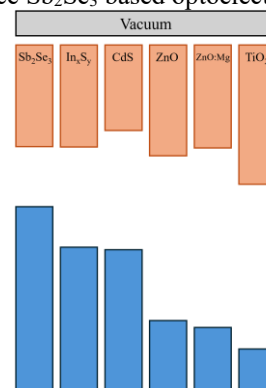
In this work, we studied five different ETL materials (including CdS) as potential candidates to form heterojunction with Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> absorber. One of the primary requirements to form a good quality heterojunction is the alignment of conduction band edges (CBM) between ETL and Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>. No barrier or small offset (< 0.3 eV) between ETL and absorber facilitates electron flow and aid in charge carrier separation in the solar cell. Otherwise, too high CBM offset (> 0.5 eV) or negative offset results in either current blockage or in high interfacial recombination [3]. Therefore, it is important to measure and estimate the VBM and CBM of ETL and absorber. To determine the energy band alignment in the heterojunction with several semiconductor materials, X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and ultraviolet photoelectron spectroscopy (UPS) were utilized. The XPS method was used to determine the surface elemental composition and ensure the absence of contaminants, while UPS was applied to examine the valence band electron spectra and to determine the semiconductor ionization energy (E<sub>i</sub>) corresponding to the valence band maximum (VBM) and using semiconductors' bandgap values obtained from optical measurements to calculate CBM. We also employed Kraut method [4] (eq. 1) to determine the VBM offset between two materials at the junction, which reflected a more real scenario of band bending when two semiconductors are connected.

$$\Delta E_v = (E_{CL}^Y - E_v^Y) - (E_{CL}^X - E_v^X) - \Delta E_{CL} \quad (1)$$

Our results showed that as expected, the CBM offset between Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> and CdS was about 0.3 eV which is optimum for forming a good quality heterojunction (Fig. 1). Among oxide-based buffer layers, TiO<sub>2</sub> showed a strong cliff-like band arrangement which would lead to a

strong interfacial recombination of photo generated charge carriers. On the other hand, ZnO and ZnMgO buffer layers had lower CBM offsets (Fig. 1) and could be good candidates to form a pn junction with Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>. Finally, the CBM of In<sub>x</sub>S<sub>y</sub> and Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> matched very well showing a good compatibility between these two materials.

Our findings clarify the band alignment of Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> with various ETLs, offering insights in finding alternative, more sustainable materials for developing high-performance Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> based optoelectronic devices.



1 pav. Band alignment of Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> with various materials calculated by Kraut method.

**Key words:** heterojunction, band alignment, photoelectron spectroscopy.

### Literature

- [1] Mavlonov, Abdurashid, et al. "A review of Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> photovoltaic absorber materials and thin-film solar cells." *Solar Energy* 201 (2020): 227-246.
- [2] Duan, Zhaoteng, et al. "Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin-film solar cells exceeding 10% power conversion efficiency enabled by injection vapor deposition technology." *Advanced Materials* 34.30 (2022): 2202969.
- [3] Tang, Rongfeng, et al. "Hydrothermal deposition of antimony selenosulfide thin films enables solar cells with 10% efficiency." *Nature Energy* 5.8 (2020): 587-595.
- [4] Chen, Ying-Chu, et al. "Fine-tuning interfacial band edge energetics at Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub> heterojunction via phase control and defect engineering for enhanced solar water splitting performance." *Journal of Alloys and Compounds* 1022 (2025): 179841.
- [5] Kraut, E. A., et al. "Semiconductor core-level to valence-band maximum binding-energy differences: Precise determination by x-ray photoelectron spectroscopy." *Physical Review B* 28.4 (1983): 1965.

# PEBA/UIO-66 kompozitų paviršinio krūvio dydžio ir poliškumo valdymas

## Controlling the magnitude and polarity of surface charge of PEBA/UIO-66 composites

Linards Lapčinskis<sup>1</sup>, Andris Šutka<sup>1</sup>, Martynas Kinka<sup>2</sup>, Fa-Kuen Shieh<sup>3</sup>, Sergejus Balčiūnas<sup>2</sup> and Robertas Grigalaitis<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Riga Technical University, P. Valdena str. 3/7, Riga LV-1048, Latvia

<sup>2</sup> Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio av. 9, LT-10222 Vilnius, Lithuania

<sup>3</sup>Department of Chemical Engineering, National Taiwan University, Taipei 10617, Taiwan  
[martynas.kinka@ff.vu.lt](mailto:martynas.kinka@ff.vu.lt)

TENG devices, introduced in 2012, represent a pioneering concept to convert surplus mechanical energy into electricity, thereby allowing the powering of autonomous microdevices. This innovation shows significant promise to mitigate the environmental impact associated with traditional energy production and battery usage. Notably, TENG devices have already been demonstrated to illuminate up to 8000 LEDs, propel autonomous gas sensor devices, fuel biomedical equipment, facilitate battery charging and etc.

For the enhanced TENG device output, it is necessary to design polymers with asymmetric charging tendencies – to gain positive or negative triboelectric surface charge. For that, the triboelectric series are used as guidance. However, the mechanical properties of polymers from the series do not always meet the desired characteristics for practical applications. For mechanical energy harvesting from movement, as an example, soft and flexible materials are needed for more effective integration in the wearables. Herein we show the way how to control the surface charge polarity of soft elastomeric PEBA polymer by adding MOF fillers UiO-66 and UiO-66-NH<sub>2</sub>.

Metal organic frameworks are a class of crystalline compounds characterized by a three-dimensional network formed by metal ions and organic ligands. MOFs have garnered attention for their versatility and applicability in diverse fields, ranging from energy storage and gas storage to catalysis and gas separation. The allure of MOF incorporation in TENG contact layers lies in their exceptional attributes, such as high surface area, porosity, and availability to chemical modifications. Mostly MOFs have been reported as fillers in composites used for contact layers, however recently individual triboelectric properties of MOFs such as ZIF-8, MOF-74, UiO-66 and UiO-66-NH<sub>2</sub> has been reported [1].

In the present work, we show that the addition of UiO-66 and UiO-66-NH<sub>2</sub> metal organic framework (MOF) particles into polyether block amide (PEBA) polymer increases the triboelectric surface charge density and allows controlling the polarity of charge [2]. The composites of PEBA polymer with 0.1 – 5 wt.% MOFs enhanced the surface charge density of pristine PEBA in the whole compositional range. The triboelectric properties can be tuned not only by the amount of MOF fillers but also by modification of UiO-66 1,4-benzenedicarboxylic acid linkers with additional –NH<sub>2</sub> groups. PEBA/UiO-66-NH<sub>2</sub> composites remain positively charged, while PEBA/UiO-66 system

undergoes the change of the triboelectric surface charging from positive to negative between 0.5 wt.% and 1 wt.%. This material shows more tendency for negative charge than Teflon.

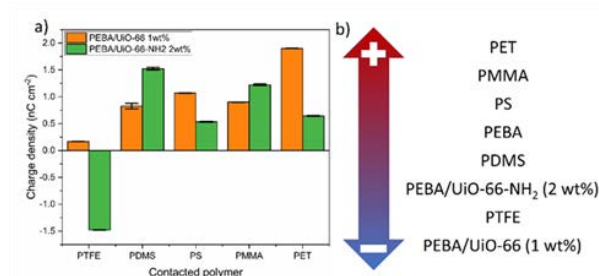


Fig. 1. Charge densities and polarities of PEBA/UiO-66 (1 wt%) and PEBA/UiO-66-NH<sub>2</sub> (2 wt%) composite films against a series of polymers.

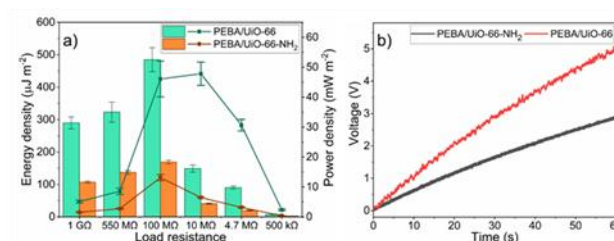


Fig. 2. (a) Energy (bars) and power (line) densities of TENG devices at various load resistances; (b) voltages across the capacitor generated by TENG devices based on PEBA/UiO-66 or PEBA/UiO-66-NH<sub>2</sub> composites in contact with ITO

**Keywords:** TENG, MOF, polymer, composite.

### Literature:

- [1] A. Šutka, F.-K. Shieh, M. Kinka, L. Lapčinskis, C.-C. Chang, P. K. Lam, K. Pudzs and O. Verners, RSC Adv., 2023, 13, 41–46.
- [2] L. Lapčinskis, A. Šutka, M. Kinka, F.-K. Shieh, S. Balčiūnas, R. Grigalaitis Mater. Adv., 2024, 5, 4242–4250.

# Lanksti daugiasluoksnė tekstilės struktūra su metapaviršiumi elektromagnetinių bangų atspindžiui mažinti

## Flexible Multilayer Textile Structure with Metasurfaces for Electromagnetic Reflection Reduction

Augustas Koklevičius<sup>1</sup>, Paulius Ragulis<sup>1</sup>, Žilvinas Kancleris<sup>1</sup>, Audronė Sankauskaitė<sup>2</sup>, Vitalija Rubežienė<sup>2</sup>

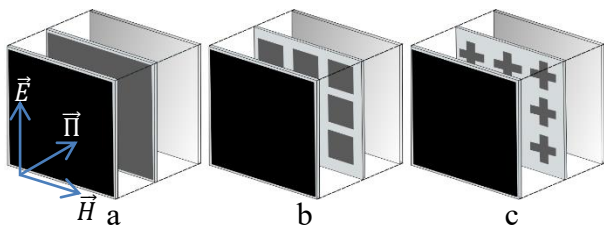
<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fizikinių technologijų skyrius, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Tekstilės technologijų skyrius, Demokratų g. 53, LT-48485 Kaunas

[augustas.koklevicius@ftmc.lt](mailto:augustas.koklevicius@ftmc.lt)

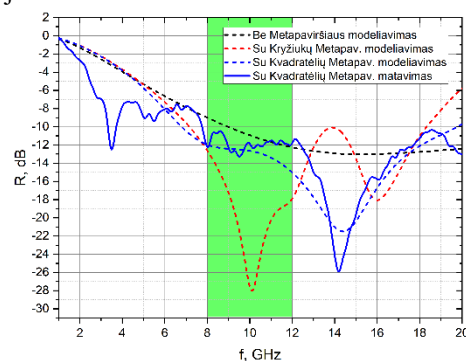
Elektromagnetinių (EM) bangų atspindžio mažinimas yra svarbus žmonių ar įrenginių apsaugai nuo didelės galios EM spinduliuotės ir mažinant radarinį sklaidos skerspjūvį (radar cross-section). Įprasti EM bangas sugeriantys ir jų atspindį mažinantys paviršiai yra nelankstūs, sunkūs bei standūs, todėl jų taikymas dėvimiems įrenginiams ir išlenktiems paviršiams yra ribotas. Pastaruoju metu metapaviršiai tapo populiarūs dėl savo universalių galimybių valdyti elektromagnetines bangas – nuo mikrobangų iki optikos, įskaitant atspindžio mažinimą, bangų frontų nukreipimą bei kitus sprendimus [1]. Kartu vis daugiau dėmesio skiriama lanksčioms metapaviršių struktūroms, integruojamoms į tekstilės pagrindus, kurios yra lengvos, plonos, komfortiškos ir gali efektyviai mažinti atspindį plačiame dažnių diapazone [2].

Šiame darbe buvo ištirti trys daugiasluoksnių struktūrų variantai, skirti sumažinti mikrobangų atspindį. Pirmasis sluoksnis – tai tekstilės pagrindas, visiškai padengtas laidžia pasta, po kuriuo paliekamas 3 mm oro tarpas. Toliau seka tekstilės sluoksnis, taip pat padengtas laidžia pasta, arba metapaviršius, sudarytas iš kvadratų ar kryžiučių geometrijų, po kuriuo taip pat yra 3 mm oro tarpas. Paskutinis sluoksnis – metalinė plokštelė, užtikrinanti visišką bangų atspindį ir supaprastinanti tikrų objektų, tokių kaip žmogaus oda ar metaliniai paviršiai, imitaciją. Pirmasis variantas (1 pav. a), kuriame visi sluoksniai buvo pilnai padengti, parodė bazinį atspindžio mažinimo lygį, tačiau rezonansiniai dažniai buvo riboti. Antrasis variantas (1 pav. b), su kvadratų metapaviršiaus sluoksniu, leido geriau valdyti rezonansus ir sustiprinti destruktivios interferencijos efektą. Trečiasis variantas naudoja skirtingų dydžių kryžiučių metapaviršių (1 pav. c), kuris turi kelis rezonansinius dažnius.



1 pav. Struktūrų variantai: visi sluoksniai pilnai padengti (a), su kvadratų metapaviršiumi (b), su kryžiučių metapaviršiumi (c).

Modeliavimas, atliktas CST Studio programinėje įrangoje, parodė, kad visi trys nagrinėti sluoksniai sumažina EM bangų atspindį, tačiau jų efektyvumas priklauso nuo metapaviršiaus geometrijos (2 pav.). Pilno dengimo struktūra sumažino atspindį tik siaurame dažnių ruože. Kvadratų metapaviršius užtikrino ryškesnį atspindžio mažinimą, nes kvadratinė geometrija leido tiksliau valdyti rezonansinius reiškinius tarp sluoksnių ir pagerino destruktivios interferencijos sąlygas. Kryžiučių metapaviršius pasirodė dar efektyvesnis – rezonansiniai minimumai buvo gilesni, sugerties dažnių diapazonas platesnis, o atspindžio mažinimas išliko stiprus visame X dažnių juostos ruože.



2 pav. Trijų skirtingų struktūrų atspindžio grafikai.

Trijų sluoksnių tekstilės struktūra su kryžiučių metapaviršiais efektyviai sumažina elektromagnetinių bangų atspindį. Kryžiučių geometrija užtikrina plačiausią ir giliausią sugerties dažnių diapazoną. Rezultatai parodė, kad tinkamai parinkta metapaviršiaus forma leidžia tiksliau valdyti rezonansus ir pasiekti stabilesnį atspindžio mažinimą lanksčiose tekstilės pagrindu sukurtose struktūrose.

**Reikšminiai žodžiai:** elektromagnetinės bangos, interferencija, rezonansas, atspindys, metapaviršius.

### Literatūra

[1] A. Ali, A. Mitra, B. Aïssa, *Metamaterials and Metasurfaces: A Review from the Perspectives of Materials, Mechanisms and Advanced Metadevices* (2022).

[2] Y. Yang, C. Song, R. Pei, J. Wang, Z. Liu, Y. Zhang, and J. Shen, *Design, characterization and fabrication of a flexible broadband metamaterial absorber based on textile* (2023).

Šis tyrimas finansuojamas iš Europos gynybos fondo (EDF) projekto „Adaptyvus kamufliažas kariui ir transporto priemonėms“ lėšų.

# OVERSHOOT PULSES IN PEROVSKITE LIGHT EMITTING DIODES. THE ROLE OF OPERATION CONDITIONS

Ignas Ledzinskas<sup>1,2</sup>, Rokas Gegevičius<sup>1</sup>, Vidmantas Gulbinas<sup>1</sup>

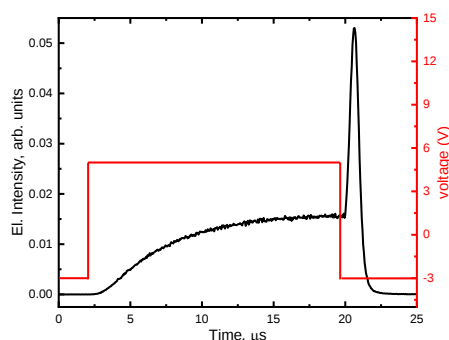
<sup>1</sup>Department of Molecular Compound Physics, Center for Physical Sciences and Technology

<sup>2</sup>Faculty of Physics, Vilnius University

[ignas.ledzinskas@ff.stud.vu.lt](mailto:ignas.ledzinskas@ff.stud.vu.lt)

Hybrid perovskite light-emitting diodes (PeLEDs) are a promising new technology for the development of next-generation light sources. They are characterized by high photoluminescence (PL) and electroluminescence (EL) efficiency, which is now above 30%. In some applications, PeLEDs are expected to operate in pulsed mode. Generation of light pulses with sufficiently high intensity requires high power electrical pumping, which poses significant problems for electrical pumping and leads to deterioration of PeLED performance, its degradation or even damage. PeLEDs operating in a non-conventional regime based on the so-called overshoot effect enable generation of short, high intensity, perfectly electrically synchronizable optical pulses by using relatively low-power electrical pumping.

Here we demonstrate overshoot pulse generation by Formamidinium lead iodide (FAPbI<sub>3</sub>) PeLEDs and analyse their formation dependencies on temperature and time-shape of varying voltage electrical pumping pulses. The overshoot pulse intensity and shape are determined not only by the voltage and duration of pump pulses, but also on the offset voltage applied between pump pulses and negative voltage pulses applied immediately after the pump pulse termination. Intensity of overshoot pulses strongly increases at temperatures below 200 K. We demonstrate that redistribution of mobile ions affecting electric field strength and its spatial distribution along the perovskite layer thickness is mainly responsible for the unusual overshoot pulse generation properties. Mathematical modelling of the electroluminescence dynamics enables to reproduce the electroluminescence dynamics and reveals two PeLED operation regimes enabling or disabling overshoot pulse generation.



**Figure 1.** Electroluminescence overshoot transient after application of rectangular voltage pulse (red).

# Nekoherentinė fotonų konversija naujuose monomeriniame ir heksamerininiame TIPS-antraceno junginiuose

## Incoherent Photon Upconversion in Novel Monomeric and Hexameric TIPS-Anthracene Derivatives

Justas Lekavičius<sup>1</sup>, Paulius Baronas<sup>1,2</sup>, Maciej Majdecki<sup>3</sup>, Przemysław Gawel<sup>3</sup>, Kasper M. Poulsen<sup>2</sup>, Karolis Kazlauskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Photonics and Nanotechnology, Vilnius University, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Department of Chemical Engineering, Universitat Politècnica de Catalunya, EEBE, Eduard Maristany 10–14, 08019 Barcelona, Spain

<sup>3</sup>Institute of Organic Chemistry, Polish Academy of Sciences, Kasprzaka 44/52, 01-224 Warsaw, Poland  
justas.lekavicius@ff.vu.lt

Photon upconversion through triplet-triplet annihilation (TTA-UC) is one of multiple methods to increase the energy of incident photons. The main advantage of the TTA-UC mechanism, compared to upconversion in lanthanoid ions or coherent nonlinear optical methods, is its operation under low power incoherent excitation [1]. This characteristic property makes the TTA-UC mechanism suitable for targeted drug delivery, optogenetics, near-infrared vision or photovoltaics [2]. Among these, applications in photovoltaics are particularly promising, as modular and efficient TTA-UC films could be integrated into solar cells to harvest sub-bandgap photons, thereby overcoming the Shockley-Queisser limit.

TTA-UC systems are typically constructed from two organic molecules: a sensitizer and an annihilator. The sensitizer is responsible for light absorption, triplet state generation via intersystem crossing (ISC), and triplet-energy transfer (TET) to the annihilator. After the energy transfer step, two annihilator triplets collide and undergo TTA, producing a higher-energy excited singlet state, which subsequently decays through fluorescence (FL). TTA-UC mechanism involves multiple steps, which make the process difficult to control. Therefore, it is still necessary to design new TTA-UC compounds, mainly focusing on effective annihilators. An ideal annihilator should possess a high spin-statistical factor ( $f$ ), representing the probability of generating an excited singlet state during TTA. In addition, the annihilator must be energetically compatible with existing sensitizers and have a high FL quantum yield ( $\phi_{FL}$ ). The latter is particularly crucial in the solid-state samples, as molecular aggregation can severely reduce the emission yield.

In this work, two novel anthracene-based annihilators (Anc-Mono and Anc-Hex) were studied and compared to a well-established TIPS-Anthracene annihilator (Fig. 1) [3]. The hexamer Anc-Hex is conceptually appealing due to its capability to harvest multiple triplet excitons within the same molecule. Both new compounds were paired with porphyrin-based sensitizers, and the resulting TTA-UC molecular systems were tested in solutions and films.

Both Anc-Mono and Anc-Hex were found to possess a suitable energy level distribution to function as annihilators and exhibited high FL quantum yields ( $\phi_{FL}$

= 95.5% and 84.0%, respectively). Despite these results, their UC quantum yields in solutions ( $\phi_{UC}^{\infty}$  = 14.4% and 3.5%, respectively) were significantly lower compared to an equivalent sample with TIPS-Anc reference ( $\phi_{UC}^{\infty}$  = 23.1%). This reduced performance was attributed to a decrease in the spin-statistical factor of Anc-Mono and Anc-Hex. Density functional theory calculations further suggest that this decrease arises from an additional TTA loss channel via higher energy triplet states ( $T_1 + T_1 \rightarrow T_2$ ), a pathway that becomes energetically favourable only in the new annihilators.

TTA-UC performance in solid-state samples was even lower, with Anc-Mono films achieving a maximum  $\phi_{UC}^{\infty}$  value of 0.27% and outperforming Anc-Hex samples. Several loss channels were identified, including excimer formation, back fluorescence resonance energy transfer from the sensitizer to the annihilator and further reduction of  $f$  in the solid-state.

This work identifies and analyses the main TTA-UC loss channels of the studied annihilators in both solution and solid-state samples, thereby providing insights for the design of more efficient annihilators.

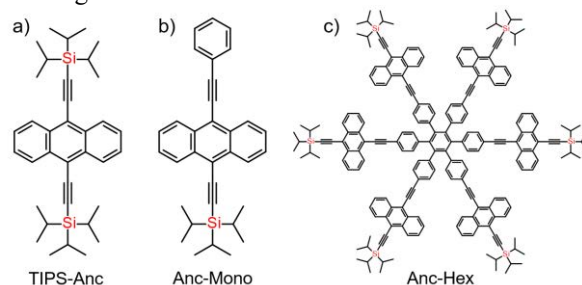


Fig. 1. Annihilators studied in this work: a) TIPS-Anc (reference), b) Anc-Mono, c) Anc-Hex.

**Keywords:** triplet-triplet annihilation (TTA), upconversion (UC), photophysics, oligomer, anthracene

### References

- [1] B. S. Richards, *et al.* Chem. Rev. 121, 9165–9195 (2021).
- [2] L. Zeng, L. Huang, J. Han, G. Han. Acc. Chem. Res. 55, 2604–2615 (2022).
- [3] P. Baronas, J. Lekavičius, M. Majdecki, J. L. Elholm, K. Kazlauskas, P. Gawel, K. M. Poulsen. ACS Cent. Sci. 11, 3, 413–421 (2025).

## Bismuto ferito plonų plėvelių, gautų reaktyviuoju magnetroniniu ko-purškimu, optinių savybių nustatymo metodų lyginamoji analizė

### Comparative Evaluation of Methods for Extracting Optical Properties of Bismuth Ferrite Thin Films Prepared by Reactive Magnetron Co-Sputtering

Andrejus Litvakas<sup>1</sup>, Aleksandras Iljinas<sup>1</sup>, Jurgita Čyvienė<sup>1</sup>, Remigijus Kaliasas<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Kauno technologijos universitetas, Fizikos katedra, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas

<sup>2</sup>Technologijos mokslų fakultetas, Panevėžio kolegija, Laisvės a. 23, LT-35200 Panevėžys

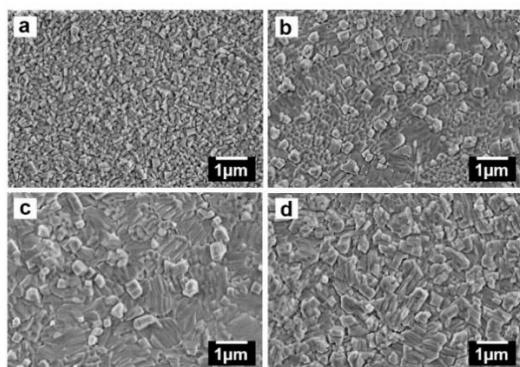
[andrejus.litvakas@ktu.edu](mailto:andrejus.litvakas@ktu.edu)

Bismuto feritas ( $\text{BiFeO}_3$ , BFO) yra vienas iš perspektyviausių daigafunkcinių oksidų, pasižyminčių feroelektrinėmis ir antiferomagnetinėmis savybėmis kambario temperatūroje. Dėl plačios optinės draustinės juostos (2,2–2,7 eV) ir didelio lūžio rodiklio ši medžiaga yra tinkama taikymams spintronikoje, FeRAM atmintyse bei fotovoltiniuose įrenginiuose. BFO plonų plėvelių savybės itin priklauso nuo sintezės sąlygų, ypač nuo padėklo temperatūros jų nusodinimo metu. Optinių charakteristikų nustatymo metodų palyginimas yra svarbus, nes pasirinktas metodas gali daryti įtaką optinių konstantų patikimumui, ypač esant silpnai interferencijai ar struktūriniam netolygumui.

Šiame darbe BFO plonos plėvelės buvo nusodintos tiesioginio srovės reaktyviuoju ko-magnetroniniu purškimu gryno deguonies aplinkoje. Mėginių padėklai (1 mm storio) buvo kaitinami iki skirtingų temperatūrų: 475, 500, 525 ir 550 °C. Purškimui naudoti 3 colių skersmens Bi ir Fe metaliniai taikiniai (99,9 % grynumo). Darbinis slėgis buvo palaikomas 1 Pa, nusodinimo trukmė – 1 valanda.

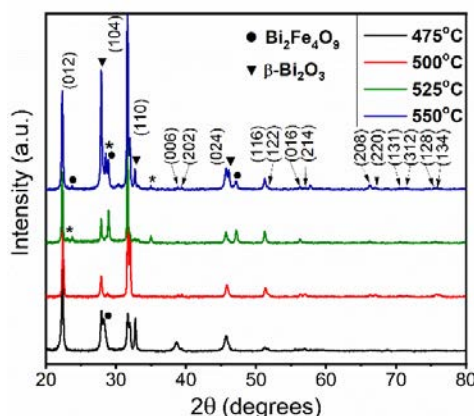
Struktūrinės savybės tirtos rentgeno spindulių difrakcija (Bruker D8, Cu  $K\alpha$ ), morfologija – skenuojančiu elektroniniu mikroskopu (Hitachi S-3400N). Optinės charakteristikos nustatytos matuojant plėvelių šviesos perdavimo spektrus (380–780 nm diapazone) ir taikant Tauc, Kramers-Kronig bei Swanepoel metodus lūžio rodikliui ir optinei draustinei juostai įvertinti.

SEM tyrimai parodė grūdelių evoliuciją: nuo ~250 nm (475 °C) iki ~380 nm (550 °C).



1 pav. SEM vaizdai BFO plonų plėvelių, nusodintų esant skirtingoms padėklo temperatūroms: (a) 475 °C, (b) 500 °C, (c) 525 °C, (d) 550 °C.

Rentgeno difrakcijos rezultatai patvirtino romboedrinę perovskito BFO fazę, tačiau prie žemesnės (475 °C) ir aukštesnės ( $\geq 525$  °C) temperatūros atsirado šalutinių fazių  $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$  ir  $\beta\text{-Bi}_2\text{O}_3$  perteklius. Didžiausia BFO fazės grynumas (76 %) gautas plėvelėje, nusodintoje 500 °C temperatūroje.



2 pav. BFO rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) modeliai. Pavaizduotos pagrindinės romboedrinės BFO fazės (pažymėtos skliaustuose) bei antrinės fazės  $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$  (apskritimai) ir  $\beta\text{-Bi}_2\text{O}_3$  (trikampiai).

Optinė analizė parodė, kad mėginių draustinės juostos plotis yra 2,32–2,36 eV. Šios vertės atitinka literatūroje nurodytas BFO reikšmes.

Lūžio rodiklio įvertinimas parodė metodų skirtumus: Kramers-Kronig skaičiavimai prognozavo monotonišką lūžio rodiklio didėjimą kylant temperatūrai, tuo tarpu Swanepoel metodas parodė nemonotonišką priklausomybę, tiksliau atitinkančią struktūrinį fazių degradacijos pobūdį aukštesnėje temperatūroje. Perdavimo matricių modeliavimas patvirtino, kad Swanepoel metodu gautos lūžio rodiklio vertės geriau atitinka eksperimentinius pralaidumo spektrus, nepaisant ryškių interferencijos maksimumų ir minimumų pralaidumo spektruose nebuvimo.

Tyrimas rodo, kad 500 °C padėklo temperatūra šiame tyrime yra optimali temperatūra BFO plėvelių auginimui: pasiekiamas aukštas kristališkumas, tanki morfologija ir minimalus antrinių fazių kiekis be papildomo atkaitinimo proceso.

*Reikšminiai žodžiai: BFO, magnetroninis purškimas, plonos plėvelės, optinės savybės, lūžio rodiklis.*

## Fosfatais klijuotų keramikų tankinimas

### Densification effect in phosphate bonded ceramics

Žygimantas Logminas<sup>1</sup>, Artyom Plyushch<sup>1</sup>, Šarūnas Svirskas<sup>1</sup>, Algirdas Selskis<sup>2</sup>, Jūras Banys<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. 9, LT-10222, Vilnius

zygimantas.logminas@ff.stud.vu.lt

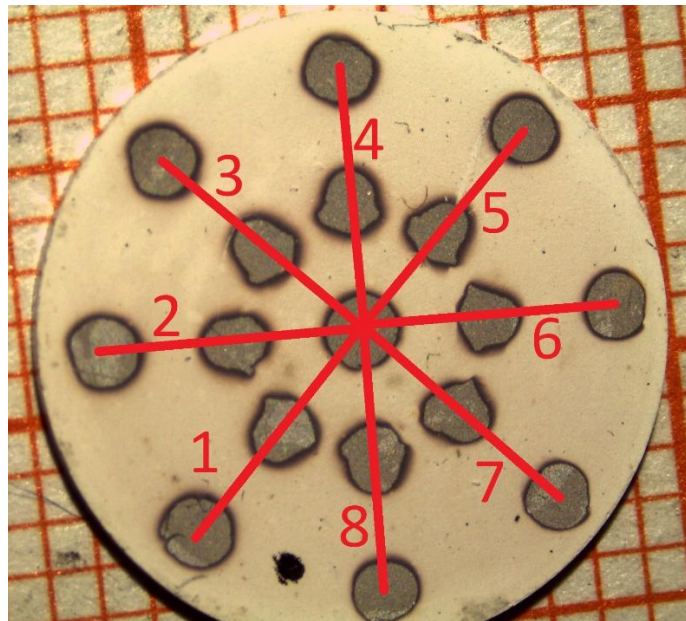
Šiais laikais keramikos vaidina itin svarbų vaidmenį kasdieniniame gyvenime, jų panaudojimas apima dielektrikus kondensatoriuose, piezoelektrinius prietaisus, atminties komponentus ir jutiklius. Fosfatais klijuotos keramikos (FKK) yra perspektyvi ir ekologiška alternatyva tradicinei keramikai, kuri dažnai gaminama sudėtingais ir energiją reikalaujančiais metodais, tokiais kaip kibirkštinis plazminis sukepinimas arba karštas spaudimas. FKK pasižymi puikiu terminiu, cheminiu ir mechaniniu stabilumu. Tačiau vienas pastebimas jų apribojimas yra mažesnis jų tankis, palyginti su įprastai gaminama keramika. Šiame pristatyme nagrinėjama birių fosfatais surištų keramikų tankinimo galimybė (1) keičiant slėgį ir (2) naudojant dvigubą grūdelių mišinį: (1-x) stambūs + x smulkūs.

Mėginiai buvo paruošti pagal šią procedūrą. Fosfatiniai klijai buvo paruoštai ištirpinant  $\text{AlPO}_4$  vandenyje, kol mišinio tankis pasiekė  $1,42 \text{ g/cm}^3$ . Komerčinis bario titanatas  $\text{BaTiO}_3$  buvo įsigytas iš „US Research Nanomaterials“ (99,9 % grynumo, grūdelių dydis 300 nm) ir „Sigma-Aldrich“ (99,9 % grynumo, grūdelių dydis  $<3 \text{ } \mu\text{m}$ , vėliau SEM nuotraukomis nustatytas kaip 700 nm). Bario titanato milteliai buvo homogenizuoti su 8,5 % skystų klijų ir vienašiu būdu presuoti į granules. Buvo paruoštos trys mėginių serijos – dvi serijos su stambiais arba smulkiais grūdeliais, presuotais esant skirtingam slėgiui, ir viena su miltelių mišiniu esant fiksuotam slėgiui. Vėliau tabletės buvo paliktos kietėti 24 val. ir pakaitintos  $300 \text{ }^\circ\text{C}$  temperatūroje 1 val., kad kietėjimo procesas paspartėtų. Tuomet viena pusė buvo visiškai padengta sidabro kontaktu garų nusodinimo būdu, o kita pusė buvo padengta koncentrinėmis kontaktų žvaigždynu.

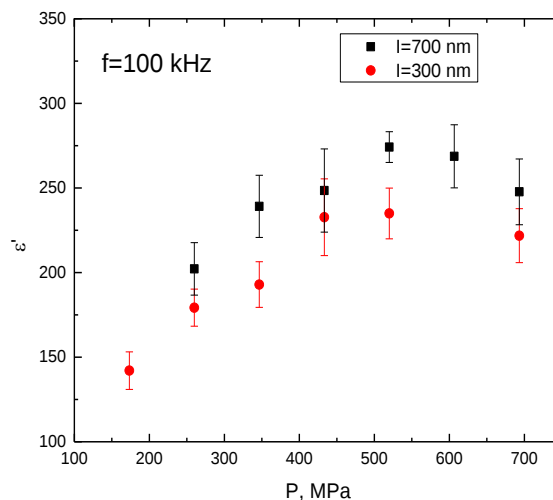
Norint panagrinėti tankinimo efektą buvo pamatuota dielektrinė skvarba 20 Hz – 1 MHz diapazone, kadangi pagal vieną iš dielektrinės skvarbos modelių – Liechteneckerio modelį – kompozito dielektrinės skvarbos logaritmas yra lygus visų jo sudedamųjų dalių skvarbos logaritmų vidurkiui (1).

$$\ln(\varepsilon_{ef}) = \sum_{i=1}^n (f_i * \ln(\varepsilon_i)) \quad (1)$$

Čia  $\varepsilon_{ef}$  yra kompozito efektyvi dielektrinė skvarba,  $f_i$  yra medžiagos tūrio dalis,  $\varepsilon_i$  medžiagos dielektrinė skvarba.



1 pav. Bandinys su koncentriniais kontaktais.



2 pav. Dielektrinės skvarbos realiosios dalies priklausomybė nuo spaudimo gamybos metu.

Reikšminiai žodžiai: fosfatai, grūdų dydis, keramikos, keramikų tankis, bario titanatas.

## Užpildų rūšies poveikis $\text{Cr}_2\text{O}_3$ kompozito dangų tribologinėms savybėms

### Effect of additives on the tribological properties of $\text{Cr}_2\text{O}_3$ composite coatings

Lukas Bastakys<sup>1</sup>, Liutauras Marcinauskas<sup>1,2</sup>, Mindaugas Aikas<sup>2</sup>, Sebastjan Matkovič<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų 50, LT-51368 Kaunas, Lietuva

<sup>2</sup>Lietuvos energetikos institutas, Plazminių technologijų laboratorija, Breslaujos 3, LT-44403 Kaunas, Lietuva

<sup>3</sup>Laboratory for Tribology and Interface Nanotechnology, Faculty of Mechanical Engineering, University of Ljubljana, Bogiščičeva 8, 1000 Ljubljana, Slovėnija.

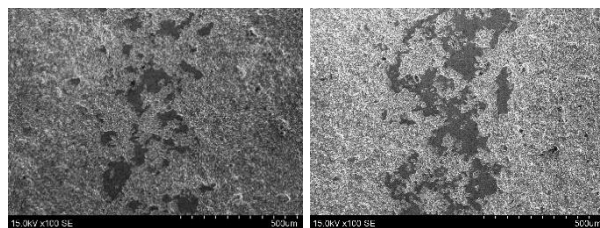
[liutauras.marcinauskas@ktu.lt](mailto:liutauras.marcinauskas@ktu.lt)

Chromo oksido ir jo kompozito dangos pasižymi dideliu kietumu, reikiamomis tribologinėmis savybėmis, atsparumu aukštai temperatūrai ir korozijai. Šios unikalios savybės leidžia šias dangas naudoti metalinių paviršių apsaugai nuo mechaninio bei cheminio poveikio [1-3]. Plazminis purškimas yra vienas iš plačiai naudojamų metodų įvairių keraminių dangų, tame tarpe ir chromo oksido sluoksnių formavimui.  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  dangų struktūrą, porėtumą, mechanines ir tribologines savybes galima valdyti keičiant plazminio purškimo parametrus (galia, naudojamų dujų srautą, miltelių įvedimo vietą ir t.t.). Chromo oksido dangų mechanines, elektrines, korozines ar tribologines savybes galima valdyti papildomai įmaišant įvairių medžiagų ( $\text{TiO}_2$ , grafito,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Y}_2\text{O}_3$ , anglies nanovamzdelių,  $\text{CeO}_2$  ir kt.), taip formuojant chromo oksido kompozitų dangas [2, 4-6]. Darbo tikslas buvo suformuoti  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-TiO}_2$  ir  $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-TiO}_2$ -grafito dangas bei įvertinti plazmos srauto temperatūros ir užpildų įtaką dangų tribologinėms savybėms.

Dangų formavimui buvo naudoti  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-TiO}_2$  ir grafito milteliai. Grafito miltelių koncentracija pradiniuose  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  bei  $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-TiO}_2$  milteliuose buvo 10 % pagal masę. Dangos formuotos ant P265GH plieno padėklų, naudojant oro ir vandenilio dujų mišinį [5]. Plazmos generatoriaus galia buvo ~38,0 kW, ~41,0 kW ir ~45 kW, kas leido valdyti plazmos srauto temperatūrą. Dangų paviršiaus morfologija buvo tirama skenuojančiu elektroniniu mikroskopu (SEM) bei šurkštumo matuokliu Mitutoyo SurfTest SJ-210. Dangų elementinė sudėtis prieš ir po tribologinių tyrimų buvo matuota Rentgeno spindulių energijos dispersijos spektrometrija (EDS). Rentgeno spindulių difrakcija (RSD) ir Ramano spektroskopija buvo vertinama  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  ir jos kompozito dangų fazinė sudėtis ir ryšių tipas. Tribologinės savybės buvo matuotos naudojant CETR-UMT-2 tribometrą, naudojant  $\text{Al}_2\text{O}_3$  rutuliuką, esant 1 N ir 3 N jėgai, o trinties trukmė buvo 120 min ir 300 min.

EDS tyrimai parodė, kad suformuotose  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ -grafito bei  $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-TiO}_2$ -grafito dangose anglies koncentracija siekė tik nuo 1 % iki 2 %, nors pradiniuose milteliuose buvo net 10 %. Didėjant plazmos srauto temperatūrai grafito koncentracija dangose sumažėjo. Didėjant plazmotrono galiai buvo formuojamos tolygesnio paviršiaus chromo oksido ir jo kompozitų dangos. Verta paminėti, kad grafito įvedimas leido nežymiai sumažinti chromo oksido kompozitų dangų šurkštumą.

Nors elementinės sudėties tyrimai ir parodė titano, silicio ir anglies egzistavimą, tačiau  $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-TiO}_2$  ir  $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-TiO}_2$ -grafito dangų rentgenogramose nenustatyta grafitui,  $\text{TiO}_2$  ar  $\text{SiO}_2$  junginiams būdingų smailių. Visose suformuotose dangose gautos smailės ties  $24,6^\circ$ ,  $33,7^\circ$ ,  $36,3^\circ$ ,  $41,6^\circ$ ,  $50,3^\circ$ ,  $55,0^\circ$ ,  $63,6^\circ$ ,  $65,3^\circ$  ir  $73,1^\circ$   $2\theta$  kampais yra priskiriamos  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  eskolaito fazės (012), (104), (110), (202), (024), (116), (214), (300) ir (1010) kristalografinėms orientacijoms. Didinant plazmos srauto temperatūrą nežymiai keitėsi tik  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  fazei priskiriamų smailių intensyvumas.



1 pav.  $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-TiO}_2$ -grafito dangos paviršiaus vaizdai naudojant 1 N (kairėje) ir 3 N (dešinėje) jėgą.

Atlikti trinties bandymai parodė, kad  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-TiO}_2$  ir  $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-TiO}_2$ -grafito dangų paviršius yra nudilęs nežymiai ir įvertinti santykinio dilimo greičio esant 1 N apkrovai nepavyko (1 pav.). Plieno trinties koeficientas buvo ~0,687, o suformuotų dangų trinties koeficientas kito nuo 0,316 iki 0,490 esant 1 N. Paviršiuje, nutrintos zonos plotis padidėja naudojant 3 N jėgą (1 pav.), o dangų trinties koeficientas buvo nuo 20 % iki 40 % mažesnis už plieno. Nustatyta, kad valdant plazmos srauto temperatūrą ir miltelių užpildo rūšį, dangų santykinį dilimo greitį galima sumažinti nuo 15 iki 40 kartų.

*Reikšminiai žodžiai: plazminis purškimas, chromo oksido dangos, tribologija, trinties koeficientas.*

#### Literatūra

- [1] V. Ratia, D. Zhang, J. Daure, P. Shipway, D. McCartney, D. Stewart, *Wear*, **426**, 1466–1473 (2019).
- [2] P. Zamani, Z. Valefi, K. Jafarzadeh, *Ceram. Int.*, **48**, 1574–1588 (2021).
- [3] J. Kiilakoski, R. Trache, S. Björklund, S. Joshi, P. Vuoristo, *J. Therm. Spray Technol.*, **28**, 1933–1944 (2019).
- [4] C. Zhang, H. Hu, L. Mao, H. Chen, H. Liao, Z. Yu, *Ceram. Int.*, **50**, 4553–4562 (2024).
- [5] L. Bastakys, L. Marcinauskas, M. Milieška, M. Kalin, R. Kėželis, *Coatings*, **13**(2), 408 (2023).
- [6] P. Bagde, S. Mehar, S. Sapate, A. Rathod, *Mater. Today Proc.* **56**, 2365–2370 (2022).

# NBT-BT plonųjų sluoksnių auginimas lazerinio nusodinimo metodu

## Pulsed Laser Deposition of NBT-BT Thin Films

Eglė Martinaitytė<sup>1</sup>, Vadzim Haronin<sup>1</sup>, Rokas Dobužinskas<sup>2</sup>, Gediminas Kreiza<sup>3</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup>, Šarūnas Svirskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

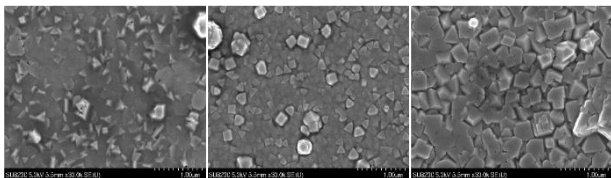
<sup>2</sup> Cheminės fizikos institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

<sup>3</sup> Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius  
[egle.martinaityte@ff.vu.lt](mailto:egle.martinaityte@ff.vu.lt)

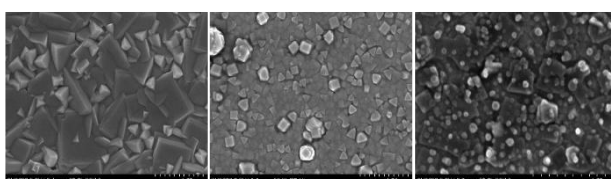
Plonieji feroelektriniai sluoksniai yra plačiai naudojami elektronikos komponentuose, pavyzdžiui, kondensatoriuose, ar mikroelektroninėse mechaninėse sistemose (MEMS) dėl savo pjezoelektrinių savybių [1]. Įprastai naudojamos medžiagos dažnai yra švino pagrindu susintetinti perovskito oksidai. Švinas yra kenksmingas aplinkai ir gyviesiems organizmams todėl yra ieškoma švinių medžiagų alternatyvų. Viena iš jų yra  $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ - $\text{BaTiO}_3$  (NBT-BT) kietieji tirpalai. Nuo 2000 m. bešvinių feroelektrinių medžiagų tema yra plačiai vystoma [2], bet vis dar kyla iššūkių pagaminti praktikoje pritaikomus bešvinius sluoksnius. Šio darbo tikslas yra optimizuoti 0,8NBT-0,2BT plonųjų sluoksnių auginimo parametrus, siekiant gauti nelaidžius ir homogeniškus polikristalinius sluoksnius.

Sluoksniai auginami ant Pt/LaNiO<sub>3</sub>/SiO<sub>2</sub>/Si padėklų naudojant KrF eksimerinį lazerį, kurio bangos ilgis yra 248 nm. Keičiami auginimo parametrai pateikti 1 lentelėje: padėklo temperatūra, deguonies slėgis, atstumas tarp taikinio ir padėklo bei lazerio energijos įtėkis.

Gautų sluoksnių struktūra ir sudėtis buvo tirti skenuojančios elektroninės mikroskopijos (SEM) ir rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) metodais. Dielektrinės savybės buvo matuotos HP4284A LCR matuokliu kambario temperatūroje. Iš rezultatų matyti, kad auginimo parametrai daro įtaką auginamiems sluoksniams: temperatūrai didėjant (1 pav.) ar deguonies slėgiui mažėjant (2 pav.), grūdai didėja. Taip pat kinta sluoksnio homogeniškumas.

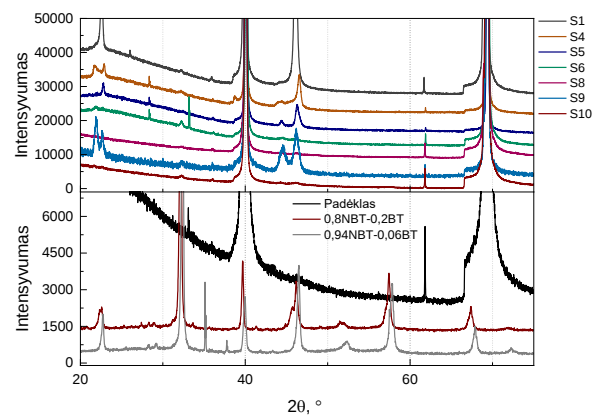


1 pav. Sluoksnių SEM nuotraukos didėjant (iš kairės į dešinę) padėklo temperatūrai auginimo metu.



2 pav. Sluoksnių SEM nuotraukos didėjant (iš kairės į dešinę) deguonies slėgiui auginimo kameroje.

3 pav. yra pateikta rentgeno spindulių difrakcijos rezultatai. Iš jų matyti, kad ties 42-48° skirtingai augintų sluoksnių fazės yra nevienodos. Taip yra dėl kitokios bario titanato koncentracijos kiekviename sluoksnyje.



3 pav. Rentgeno spindulių difrakcijos rezultatai.

1 lentelė. Sluoksnių auginimo parametrai.

|     | Temperatūra, °C | Slėgis, mbar | Atstumas, mm | Įtėkis, J/cm <sup>2</sup> |
|-----|-----------------|--------------|--------------|---------------------------|
| S1  | 600             | 0,3          | 55           | 1,5                       |
| S4  | 550             | 0,3          | 55           | 1,5                       |
| S5  | 650             | 0,3          | 55           | 1,5                       |
| S6  | 600             | 0,06         | 55           | 1,5                       |
| S8  | 600             | 0,3          | 55           | 1,8                       |
| S9  | 600             | 0,3          | 55           | 2,1                       |
| S10 | 600             | 0,3          | 55           | 2,4                       |

Reikšminiai žodžiai: bešviniai sluoksniai, PLD, perovskitai, dielektrinė spektroskopija.

### Literatūra

- [1] N. Setter *et al.*, *Ferroelectric thin films: Review of materials, properties, and applications*, J Appl. Phys., t. 5, (2006).
- [2] J. Rödel *et al.*, *Perspective on the development of lead-free piezoceramics*, J American Ceramic Society, t. 92, p., (2009).

# 3D spausdintų CNT/BaTiO<sub>3</sub> kompozitų dielektrinės ir elektromagnetinių bangų sugerties savybės

## Dielectric and Absorption Properties of 3D-Printed CNT/BaTiO<sub>3</sub> Composites

Juta Varnytė<sup>1</sup>, Edita Palaimienė<sup>1</sup>, Jan Macutkevič<sup>1</sup>, Pauline Blyweert<sup>2</sup>, Alain Celzard<sup>2</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Applied Electrodynamics and Telecommunications, Vilnius University, Sauletekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Université de Lorraine, CNRS, IJL, F-88000 Epinal, France

[edita.palaimiene@ff.vu.lt](mailto:edita.palaimiene@ff.vu.lt)

Electromagnetic radiation (EM) emitted by various devices can cause malfunctions or damage to other electronic devices. EM shielding materials help prevent this. These materials, known as absorbers, act as barriers to the propagating radiation [1]. A material's absorption increases with more electric and magnetic dipoles. Materials with high dielectric permittivity are the source of these dielectric dipoles [2]. Moreover, standard-filled materials require significant amounts of resources. Therefore, various structured materials are being developed. This approach aims to reduce resource consumption and lower production costs.

The objective of this study is to investigate the dielectric properties of 3D printed composite materials with different amounts of carbon nanotubes (CNT) (1.3 wt % and 1.8 wt %) and barium titanate (BaTiO<sub>3</sub>) (10 % and 20 %) across a broad frequency range.

The best absorption is observed in composites containing barium titanate additives. Figure 1 presents the measured dependence of the absorption coefficient on frequency for 1.8 wt % + 20 % BaTiO<sub>3</sub> samples with different structures. In a filled plate, the absorption coefficient reaches up to 70 %. As the EM frequency increases, the HREA structure also exhibits rapidly rising values, with absorption increasing from 40 % to 60 %. It was determined that the most minor changes in absorption properties compared to the filled plate occur when using the HREA structure.

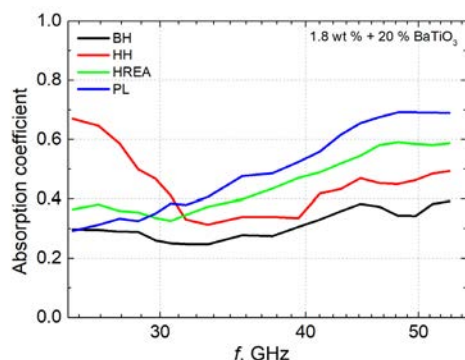


Fig. 1 Dependence of the absorption coefficient on frequency in composites with 1.8 wt % carbon nanotubes and 20 % barium titanate fillers

Figure 2 shows the dependence of the dielectric permittivity on frequency in samples of various compositions. In samples containing 1.8 wt % of CNTs,

a strong decrease in the imaginary part of the dielectric permittivity is observed across the frequency range from 10 Hz to 1 GHz – a pronounced conductivity phenomenon is observed. The real part decreases sharply up to 1 kHz, which is explained by the interfacial polarization occurring at the surface of the electrodes [3]. As the frequency increases further (to 40 GHz), the real permittivity values drop to 4.

The highest EM wave absorption coefficient in the frequency range from 25 GHz to 53 GHz was achieved in composites with the highest CNT (1.8 wt %) and 20 % BaTiO<sub>3</sub> concentration. However, barium titanate has a significant impact on the interaction of the composite with EM radiation only at frequencies from 25 GHz to 53 GHz, but in the lower frequency range (10 Hz - 1 GHz), BaTiO<sub>3</sub> leads to enhanced conductivity properties.

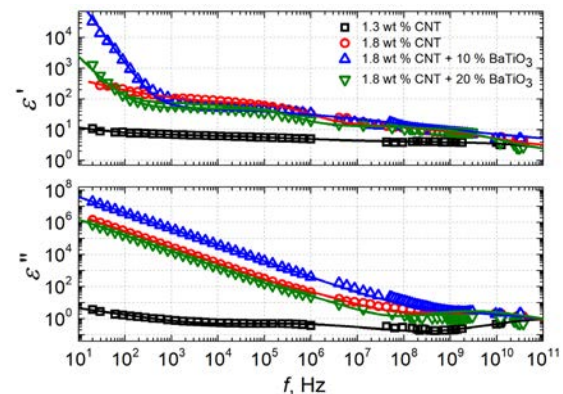


Fig. 2 Dependence of the dielectric permittivity on frequency in composites of different composition.

*Key words: composites, carbon nanotubes, barium titanate, 3D printing, dielectric properties*

### References

- [1] M. Nasreen Taj, B. Daruka Prasad et al., PANI-molybdate nanocomposites: Structural, morphological and dielectric properties for the effective electromagnetic interference (EMI) shielding applications in X-band, *Applied Surface Science Advances* 7, 100203 (2022).
- [2] Y. Tao, P. Li, S. Q. Shi, Effects of Carbonization Temperature and Component Ratio on Electromagnetic Interference Shielding Effectiveness of Wood ceramics, *Materials* 9(7):540 (2016).
- [3] T. D. Ibragimov, I. S. Ramazanov, U. V. Yusifova, R. M. Rzaev, Dielectric Relaxation and Electric Conductivity of Polyethylene Doped with Barium Titanate Particles, *Integrated Ferroelectrics* 231(1), 1–8 (2022).

# Magnetinio lauko dinamika magnetinio impulsinio suvirinimo procese

## Magnetic field dynamic during the magnetic pulse welding process

Pavel Piatrou<sup>1</sup>, Voitech Stankevič<sup>1</sup>, Skirmantas Keršulis<sup>1</sup>, Vilius Vertelis<sup>1</sup>, Nerija Žurauskienė<sup>1</sup>

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

[pavel.piatrou@ftmc.lt](mailto:pavel.piatrou@ftmc.lt)

Welding metals with pulsed magnetic fields is a modern, environmentally friendly method that does not require high temperatures to melt the parts to be welded. The process is based on the application of short, pulsed, high-amplitude magnetic fields that generate a temporary magnetic pressure on the workpieces. This pressure is sufficient to accelerate the flyer material to high speeds, resulting in a high-energy collision with the target and the formation of a localized bond interface. A key advantage of this method is the ability to bond different metals, which is often not possible with conventional fusion welding techniques.

In order to investigate the magnetic field dynamics during magnetic pulse welding, we have developed a setup consisting of a spark gap, a 50  $\mu\text{F}$  capacitor, a 5-turn Bitter coil and a copper field shaper. The setup generates short pulsed magnetic fields, which we recorded with a fast B-scalar meter [1]. A series of experiments were carried out with different setups.

Fig. 1 shows the magnetic flux density measured in the coil with a field shaper at a discharge energy of 1.2 kJ. The waveform represents a damp oscillation with a total duration of more than 200  $\mu\text{s}$ . The duration of a single half-period in the signal shown is approximately 17  $\mu\text{s}$ , the maximum magnetic flux density is 9 T. The entire signal is recorded in the positive range due to the specific measuring principle of the B-scalar CMR sensor: It measures the absolute resistance of a La-Sr-Mn-O thin film, which depends on the local magnetic flux density.

Fig. 2 shows the magnetic flux density measured in the coil with a field shaper at the same discharge energy for two cases: with an inserted solid rod of aluminum 6063 (19 mm diameter) and with an aluminum tube of the same diameter and a wall thickness of 0.5 mm. When the solid rod is used, the maximum magnetic flux density increases to 14.5 T due to the induced surface currents. When the tube is used, the dynamics of its free forming in the pulsed magnetic field can be observed. A comparison of the two waveforms makes it possible to determine the beginning of the deformation of the tube, which occurs about 4  $\mu\text{s}$  after the start of the transient process.

Fig. 3 shows the time dependence of the magnetic flux density during the tube welding experiment at a discharge energy of 1.6 kJ. The forming aluminum tube hits an aluminum rod inserted into the tube, which corresponds to the welding phase. By measuring the magnetic field development, the exact time of impact can be determined (at 10  $\mu\text{s}$ , indicated by the arrow). The results illustrate the innovative approach of monitoring the magnetic field dynamics during magnetic pulse

welding, which opens up possibilities for practical applications to assess the quality of welded joints.

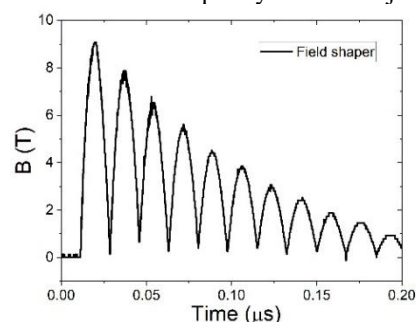


Fig. 1 Magnetic flux density in the field shaper at discharge energy of 1.2 kJ.

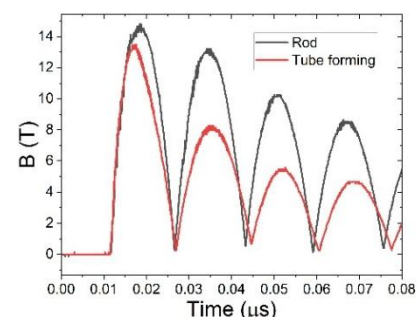


Fig. 2 Magnetic field dynamics in the gap between the field shaper and the flyer part. Black curve: aluminum rod; red curve: aluminum tube. Discharge energy: 1.2 kJ.

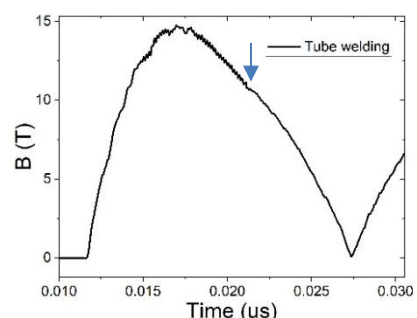


Fig. 3 Magnetic field dynamics between the field shaper and the aluminum tube during its welding with an aluminum rod. Discharge energy: 1.6 kJ.

**Keywords:** magnetic field measurement, magnetic pulse welding, MPW, tube welding

### Literature

- [1] Piatrou, P.; Stankevic, V.; Zurauskienė, N.; Kersulis, S.; Viliunas, M.; Baskys, A.; Sapurov, M.; Bleizgys, V.; Antonovic, D.; Plausinaitienė, V.; et al. Magnetic Field Meter Based on CMR-B-Scalar Sensor for Measurement of Microsecond Duration Magnetic Field Pulses. *Sensors* 2025, 25, 1640.

## Sidabru ir titanu legiruotų deimanto-tipo anglies dangų savybių tyrimas

### Investigation of the properties of silver and titanium co-doped diamond-like carbon films

Oskars Platnieks<sup>1</sup>, Liutauras Marcinauskas<sup>1,2</sup>, Hassan Zhairabany<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, Kaunas University of Technology, Studentų st. 50, LT-51368 Kaunas, Lithuania

<sup>2</sup>Plasma Processing Laboratory, Lithuanian Energy Institute, Breslaujos str. 3, LT 44403 Kaunas, Lithuania  
oskars.platnieks@ktu.lt

Diamond-like carbon (DLC) coatings are widely recognized for their high hardness, low friction, and excellent chemical resistance, making them suitable for applications in the automotive, aerospace, electronic, and biomedical sectors. Despite these advantages, undoped DLC films are often limited by high internal compressive stress, poor adhesion to substrates, and intrinsic brittleness, which restrict their performance in demanding operating conditions. To overcome these shortcomings, doping strategies with metallic and non-metallic elements have been explored to relieve internal stresses, and enhance surface functionality.

Titanium (Ti) has emerged as one of the most effective dopants for DLC. Ti readily bonds with carbon, forming Ti–C bonds or nanocrystalline TiC domains within the amorphous carbon matrix. Ti-DLC films generally retain high hardness while exhibiting better toughness and wear resistance. Additionally, the presence of surface Ti oxides provides improved corrosion resistance and supports biocompatibility, making Ti-modified DLC particularly relevant for biomedical applications.

Silver (Ag) behaves as a non-carbide-forming dopant, tending to segregate into metallic nanoclusters within the carbon network. These Ag inclusions act as ductile phases, improving toughness and compliance while simultaneously lowering the coefficient of friction by forming silver-rich tribolayers during sliding. Ag also provides antibacterial activity, which is highly desirable in medical implant coatings. Importantly, moderate Ag contents can be incorporated with minimal compromise to hardness.

Co-doping approaches that combine elements with different bonding characteristics have recently gained attention as a way to balance mechanical reinforcement with functional surface properties. Ti/Ag co-doping, in particular, offers a promising synergy: Ti strengthens the DLC matrix and relieves internal stresses, while Ag contributes lubricity, oxidation resistance, and antimicrobial behavior. However, systematic studies directly comparing single element doped DLC and co-doped DLC films under identical deposition conditions remain limited. Expanding this knowledge base is essential for advancing multifunctional DLC coatings.

In this work, titanium and titanium/silver co-doped DLC thin films (Ti-DLC and TiAg-DLC) were deposited on Si substrates by direct current magnetron sputtering, using graphite, titanium, and Ti-Ag alloy cathodes. The metal content was varied by adjusting the opening of a

shield mounted above the AgTi target, enabling tuning of Ti and Ag concentrations. The Ti content ranged from 0.3 to 1.8 at.%, whereas Ti/Ag co-doped DLC films contained between 1.0 and 6.9 at.% total metal. The films were characterized by energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS), X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), atomic force microscopy (AFM), Raman spectroscopy, nanoindentation, and water contact angle measurements, while friction was evaluated using DriveAFM.

The introduction of titanium and silver into DLC films produced clear compositional, structural, and property modifications. Atomic force microscopy revealed that Ti-doping caused only minor roughness changes ( $R_q$  1.8–2.3 nm), while Ti/Ag co-doping initially increased roughness up to 3.9 nm due to silver nanocluster formation, followed by surface smoothing at higher metal loadings. Raman spectroscopy and XPS showed progressive graphitization with increasing dopant content. XPS revealed surface enrichment in Ag, which suppressed oxidation at low doping. Friction measurements demonstrated up to a twofold reduction compared to undoped DLC, with Ti/Ag films maintaining low friction across all tested loads. Nanoindentation indicated that small additions of Ti or Ti/Ag reduced hardness, but higher loadings partially restored mechanical strength, with Ti-DLC reaching 4.1 GPa and TiAg-DLC 3.4 GPa. Wettability analysis revealed non-monotonic behavior: Ti-DLC films became slightly less hydrophilic (~69°). While Ti/Ag-DLC films ranged from ~60° at low TiAg contents and reached ~68° at higher contents. OWRK analysis indicated a dopant-induced reduction of surface free energy, primarily due to changes in dispersive components.

Overall, Ti/Ag co-doping provides a tunable balance of hardness, roughness, friction, and wettability, combining the structural benefits of Ti with the surface advantages of Ag. These findings highlight the potential of controlled co-doping strategies for tailoring DLC films in advanced tribological and biomedical applications..

*Reikšminiai žodžiai: Magnetron sputtering, Ti/Ag-DLC films, Nanohardness, Contact angle, Friction.*

#### Acknowledgements

O. Platnieks received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No S-PD-24-23.

# Aukštos tripletinės energijos krūvio pernašos matricų paieška stabiliems mėlynosios srities TADF-OLED prietaisams

## Search for High Triplet Energy Hosts for Stable Blue TADF OLEDs

Giedrius Puidokas<sup>1</sup>, Domantas Berenis<sup>1</sup>, Gediminas Kreiza<sup>1</sup>, Dovydas Banevičius<sup>1</sup>, Kristupas Bagdonas<sup>1</sup>, Vaida Koženiauskienė<sup>2</sup>, Rita Butkutė<sup>2</sup> and Karolis Kazlauskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilnius University, Faculty of Physics, Institute of Photonics and Nanotechnology, Universiteto st. 3, LT-01513, Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup> Department of Polymer Chemistry and Technology, Kaunas University of Technology, Radvilėnų rd. 19, LT-50254, Kaunas, Lithuania  
giedrius.puidokas@ff.vu.lt

OLEDs are solid-state devices that use organic materials to emit light and are widely used in displays due to their high contrast, wide viewing angles, and compatibility with flexible substrates. However, the development of efficient, long-lived blue OLEDs remains a critical bottleneck. Degradation in these devices is linked to excitation-induced bond dissociation, emission zone shift and narrowing, and poor charge balance [1]. The goal of this work is to investigate various modifications of the benchmark host mCBP and evaluate their performance in blue TADF-OLEDs to identify the derivative that maximizes operational stability. To this end, six host materials were studied (fig. 1): the benchmark mCBP, its tert-butyl and cyano substituted derivatives VJK7 and VJK12, and three derivatives (RB134, RB135, RB134Ph) in which the carbazole units are linked to a biphenyl core through C-C linkages. These materials were designed to host blue TADF emitters by maintaining high triplet energy ( $\geq 2.8$  eV) while improving both charge balance and molecular stability.

The evaluation of the six host materials revealed clear differences in their impact on device performance and stability. VJK7 and VJK12, derived from mCBP by tert-butyl and cyano substitution, introduced steric hindrance that disrupted charge balance without delivering improvements in efficiency or lifetime. RB134 and RB135, with carbazole units linked to a biphenyl core via C-C bonds, altered charge transport behavior and exhibited weakened peripheral C-N bonds (BDE  $\approx 0.75$  eV), which limited operational stability. RB134 showed bipolar transport and a moderately reduced triplet energy (2.85 eV), while RB135 displayed n-type transport and a significantly lower triplet energy ( $\sim 2.7$  eV), making it unsuitable for blue emitters. RB134Ph emerged as the most promising host. Its phenyl-stabilized C-N linkage improved the BDE by  $\approx 1.5$  eV and maintained bipolar transport. Although its triplet energy (2.82 eV) is slightly lower than that of mCBP, it remains sufficient for use with some blue TADF emitters.

**Keywords:** OLED host, OLED lifetime, TADF OLED.

### Literatūra

- [1] G. Méhes et al. "Physics and design principles of OLED devices." *Handbook of Organic Light-Emitting Diodes* **53**, p. 1–73 (2020)

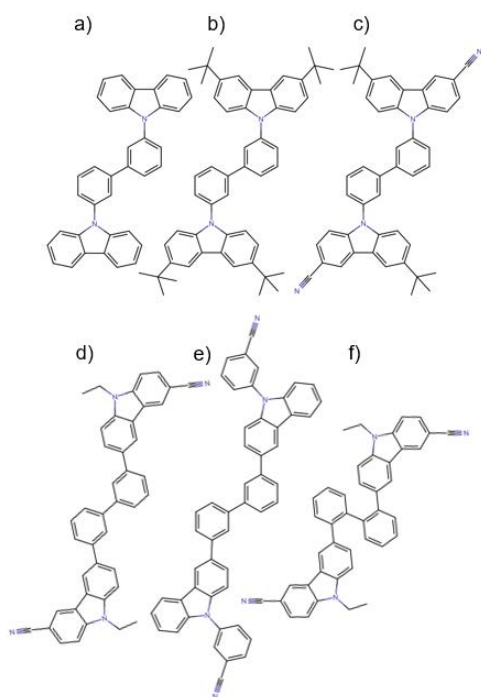


Figure 1. a) mCBP, b) VJK7, c) VJK12, d) RB134, e) RB134Ph and f) RB135 host.

# B vietos katijonų maišymo įtaka MAPb<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub>Br<sub>3</sub> hibridinių perovskitų faziniams virsmams ir dielektrinėms savybėms

## B-Site Mixing Effects on Phase Transitions and Dielectric Properties of MAPb<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub>Br<sub>3</sub> Hybrid Perovskites

Gabrielius Rimkus<sup>1</sup>, Sergejus Balčiūnas<sup>1</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup>, Illia Gurskiy<sup>2</sup>, Mantas Šimėnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Department of Chemistry, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv 01601, Ukraine

[gabrielius.rimkus@ff.stud.vu.lt](mailto:gabrielius.rimkus@ff.stud.vu.lt)

Hybrid metal halide perovskites have attracted exceptional attention as highly efficient and solution-processable materials for photovoltaic applications [1]. Despite their remarkable performance, the applicability of lead-based photovoltaic devices faces a lead toxicity challenge. Thus, perovskite compositions with more environmentally friendly alternatives are also widely investigated including tin-based compounds. In addition to lower toxicity, tin-based perovskites also have the potential for higher charge carrier mobility. However, currently, the mobility in these compounds still suffers from the oxidation of Sn<sup>2+</sup> to Sn<sup>4+</sup>, which leads to self-doping [2].

Ion mixing is a powerful strategy for tuning the performance and stability of photovoltaic devices based on hybrid perovskites. While A- and X-site mixing have been extensively studied [3,4], the effects of B-site mixing on the structural and dynamic properties of MA-based perovskites remain unexplored.

In this study, the structural and dynamic properties of mixed lead–tin halide perovskites MAPb<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub>Br<sub>3</sub> are investigated using broadband dielectric spectroscopy [5]. Complementary experiments, including differential scanning calorimetry, enabled the mapping of the temperature–composition phase diagram. The results indicate that B-site mixing weakly stabilizes the cubic phase, and its influence on structural phase transitions is less pronounced compared to the A- and X-site mixing.

Dielectric measurements further reveal that B-site mixing increases the number of dynamically active MA cations in the low-temperature phase, substantially disrupting the long-range ordering of the organic sublattice suggesting the formation of a glassy phase. Additionally, the increased activation energy in mixed compounds indicates that B-site mixing raises the reorientation barrier of MA cations.

These findings provide insights into the complex interplay between structural and dynamic properties in mixed-metal perovskites, contributing to their potential optimization for photovoltaic applications.

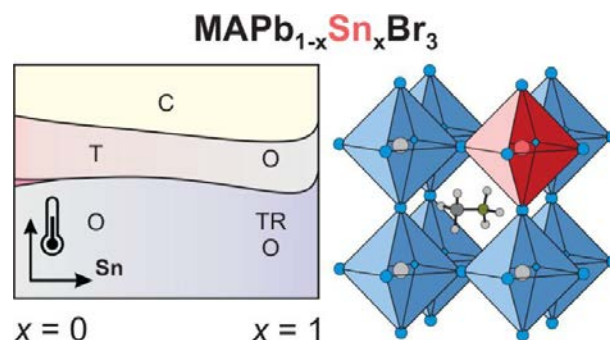


Fig. 1 Temperature–composition phase diagram (left) of mixed MAPb<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub>Br<sub>3</sub> perovskites. Abbreviations: C = cubic, T = tetragonal, O = orthorhombic, TR = triclinic. Structural representation of the perovskite framework (right), with blue octahedra representing PbBr<sub>6</sub> and red octahedra indicating SnBr<sub>6</sub> units.

**Keywords:** perovskites, structural phase transitions, broadband dielectric spectroscopy.

### Literature

- [1] Snaith, H. J. Perovskites: The Emergence of a New Era for Low-Cost, High-Efficiency Solar Cells. *J. Phys. Chem. Lett* 2013, 4, 3623–3630.
- [2] Herz, L. M. Charge-Carrier Mobilities in Metal Halide Perovskites: Fundamental Mechanisms and Limits. *ACS Energy Lett* 2017, 2, 1539–1548.
- [3] M. Šimėnas, et al. Phase Transitions and Dynamics in Mixed Three- and Low-Dimensional Lead Halide Perovskites. *Chem. Rev* 2024, 124, 2281–2326.
- [4] G. Rimkus, et al. Phase Diagram and Dielectric Response of Hybrid Lead Halide Hollow Perovskites: A Universal Behavior of Molecular Cation Mixing. *Chem. Mater* 2024, 36, 7397–7405.
- [5] G. Rimkus, et al. B-Site Mixing Effects in Hybrid Perovskites: Phase Transitions and Dielectric Response of MAPb<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub>Br<sub>3</sub>. *Chem. Mater* 2024, 36, 7397–7405.

## Kristalo kokybė už stiklo gamybos kainą: ceriu aktyvuoti granatai amorfiniame kvarce

### Cost-effective composite scintillators based on Ce-doped garnets in amorphous silica

Arnoldas Solovjovas<sup>1</sup>, Saulius Nargelas<sup>1</sup>, Monika Skruodienė<sup>2</sup>, Šarūnas Ščefanavičius<sup>1</sup>, Gabija Soltanaitė<sup>1</sup>, Žydrūnas Podlipskas<sup>1</sup>, Aivaras Kareiva<sup>2</sup>, Gintautas Tamulaitis<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Neorganinės chemijos katedra, Naugarduko g. 24, LT-03225, Vilnius

[arnoldas.solovjovas@ff.vu.lt](mailto:arnoldas.solovjovas@ff.vu.lt)

Scintillating materials are currently used in a wide range of applications, the major applications are advanced medical imaging systems and high-energy physics experiments. Cerium-activated garnets, such as YAG:Ce, are particularly attractive due to their efficient photoluminescence and relatively fast response. However, producing bulk single crystals or transparent ceramics remains expensive, limiting their large-scale use. To address this, we developed a sol-gel method to produce cost-effective composite scintillator consisting of Ce-doped garnet microcrystals embedded in an amorphous silica matrix.

The sol-gel synthesis of composites based on YAG:Ce, LuYAG:Ce, and LuAG:Ce was carried out in two steps. First, Ce-doped garnet powders with a nominal Ce content of 0.5% were prepared using an acid-assisted sol-gel route. In the second step, these powders were incorporated into a silica matrix using a modified sol-gel process with optimized gelation and drying to obtain crack-free materials. Three sets of composites YAG/SiO<sub>2</sub>, LuYAG/SiO<sub>2</sub>, and LuAG/SiO<sub>2</sub> were fabricated, each containing four samples with garnet loadings of 0.5, 1, 1.5, and 2 wt%.

Optical properties were investigated using photoluminescence (PL), time-resolved photoluminescence (TRPL), and quantum yield (QY) measurements. A Yb:KGW femtosecond laser delivering 170 fs pulses at 1030 nm was employed, with a tunable optical parametric amplifier providing resonant excitation of Ce<sup>3+</sup> ions. PL spectra were dispersed using a 328 mm focal-length spectrograph and recorded with CCD detector, whereas TRPL was measured using a UV–VIS streak camera with 3 ps resolution. QY of garnet/silica composites was determined using a 6-inch integrating sphere. All measurements were performed at room temperature.

X-ray diffraction confirmed the formation of pure-phase garnet microcrystals without secondary phases or Si contamination. SEM imaging and cathodoluminescence (CL) mapping revealed micrometer-scale garnet grains that tended to agglomerate at higher loadings. Luminescence enhancement with increasing loading was observed, despite the agglomeration. The PL intensity increased superlinearly with garnet concentration, while the QY saturated at ~50%, approaching that of bulk YAG:Ce. In Lu-containing composites, an additional fast decay component appeared, likely due to modified Ce<sup>3+</sup> centers

interacting with nearby defects. The observed trends suggest that agglomeration and increased grain size improve light extraction and reduce surface-related recombination [1].

In conclusion, we demonstrated that composite scintillators based on Ce-doped garnet microcrystals in silica matrix, fabricated via a two-step sol-gel approach, offer a promising route for scalable, low-cost scintillator production. The composites show good optical quality, competitive quantum efficiency, and fast response, making them suitable for further development in radiation detection technologies. Further optimization of synthesis conditions could reduce the density of trapping centers and enhance performance for practical applications.

*Reikšminiai žodžiai: scintillator, garnet, composite, sol-gel, photoluminescence.*

#### Literatūra

- [1] S. Nargelas *et al.*, “Novel scintillators based on cerium-doped garnets in amorphous silica: crystal quality at the cost of glass,” *Journal of Materials Chemistry C*, vol. 13, no. 25, pp. 12745–12753, 2025, doi: <https://doi.org/10.1039/d5tc00985e>.

# Ni/SDC anodų sintezė naudojant porų formuotojus

## Synthesis of Ni/SDC anodes using pore formers

Neila Stonkutė<sup>1</sup>, Mantas Sriubas<sup>1,2</sup>, Marius Urbonavičius<sup>3</sup>, Šarūnas Varnagiris<sup>3</sup>, Brigita Abakevičienė<sup>1,2</sup>, Tomas Šalkus<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas

<sup>2</sup>Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko st. 59, LT-51423 Kaunas

<sup>3</sup>Lietuvos energetikos institutas, Vandenilio energetikos technologijų centras, Breslaujos g. 3, LT-44403 Kaunas

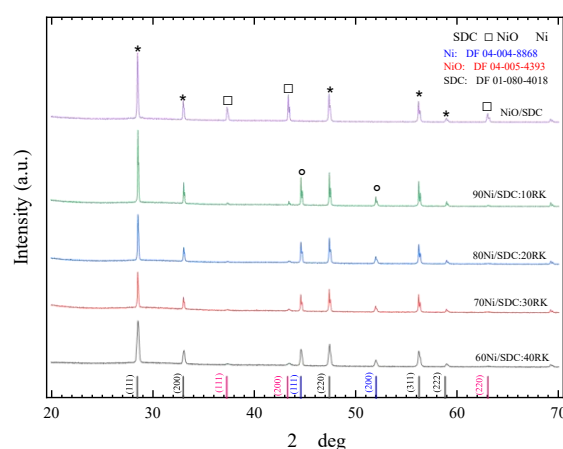
<sup>4</sup>Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

[mantas.sriubas@ktu.lt](mailto:mantas.sriubas@ktu.lt)

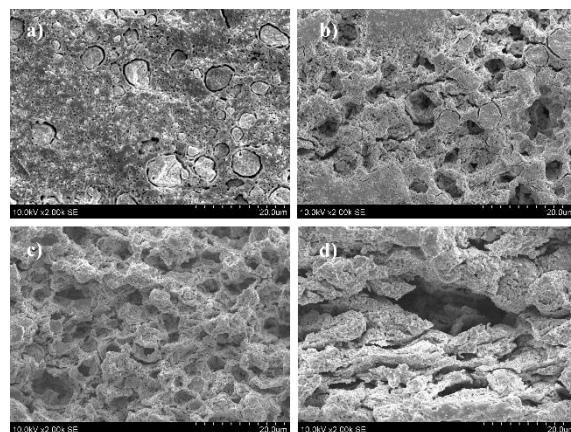
SOFC yra įrenginiai, kurie efektyviai paverčia cheminę energiją į elektros energiją ir šilumą. Klasikinis SOFC susideda iš porėtų anodo ir katodo, atskirtų tankiu elektrolitu, kuris yra laidus deguonies jonams. SOFC darbinė temperatūra yra apie 1000 °C, dėl ko kyla įvairių problemų, susijusių su įrenginio patvarumu, kaina ir panaudojimu. Todėl yra dedamos didžiulės pastangos mažinti darbinę temperatūrą ir padidinti galios tankį virš 1 W/cm<sup>2</sup>. Šiuolaikiniai elektrodai turi atitikti šiuos kriterijus: kuo mažesnė poliarizacijos varža, cheminis stabilumas, termomechaninis suderinamumas su kitais SOFC komponentais, porėtumas 30%-40%, gera adhezija, didelis aktyvus plotas, paprasta gamyba ir maža kaina [1]. SOFC anodas yra kompozitinė medžiaga, sudaryta iš porų, palengvinančių dujų difuziją, metalo, atliekančio katalizatoriaus vaidmenį ir užtikrinančio elektrinę laidumą, bei keramikos, palaikančios joninį laidį. Klasikinis Ni-YSZ anodas yra naudojamas SOFC, veikiančiam 800 °C temperatūroje, tačiau, deja, anodo poliarizacijos varža padidėja apie 10 kartų, sumažinus temperatūrą nuo 800 °C iki 600 °C. Todėl yra tyrinėjami Ni-SDC ir Ni-GDC anodai kurie parodė geresnes elektrochemines savybes ir cheminį suderinamumą nei Ni-YSZ elektrodai [2]. Anodų elektrocheminės charakteristikos priklauso ir nuo struktūrinių savybių, tokių kaip porėtumas. Tačiau, kol kas, dar nebuvo rastas pigus metodas gaminti SOFC anodus su optimaliu porų dydžiu ir koncentracija. Vienas iš perspektyvių metodų – pridėti poras formuojančių miltelių į pradinis anodo kompozito miltelius. Dažniausiai naudojami poras formuojantys milteliai yra miltai, bulvių krakmolai, ryžių krakmolai, aktyvuota anglis, anglies suodžiai, grafitas ir kt. [3]. Nepaisant atliktų tyrimų, nėra rasta optimali poras formuojančių miltelių koncentracija ir rūšis.

Šiame darbe tirta ryžių krakmolo (RK) ir grafito (G) įtaka Ni/SDC anodų struktūrai. Tabletės buvo presuotos naudojant mechaninį presą ir 1,5t apkrovą. Tuomet tabletės išdegtos 750 °C temperatūroje ir sintetintos 1300 °C ore. Vėliau atlikta jų redukcija 800 °C H<sub>2</sub>/Ar aplinkoje (10% H<sub>2</sub>). Gauti anodai ištirti panaudojant XRD, SEM, EDS, IS ir mikro kietumo įrenginius. Atlikus tyrimus pastebėta, kad 3 valandų atkaitinimas 800°C H<sub>2</sub>/Ar aplinkoje yra pakankamas redukuoti NiO į Ni (1 pav.). Taip pat pastebėta, kad porų formuotojų koncentracija ir rūšis daro reikšmingą įtaką porėtumui (2 pav.) Naudojant porų formuotojus smarkiai išauga porų tankis. Tačiau, didėjant porėtumui nukenčia anodų

mechaninės savybės. Tabletės pasidaro trapios. Toks poveikis ypatingai pastebimas naudojant grafito miltelius. Esant didelei grafito koncentracijai (>30%) anodai neišlaiko savo struktūros ir subyra.



1 pav. XRD kreivės: Ni/SDC anodai po redukcijos, naudoti ryžių krakmolo (RK) porų formuotojai



2 pav. Anodų SEM skerspjūvio vaizdai po redukcijos: a) Ni/SDC, b) 90Ni/SDC:10RK, c) 70Ni/SDC:30RK, ir d) 90Ni/SDC:10G

*Reikšminiai žodžiai: Ni/SDC anodai, porų formuotojai, ryžių krakmolai, grafitas.*

### Literatūra

- [1] K.H. Ng, H.A. Rahman, and M.R. Somalu, Int. J. Hydrogen Energy **44**, 30692 (2019).
- [2] M. Rafique, H. Nawaz, et.al., Int. J. Energy Res. **43**, 2423 (2019)
- [3] C. Timurkutluk, S. Onbilgin, et.al., Int. J. Hydrogen Energy **142**, 886 (2025)

# Metalo druskų priemaišų įtaka spalvinių apšvitos indikatorių jautrumui

## The influence of metal salt additives on the sensitivity of colorimetric radiation indicators

Gabrielius Stankus<sup>1</sup>, Judita Puišo<sup>1</sup>, Diana Adlienė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Kauno technologijos universitetas, Fizikos katedra, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas  
[gabrielius.stankus@ktu.edu](mailto:gabrielius.stankus@ktu.edu)

**Ivadas.** Atsitiktinė jonizuojančiosios spinduliuotės apšvita galima dėl įvairių veiksnių: radioaktyviųjų medžiagų nuotėkio, įrangos gedimų, avarių ar tyčinių veiksmų, susijusių su karinėmis operacijomis. Nors profesinės apšvitos stebėseną yra reglamentuota medicinoje bei pramonėje, atsitiktinės apšvitos aptikimas gamtinėje aplinkoje vis dar yra sudėtingas, nes masinis piliečių aprūpinimas individualiais dozimetrais, kurie yra sąlyginai brangūs, šiai dienai nėra išspręstas [1].

Vienas iš galimų problemos sprendimų – pigios polimerinės spalvotos plėvelės-apšvitos indikatoriai, kurių optinės savybės kinta, veikiant jonizuojančiajai spinduliuotei. Keičiantis spalvai, tokie prie asmens aprangos tvirtinami individualūs dozės indikatoriai informuoja apie padidėjusį apšvitos lygį aplinkoje dėl technologinių/branduolinių incidentų sukeltos radioaktyviosios taršos.

**Tikslas.** Šiame darbe pristatomi PVA-malachito žaliojo apšvitos indikatoriaus dozimetrinio jautrio pokyčio dėl AgNO<sub>3</sub> priemaišų tyrimai.

**Medžiagos, metodai ir įranga.** Naudojant polimerinių plėvelių gamybos metodiką [2], buvo suformuotos tvirtos polimerinės plėvelės, įterpiančios PVA (polivinilo alkoholio) polimerinę matricą malachito žaliojo (C<sub>23</sub>H<sub>25</sub>ClN<sub>2</sub>) dažiklio ir/arba AgNO<sub>3</sub> (1 lentelė). Glicerinas naudojamas kaip papildomas PVA tirpiklis.

Suformuotos plėvelės buvo švitinamos 6 MeV fotonais linijiniame greitintuve Clinac DMX, naudojant standartinę apšvitos geometriją.

Apšvitintų plėvelių optinių savybių pokyčiams analizuoti buvo naudojami plėvelių UV-Vis sugerties spektrai, užregistruoti naudojant spektrofotometrą Ocean Optics su USB4000 bei Ocean Optics programinę įrangą.

Plėvelių dozimetrinis jautris buvo vertinamas, naudojant indikatoriaus atsaką (optinio tankio) į apšvitos dozę kreivės nuokrypį, remiantis [3] šaltinyje nurodyta metodika, o spalviniai pokyčiai (spalvos intensyvėjimas/išblukimas) – pagal [4] metodiką.

**Rezultatai.** Švitinant plėveles rentgeno/gama fotonais, vyksta vandens radiolizės procesai, kurių metu susidaro reaktyvūs radikalai (OH•, H•, e<sub>aq</sub><sup>-</sup> ir kt.), nes ir išdžiovintų PVA pagrindo plėvelių sudėtyje lieka tam tikras vandens kiekis. Šiems radikalams sąveikaujant su

katijoninio trifenilmetano (malachito žaliojo) dažiklio molekulėmis, konkrečiai su azo grupėmis, vyksta chromoforo struktūros degradacija, siejama su *N*-demetilacija ir konjuguotos sistemos suardymu, dėl ko stebimas malachitui būdingos spalvos išblukimas. Kita vertus, švitinant AgNO<sub>3</sub>, radiolizės metu susidaro Ag<sup>+</sup> jonai, kurie, sąveikaudami su e<sub>aq</sub><sup>-</sup>, gali formuoti Ag nanodaleles, bei NO<sub>3</sub><sup>-</sup> jonai, susiję su netiesiogine radiolize ir HO•, NO<sub>2</sub>• bei NO• radikalų susidarymu. Malachito žaliojo blukimo intensyvumas priklauso nuo malachito koncentracijos, apšvitos dozės galios ir nuo medžiagoje sugertosios dozės.

Analizuojant sugerties intensyvumo priklausomybę apšvitintose plėvelėse, nustatyta, kad intensyvesnė šviesos sugertimi pasižymėjo plėvelės, kurių sudėtyje yra malachito žaliojo. Didžiausias dozimetrinis jautrumas (0,56 Gy<sup>-1</sup>) mažų dozių (0 – 2 Gy) intervale buvo nustatytas PVAGlyMal plėvelėms (33 % spalvos blukimas), tačiau, įvedus į plėvelių sudėtį AgNO<sub>3</sub> priemaišų, dėl radiolizės specifikos AgPVAMalGly plėvelių išblukimas padidėjo iki 44 %, tačiau dozimetrinis jautrumas sumažėjo iki 0,09 Gy<sup>-1</sup>.

**Išvada.** Spalvinių plėvelių dozimetrinis jautrumas < 0,1 Gy<sup>-1</sup> yra priimtinas, naudojant terapines (> 2 Gy) dozes. Nors 44 % dažo išblukimas yra santykinai didelis, jautrumas yra per mažas, naudojant plėveles kaip atsitiktinės apšvitos indikatorius, kai fiksuojamos ne letalinės, o sveikatai pavojingos dozės. Siekiant vizualiai identifikuojamų spalvos pokyčių, bus tęsiami tyrimai, orientuoti į dažiklio koncentracijos optimizavimą ir procesų, vykstančių apšvitos metu, detalizavimą.

*Reikšminiai žodžiai:* radiacijos indikatoriai, hidrogeliai, spalvotos polimerinės plėvelės.

### Literatūra

- [1] T. Jasminka, T. Domagoj, K. Darko, K. Ivan, E. Ivan, B. Dino, V. M. Mila, V. Ana, E. Suzana, F. Josipa, B. Sanja, M. Suzana ir S. Ivana. *Medicina* (2024, DOI: 10.3390/MEDICINA60040653).
- [2] Z. Ping, J. Li, C. Hong ir H. Liang. *Multidisciplinary Digital Publishing Institute* (2022, DOI: 10.3390/gels8040238).
- [3] M. Mantvydas, P. Judita, A. Diana ir L. Jurgita. *Polymers* (2021, DOI: 10.3390/polym13223925).
- [4] M. F. Barakat, K. El-Salamawy, M. El-Banna, M. Abdel-Hamid ir A. Abdel-Rehim Taha. *Radiation Physics and Chemistry* (2001, DOI: 10.1016/S0969-806X(01)00181-5).

1 lentelė. Eksperimentinių plėvelių sudėtis

| Plėvelė     | 5 % Malachito žaliasis, g | 1 M AgNO <sub>3</sub> , g | 20 % PVA vandens tirpalas, g | Glicerinas, g |
|-------------|---------------------------|---------------------------|------------------------------|---------------|
| PVAGlyMal   | 0,5                       |                           | 9,0                          | 0,5           |
| AgPVAGly    |                           | 0,86                      | 8,72                         | 0,42          |
| AgPVAMalGly | 0,5                       | 1,0                       | 18                           | 0,5           |

# $A_{0.33}BO_3$ (A – La, Nd, Pr, Gd; B – Ta, Nb) perovskitų elektrinių ir elektromechaninių savybių tyrimas

## Electrical and electromechanical properties investigation of $A_{0.33}BO_3$ (A – La, Nd, Pr, Gd; B – Ta, Nb) perovskites

Tomas Šalkus<sup>1</sup>, Saulius Daugėla<sup>1</sup>, Vilma Kavaliukė<sup>1</sup>, Théo Grivois<sup>2</sup>, Anthony Rousseau<sup>2</sup>, Maud Barre<sup>2</sup>

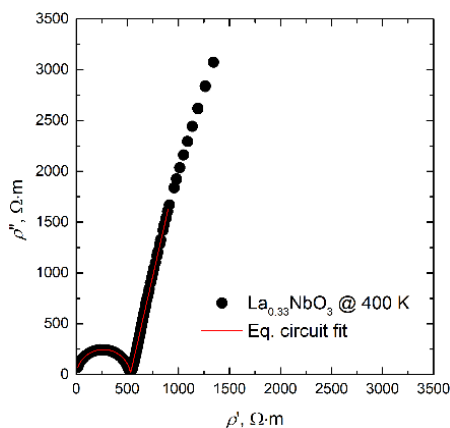
<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Saulėtekio al. 9-3, LT-10257, Vilnius, Lietuva

<sup>2</sup>Institut des Molécules et Matériaux du Mans (IMMM), UMR CNRS 6283, Le Mans Université, Avenue Olivier Messiaen, F-72085 Le Mans Cedex 9, Prancūzija  
[tomas.salkus@ff.vu.lt](mailto:tomas.salkus@ff.vu.lt)

Šiame darbe buvo tiriamos  $A_{0.33}BO_3$  (čia A – La, Nd, Pr arba Gd; B – Ta, Nb) medžiagų, kurios kristalizuojasi į perovskito tipo kristalinę gardelę, elektrinės savybės. Buvo tikimasi rasti netoksiškus (bešvinius) junginius, kurie pasižymi geromis elektrostrikcijos savybėmis ir susieti šias savybes su elektriniu joniniu laidumu. Elektrostrikcijos reiškinys yra paremtas krūvių persiskirstymu kristalinėje joninėje gardelėje, todėl buvo ieškoma tokių cheminių junginių, kuriuose būtų galimas jonų lokalus mobilumas.

Vienfaziai  $La_{0.33}NbO_3$ ,  $Nd_{0.33}NbO_3$ ,  $Gd_{0.33}NbO_3$  ir  $Pr_{0.33}NbO_3$  junginiai buvo sintezuoti kietųjų fazių reakcijų metodu esant 1200°C temperatūrai, o  $La_{0.33}TaO_3$ ,  $Nd_{0.33}TaO_3$ ,  $Pr_{0.33}TaO_3$  – esant 1400°C. Rentgeno spindulių difraktogramų Rietveld'o analizė parodė, kad visos šios medžiagos kristalizuojasi į perovskito struktūrą, tačiau jų simetrija skiriasi. Tetragoninė gardelė buvo gauta  $La_{0.33}TaO_3$  junginiui (erdvinė simetrijos grupė P 4/m m m), o ortorombinės gardelės suformavo visi kiti sintezuoti junginiai (erdvinė simetrijos grupė C m m m).

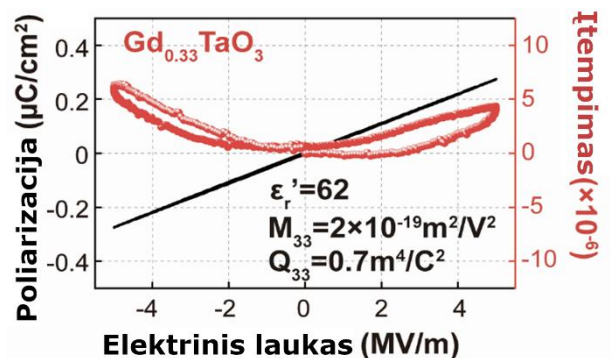
Tolimesniems tyrimams buvo naudojamos didelio tankio (apie 90 % lyginant su maksimaliu įmanomu) keramikos. Keramikos, kurių sudėtyje yra Nb, buvo kepinamos 1400°C temperatūroje, o keramikos su Ta – 1500°C. Elektrinės savybės buvo tiriamos impedanso spektroskopijos metodu. Impedanso spektruose buvo stebima viena relaksacinė laidumo dispersija ir poliarizacija Pt elektrodo – elektrolito sandūroje (1 pav.).



1 pav.  $La_{0.33}NbO_3$  impedanso spektras, išmatuotas esant 400 K

Keramikų tarpkristalitinės terpės praktiškai neįtakojo impedanso spektrų, taigi tarpkristalitinio laidumo išskyrimas yra sudėtingas, kai tuo tarpu tūrinis laidumas buvo nustatytas pasitelkiant ekvivalentinių grandinių analizę. Tūrinis keramikų laidumas kito pagal Arenijaus dėsnį bei buvo nustatytos laidumo aktyvacijos energijos. Atsižvelgiant į gautas vertes buvo padaryta prielaida, kad pagrindiniai krūvininkai šiose medžiagose yra dideli retųjų žemių jonai. Mūsų atveju aktyvacijos energijų vertės yra arti 0,5 eV, o tai gerai koreliuoja su vertėmis, publikuotomis anksčiau [1, 2]. Taigi, galima manyti, kad didžiausią laidumą  $La_{0.33}TaO_3$  ir  $La_{0.33}NbO_3$  junginiuose lemia  $La^{3+}$  katijonai,  $La_{0.33}NbO_3$  laidumas esant kambario temperatūrai siekia  $3,4 \cdot 10^{-7}$  S/m.

Tirtų junginių elektrostrikcijos koeficientai yra labai maži. Didžiausia elektrostrikcija pasižymėjo  $Gd_{0.33}NbO_3$  keramika. Šis junginys išsiskiria iš kitų tirtųjų tuo, kad jame perovskito narveliai yra smarkiai deformuoti, o be to šio junginio bendras elektrinis laidumas yra ženkliai mažesnis. Matomai šie faktoriai ir lemia didesnę elektrostrikcijos koeficiento vertę.



2 pav.  $Gd_{0.33}NbO_3$  poliarizacijos ir įtempimo priklausomybės nuo elektrinio lauko stiprio

*Reikšminiai žodžiai:* keramika, perovskitas, joninis laidumas.

### Literatūra

- [1] A.M. George and A.N. Virkar, J. Phys. Chem. Solids. **49**, 743 (1988).
- [2] I. Animitsa, A. Iakovleva, and K. Belova, Journal of Solid State Chemistry **238**, 156 (2016).

# GaAsBi QW emisijos intensyvumo stiprinimas panaudojant AlGaAs gradientinius barjerus bei struktūrų atkaitinimą

## Enhancing Emission Intensity of GaAsBi QWs via AlGaAs Graded Barriers and Annealing

Aistė Štaupienė<sup>1</sup>, Monika Jokubauskaitė<sup>1</sup>, Aivaras Špokas<sup>1</sup>, Andrea Zelioli<sup>1</sup>, Sandra Stanionytė<sup>1</sup>, Bronislovas Čechavičius<sup>1</sup>, Renata Butkutė<sup>1</sup>, Evelina Dudutienė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257, Vilnius  
[aiste.staupiene@ftmc.lt](mailto:aiste.staupiene@ftmc.lt)

GaAsBi kvantinės struktūros yra laikomos perspektyvia medžiaga šviesos šaltiniams veikiantiems artimosios infraraudonosios srities diapazone. Vos keli procentai bismuto įterpti į GaAs gardelę leidžia ženkliai paslinkti jo optinį atsaką į raudonąją pusę bei sumažinti draustinių energijų tarpo jautrumą temperatūrai [1]. Deja, šių GaAsBi kvantinių struktūrų auginimui yra reikalingos labai žemos auginimo temperatūros (< 430 °C), o tai lemia didelę defektų koncentraciją bandiniuose dėl ko sumažėja GaAsBi fotoluminescencijos (PL) efektyvumas.

Emisijos iš GaAsBi intensyvumą galima padidinti taikant įvairius technologinius sprendimus. Struktūrų atkaitinimas molekulinį pluoštelį epitaksijos (MBE) reaktoriuje (*in-situ*) arba greito atkaitinimo (RTA) krosnyje (*ex-situ*) sumažina defektų koncentraciją [2], o netradicinių gradientinių AlGaAs barjerų panaudojimas padidina krūvininkų pagavimo efektyvumą [3]. Šiame darbe abu šie technologiniai metodai buvo suderinti ir tai leido žymiai pagerinti GaAsBi kvantinių struktūrų optines savybes.

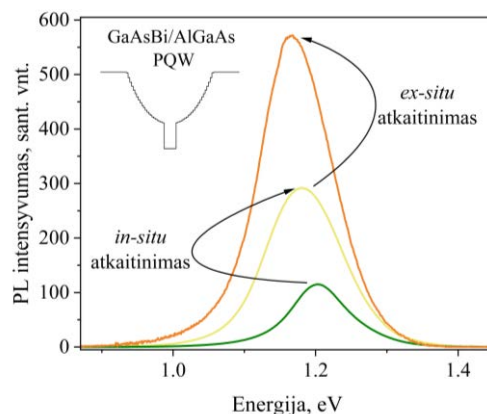
Darbe pristatomos parabolinių GaAsBi/AlGaAs kvantinių duobių (PQW) struktūros, kurios buvo augintos bei atkaitintos skirtingose temperatūrose. Buvo tiriama kaip struktūrų atkaitinimas, atliekamas RTA krosnyje esant aukštesnei nei 650 °C temperatūrai, pakeičia skirtingų GaAsBi/AlGaAs PQW struktūrų emisiją. Šių bandinių optinės savybės buvo tyrimos pasitelkiant PL spektroskopiją esant skirtingai sužadinimo galiai ir keičiant temperatūrą (TD).

Kambario temperatūroje (RT) užregistruotuose spektruose stebima PL juosta, esanti ties ~1,20 eV, buvo priskirta optiniams šuoliams GaAsBi QW turinčioje ~5% bismuto. Šios PL juostos intensyvumas tiesiogiai priklausė nuo AlGaAs barjerų auginimo aukštoje temperatūroje (*in-situ* atkaitinimo) trukmės bei *ex-situ* atkaitinimo temperatūros. Nustatyta, jog *in-situ* atkaitinimas gali padidinti RTPL intensyvumą iki ~250%, o papildomas *ex-situ* atkaitinimas, pasirinkus optimalią temperatūrą, dar padvigubina šios emisijos intensyvumą (1 pav.). Optimali RTA temperatūra priklausė nuo tiriamos struktūros auginimo temperatūros – didėjo ilgėjant *in-situ* atkaitinimo (auginimo aukštoje temperatūroje) trukmei. Tai buvo susieta su pagerėjusia struktūrų kristaline kokybe [4].

Temperatūriniai PL matavimai atskleidė, jog PQW struktūrose yra stebima krūvininkų lokalizacija – TDPL smailės energijos priklausomybė buvo S-formos. Pastebėta, jog *in-situ* atkaitinti bandiniai pasižymėjo

mažesne krūvininkų lokalizacija, dėl tolygesnio Bi pasiskirstymo GaAsBi sluoksnyje ir mažesnių QW potencialo fluktuacijų.

Taigi, gauti rezultatai leidžia teigti, jog praktiškiausia gradientinius AlGaAs barjerus auginti aukštoje temperatūroje, nes taip galima užtikrinti geriausias GaAsBi PQW optines savybes dėl auginimo metu įvykstančio *in-situ* atkaitinimo. Taip pat, pasirinkus optimalią RTA temperatūrą, galima pasiekti dvigubą kambario temperatūros emisijos sustiprėjimą, susijusį su pagerėjusia kristaline kokybe ir sumažėjusia defektų koncentracija.



1 pav. GaAsBi PQW struktūrų PL spektrai užregistruoti kambario temperatūroje.

**Reikšminiai žodžiai:** Fotoluminescencija, GaAsBi, gradientiniai barjerai, molekulinį pluoštelį epitaksija, atkaitinimas.

Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. S-MIP-24-99.

### Literatūra

- [1] R. D. Richards ir kiti, Phys. Stat. Sol. (B), **259**, 2100330 (2022).
- [2] S. Mazzucato ir kiti, Semicond. Sci. Technol., **28**, 022001 (2013).
- [3] S. Pūkienė ir kiti, Nanotechnology, **30**, 455001 (2019).
- [4] P. K. Patil ir kiti, J. Alloys Compd., **725**, 694-699 (2017).

## Molibdeno disulfido vienalytės sandūros formavimas lazeriu

### Laser formation of a molybdenum disulfide homojunction

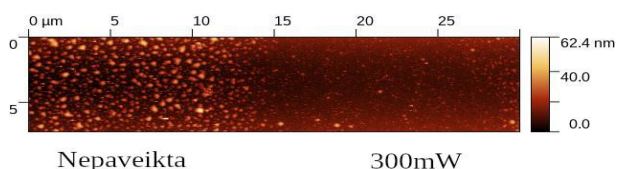
Marius Treideris<sup>1</sup>, Mindaugas Kamarauskas<sup>1</sup>, Tomas Daugalas<sup>1</sup>, Vytautas Jakštas<sup>1</sup>, Algimantas Lukša<sup>1</sup>, Ilja Ignatjev<sup>1</sup>, Saulius Balakauskas<sup>1</sup>, Arūnas Šetkus<sup>1</sup>

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

[marius.treideris@ftmc.lt](mailto:marius.treideris@ftmc.lt)

Vis plačiau kasdieniame gyvenime įsivertina integruotos detektorinės sistemos, stebinčios aplinkos parametrus, individualizuotus žmogaus sveikatos rodiklius, pramoninių procesų kokybę ir pan. Dažnai tokioms sistemoms yra pritaikomos spektroskopinės sistemos, sudarytos iš šviesos šaltinio, silicio fotonikos elementų ir fotodetektoriaus. Tokioms sistemoms kuriami specializuoti patikimi ir nedidelių matmenų fotodetektoriai. Dvimačių medžiagų detektoriai integruotose sistemose laikoma itin perspektyvia galimybe proveržiui. Molibdeno disulfidas yra viena iš tokių medžiagų, plačiai tiriamų fotodetektoriams formuoti. Greta unikalių fotodetektoriumi tinkamų optinių savybių molibdeno disulfido draustinės juostos tarpas, priklausomai nuo dvimačių sluoksnių skaičiaus, gali būti keičiamas nuo 1,29 eV iki 1,88 eV atitinkamai daugiasluoksnyje ir vienasluoksnyje darinyje [1]. Tokia priklausomybė leidžia formuoti vienalytes horizontalias sandūras tos pačios medžiagos pagrindu. Juostų pasiskirstymas tokioje sistemoje skirtingo storio molibdeno disulfido sluoksnių sandūroje taip pat gali pasižymėti unikaliomis savybėmis [2]. Todėl tokias sandūras leidžiančių formuoti technologijų kūrimas ir tyrimas yra svarbi sritis prietaisams su tokiomis sandūromis technologijomis kurti ir vystyti.

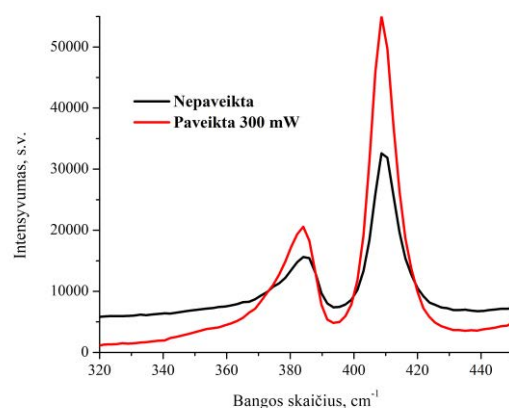
Šiame darbe buvo naudojama CVD metodika sluoksniuotiems dariniams iš MoS<sub>2</sub> formuoti [3]. Bandiniams buvo naudojami silicio padėklai su terminio silicio oksido sluoksniu. Ant padėklų buvo suformuojami Ti/Au/Ti kontaktai, ant kurių garinamas metalinio molibdeno prekursorius. Prekursoriaus storis buvo lygus 3,8 nm. Sierinama 10 min 600 °C temperatūros argono aplinkoje. Suformuoti MoS<sub>2</sub> sluoksniai buvo veikiami lazeriu naudojant besablonės litografijos sistemą Heidelberg instruments DWL 66+ rastriniu režimu. Sistemoje sumontuotas 405 nm bangos ilgio lazeris. Naudojama galia 300 mW, ir staliuko judėjimo greitis 1 μm/s.



1 pav. MoS<sub>2</sub> sluoksnių prieš ir po lazerio poveikio AFM topografijos vaizdas.

AFM atlikti topografijos matavimai parodė, kad lazerių paveiktoje vietoje mažėja sluoksnio paviršiaus

šiurkštumas ir atsiranda laiptelis tarp nepaveiktos ir paveiktos vietų, rodantis, kad lazerio paveiktoje vietoje MoS<sub>2</sub> sluoksnis plonėja.



2 pav. MoS<sub>2</sub> sluoksnių prieš ir po lazerio poveikio Raman spektras.

Raman spektroskopijos tyrimai įrodė, kad paveikus MoS<sub>2</sub> sluoksnį lazerine spinduliuote Raman spektre išlieka būdingos MoS<sub>2</sub> sluoksniams smailės. Atlikus Raman spektro analizę ir įvertinus atstumą tarp smailių nustatyta, kad MoS<sub>2</sub> sluoksnių skaičius mažėja. Tai patvirtina AFM rezultatus dėl lazeriu veikiamo sluoksnio plonėjimo. Atlikti elektriniai I-V matavimai parodė susiformavusią horizontalią vienalytę sandūrą.

*Reikšminiai žodžiai: molibdeno disulfidas, 2D medžiagos, vienalytė sandūra.*

#### Literatūra

- [1] T. Cheiwchanamngij & W.R. Lambrecht, Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics **85.20**, 205302 (2012).
- [2] M. Tosun et al., Scientific reports **5.1**, 10990 (2015)
- [3] M. Kamarauskas et al., Nanotechnology **31.42**, 425603 (2020).

# Development of 3D-Printed Materials Mimicking Biologically Equivalent Tissues for Use under High-Energy X-ray Photons Irradiation

Reda Venskauskaitė<sup>1</sup>, Jurgita Laurikaitienė<sup>1</sup>, Antonio Jreije<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Kaunas University of Technology, Department of Physics, Studentų str. 50, LT-51368 Kaunas

<sup>2</sup>Protection Department, Vilnius University Hospital Santaros Klinikos, Santariškių st. 2, Vilnius, Lithuania  
reda.venskauskaite@ktu.edu

Recent developments in 3D printing technology have shown possibility for the use of these materials under high-energy irradiation ( $> 6$  MeV), as studies indicate that their physical properties do not degrade significantly over time even at high-dose irradiation [1]. In radiotherapy, where precise dose delivery is critical, 3D-printed materials are promising for phantom fabrication due to their ability to replicate complex anatomical structures. However, the lack of suitable materials remains a challenge, highlighting the need to develop polymer composites with tailored additives for specific medical applications [2].

**The aim.** To develop 3D-printed materials for biological tissues simulation under high-energy (6 MeV) X-ray photons irradiation.

**Materials and methods.** Four commercially available 3D printing materials: polylactic acid (PLA), high impact polystyrene (HIPS), ULTRAT acrylonitrile butadiene styrene (ABS), and GLASS were chosen to evaluate their applicability for mimicking biologically equivalent tissues (Table 1 [3-4]).

**Table 1.** Comparison of 3D printing materials and anatomical structures.

| Materials  | 100 % Infill ratio                                                                  | $\rho$ , g/cm <sup>3</sup> | Anatomical structures | $\rho$ , g/cm <sup>3</sup> (anatomical structures) |
|------------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|-----------------------|----------------------------------------------------|
| PLA        |  | 1.06-1.43                  | Thyroid               | 1.045                                              |
|            |                                                                                     |                            | Skin/ Soft tissues    | 1.090                                              |
| HIPS       |  | 1.05                       | Muscle                | 1.040                                              |
| ULTRAT ABS |  | 1.02-1.05                  | Thyroid               | 1.045                                              |
|            |                                                                                     |                            | Soft Tissues          | 1.050                                              |
|            |                                                                                     |                            | Brain                 | 1.052                                              |
| GLASS      |  | 1.10                       | Skin                  | 1.090                                              |
|            |                                                                                     |                            | Thyroid               | 1.045                                              |

In addition, PLA samples were reinforced with various concentrations of TiO<sub>2</sub> additives (0.5 %, 1.0 %, and 2.0 %), blending polymer granules with TiO<sub>2</sub> powder, and using a screw extruder (Precision 450, 3Devo Filament Maker, Eindhoven, The Netherlands) to produce the 3D printable filaments. All the samples were printed using a Zortrax M300 printer using 100 % infill ratio.

Irradiation of the samples was performed in Varian Clinac DMX linear accelerator (6 MeV X-ray photons) delivering total dose of 70 Gy. Tissue equivalency was evaluated using computed tomography (CT) scans

(LightSpeed RT16) of both commercial (Gammex 467) and printed 3D samples.

**Results.** It was found that chosen 3D printing materials mimicking biologically equivalent tissues exhibited sufficient equivalency in terms of radiation density with the thyroid gland, soft tissues, muscle, brain, and skin (Table 2), which remained unchanged after irradiation corresponding to a workload dose (up to 70 Gy).

In contrast, 3D-printed PLA samples with TiO<sub>2</sub> additives demonstrated improved density, suggesting their potential for mimicking spongy bone, while exhibiting only minimal degradation of properties under high-dose irradiation ( $\leq 10\%$ ).

**Table 2.** Measured HU values of 3D printing materials.

| Materials/ Anatomical structures | HU values of the samples                                                              | HU values        |                 |
|----------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|------------------|-----------------|
|                                  |                                                                                       | Measured with CT | Reference [5-6] |
| PLA/ Thyroid, Soft tissues       |  | 221              | 156÷3071        |
| HIPS/ Muscle                     |  | 83               | 66÷80           |
| ULTRAT ABS/ Brain                |  | 44               | -30÷60          |
| GLASS/ Skin                      |  | 38               | -700÷225        |

**Conclusion.** Irradiation of samples with 6 MeV X-ray photons at high doses did not show a significant degradation of the 3D printed materials over time, suggesting their feasibility for imitating biological tissues. Moreover, 3D-printed PLA filaments containing TiO<sub>2</sub> additives exhibited improved physical properties, indicating their potential suitability for the fabrication of phantoms mimicking bone as biologically equivalent tissue, however, further studies are still required.

**Keywords:** 3D printing, tissue equivalent materials, TiO<sub>2</sub> additives, high-energy photons irradiation.

## References

- [1] S. Hatamikia, I. Gulyas, W. Birkfellner, G. Kronreif, A. Unger, G. Oberoi, A. Lorenz, E. Unger, J. Kettenbach, M. Figl, J. Patsch, A. Strassl, D. Georg, A. Renner, Phys. Med. **105**, 102512 (2023).
- [2] Y. Choi, Y.J. Jang, K.B. Kim, J. Bahng, S.H. Choi, Appl. Sci. **12**, 9768 (2022).
- [3] M. Savi, L.C. Silveira, C.M. Cechinel, F.A.P. Soares, M.P.A. Potiens, IJC Radiology **1** (2017)
- [4] M. Alssabbagh, A.A. Tajuddin, M. Abdul Manap, R. Zainon, Radiat. Phys. Chem. **135** (2017)
- [5] M. Bin Saeed, I.M. Aljohani, A.O. Khushaim, S.Q. Bukhari, S.T. Elnaas, Insights Imaging **7** (2016)
- [6] R.C. Thorsten, Eur. Radiol. **17** (2007)

# Kobalto įtaka plonasluoksnių geležies oksido dangų sintezei, struktūrai ir elektrocheminėms savybėms

## The influence of cobalt on the synthesis, structure, and electrochemical properties of thin-film iron oxide coatings

Titas Chimičius<sup>1</sup>, Ieva Barauskienė<sup>1,2</sup>, Kristina Bočkutė<sup>1</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, Fizikinės ir neorganinės chemijos katedra, Radvilėnų pl. 19, 50254 Kaunas  
[titas.chimicius@ktu.lt](mailto:titas.chimicius@ktu.lt)

Anijonų mainų membranos (*angl.* Anion Exchange Membrane, AEM) elektrolizė – naujos kartos vandenilio gamybos technologija, kurioje kaip katalizatoriai naudojami plačiai paplitę ir nebrangūs metalai, saugesnės polimerinės membranos ir mažesnės koncentracijos nei tradicinėje šarminėje elektrolizėje (0,1–1 M) elektrolitas, kuris sumažina greitą komponentų koroziją. Tačiau ši technologija vis dar yra vystymo stadijoje, nes prieš ją įdiegiant pramoniniu mastu reikia išspręsti keletą klausimų. Svarbiausia – turime sukurti vandenilio ir deguonies išsiskyrimo katalizatorius, kurie atitiktų efektyvumo, ilgaamžiškumo, ekonomiškumo, tvarumo, gausumo, perdirbamumo ir geopolitinių rizikų nebuvimo reikalavimus. Deguonies išsiskyrimo (*angl.* Oxygen Evolution Reaction, OER) elektrokatalizatorių kūrimas reikalauja ypač didelio dėmesio dėl jų vangios kinetikos ir didelių viršįtampių [1]. Naujausi tyrimai pabrėžia pereinamųjų metalų oksidų (*angl.* Transition Metal Oxides, TMO) arba (oksi)hidroksidų (TM-(O)OH) katalizinį OER aktyvumą, tarp kurių geležies oksidai ( $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>,  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) išsiskiria mažais viršįtampiais, greita kinetika, puikiu ilgalaikiu patvarumu, plačiu paplitimu gamtoje, ekonomiškumu [2]. Hematitas ( $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), turintis heksagoninę struktūrą su Fe<sup>3+</sup> jonais oktaedrinėse padėtyse, yra pripažįstamas kaip perspektyvus OER katalizatorius dėl savo paplitimo, netoksiškumo ir ekologiškumo savybių. Magnetitas (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) yra kubinė atvirkštinė špinelio struktūra kurių tetraedrinės padėtis užima Fe<sup>3+</sup> jonai, o oktaedrinės padėtis užima Fe<sup>2+</sup> arba Fe<sup>3+</sup> jonai. Špinelio tipo Fe pagrindu susintetinti oksidai, kuriuose Fe jonai yra iš dalies pakeisti kitais TM jonais, gali pasižymėti oksidacijos laipsnių įvairove, geru elektriniu laidumu ir optimalia ryšio energija tarp aktyviųjų centrų ir OER tarpinių junginių.

Naujausi pasiekimai katalizatorių, skirtų AEM vandens elektrolizei, kūrimo srityje parodė, kad kobalto priedais papildyti geležies oksidai yra efektyvi ir ekonomiškai alternatyva tauriųjų metalų pagrindu pagamintiems katalizatoriams. Tyrimai rodo, kad Co priemaišos padidina Fe pagrindu pagamintų katalizatorių aktyvumą ir patvarumą, optimizuodami jų elektronines ir struktūrines savybes ir taip pagerindami jų veikimą. Šie rezultatai [3–4] pabrėžia kobaltu legiruotų geležies oksidų potencialą padidinti AEM elektrolizės

efektyvumą, siūlant perspektyvų kelią link tvaraus vandenilio gamybos.

Šiame tyrime pateikiame sistemingą pereinamųjų metalų oksidų, konkrečiai plonasluoksnių geležies oksido dangų, legiruotų kobaltu, kaip labai aktyvių ir tvirtų OER katalizatorių, tyrimą. Plonasluoksnių dangos buvo pagamintos naudojant reaktyvų magnetroninį dulkinimą, tikslų nusodinimo metodą, leidžiantį kontroliuoti dangų sudėtį, mikrostruktūrą ir storį.

Išsamus kobaltu legiruotų geležies oksido dangų charakterizavimas parodė katalizinio aktyvumo ir stabilumo pagerėjimą, palyginti su nelegiruotu geležies oksidu. Struktūrinė analizė, atlikta naudojant rentgeno difrakciją (XRD), parodė, kad kobalto įtraukimas padidina amorfiškumą ir modifikuoja gardelės struktūrą, skatindamas didesnės aktyviųjų centrų koncentracijos susidarymą. Skanuojanti elektronų mikroskopija (SEM) ir atominės jėgos mikroskopija (AFM) suteikė įžvalgų apie dangų paviršiaus morfologiją ir vienodumą, kurie tiesiogiai veikia jų elektrochemines savybes.

*Reikšminiai žodžiai:* vandens elektrolizė, deguonies išsiskyrimo reakcija, elektrokatalizė.

Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. P-MIP-24-237.

### Literatūra

- [1] I.T. Cousins, G. Goldenman, D. Herzke, R. Lohmann, M. Miller, C.A. Ng, S. Patton, M. Scheringer, X. Trier, L. Vierke, Z. Wang, J.C. DeWittl, *Environ. Sci. Process. Impacts* **21**, 1803 (2019).
- [2] M. Yu, E. Budiyo, H. Tuysuz, *Angew. Chem. Int. Ed.* **61**, e202103824 (2022).
- [3] S. Saddeler, G. Bendt, S. Salamon, F.T. Haase, J. Landers, J. Timoshenko, C. Rettenmaier, H.S. Jeon, A. Bergmann, H. Wende, B.R. Cuenya, S. Schulz, *J. Mater. Chem. A* **9**, 25381 (2021).
- [4] J. Huang, A.H. Clark, N. Hales, C.N. Borca, T. Huthwelker, R. Skoupy, T.J. Schmidt, E. Fabbri, *Adv. Funct. Mater.* **34**, 2405384 (2024).

## **Stendinė sesija 4**

Kvantinė optika ir kvantinė informacija,

Elektronika ir optoelektronika,

Energetikos fizika ir technologijos,

Instrumentai ir matavimai,

Technologiniai taikymai

# Sintetinis Menamas Magnetinis Laukas itin šaltiems atomams

## Imaginary Synthetic Magnetic Field for ultracold atoms

S. Alminas<sup>1</sup>, D. Burba<sup>1</sup>, T. Babelis<sup>1,2</sup>, I. B. Spielman<sup>3</sup>, G. Juzeliūnas<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>*École Polytechnique, 91120 Palaiseau, France*

<sup>3</sup>*National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD 20899, USA*

[saulius.alminas@ff.vu.lt](mailto:saulius.alminas@ff.vu.lt)

The study of charged particles in magnetic field has been a fundamental topic in condensed matter physics, underlying important phenomena such as Landau levels and the quantum Hall effect. Over the last two decades methods have been developed to simulate the synthetic magnetic and thus the Landau problem for electrically neutral ultracold atoms by applying the light fields [1]. In traditional Hermitian systems, Landau levels arise from interaction of particles with a real-valued magnetic field, which induces cyclotron motion and results in equidistant, degenerate energy levels. Recent developments have extended these ideas into non-Hermitian systems, where imaginary gauge potentials give rise to new physical effects. In particular, a recent theoretical [2] study have revealed novel topological and dynamical properties unique to non-Hermitian lattice systems. On the other hand, an experimental study [3] demonstrated a possibility to generate an imaginary vector potential for ultracold atoms. Yet such a vector potential is constant and thus does not yield a non-zero magnetic field.

Here we demonstrate how to generate for ultracold atoms an inhomogeneous imaginary vector potential corresponding a non-zero imaginary magnetic field. Subsequently we study two-dimensional dilute Bose-Einstein condensate (BEC) of ultracold atoms, such as <sup>87</sup>Rb, subjected to such a imaginary magnetic field. We show that the ultracold atom platform enables exploration of previously inaccessible regimes of non-Hermitian quantum physics. Our analysis reveals non-trivial dynamics, including a drift induced by a spatially varying loss, which is not featured in conventional Hermitian systems. The study paves a way for further theoretical and experimental study of effects of imaginary synthetic magnetic fields on ultracold atoms.

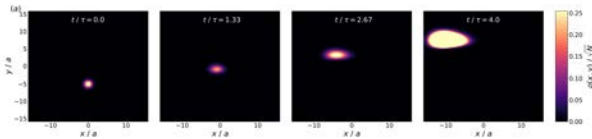


Figure 1: Evolution of atomic density  $\rho(x, y)$  for system parameters  $\mathcal{B} = 0.11$ ,  $\gamma = 0.001$ . Initial state is a Gaussian wavepacket with a nonzero transverse wavevector  $k_y = 10$ . One observes expected drift due to spatially dependent non-Hermitian terms.

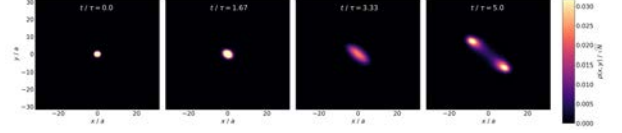


Figure 2: Evolution of atomic density  $\rho(x, y)$  for system parameters  $\mathcal{B} = 0.11$ ,  $\gamma = 0$ . Initial state is a Gaussian wavepacket with a zero transverse wavevector. One observes a splitting of a wavepacket.

Keywords: non-Hermitian, imaginary magnetic field, ultracold atoms

## References

- [1] N. Goldman, G. Juzeliūnas, P. Öhberg, and I. B. Spielman. Light-induced gauge fields for ultracold atoms. *Rep. Prog. Phys.* **77**, 126401 (2014).
- [2] T. Ozawa and T. Hayata. Two-dimensional lattice with an imaginary magnetic field. *Phys. Rev. B*, **109**, 085113, 2024.
- [3] J. Tao, E. Mercado-Gutierrez, M. Zhao, and I. Spielman. Imaginary gauge potentials in a non-hermitian spin-orbit coupled quantum gas, *arXiv:2504.08614* (2025).

# Vienfotoniai šaltiniai hBN medžiagoje kvantinių ryšių taikymams

## Single-photon sources in hBN for quantum communications applications

Tadas Paulauskas<sup>1</sup>, Edgaras Markauskas<sup>1</sup>, Julius Janušonis<sup>1</sup>, Vakarės Šilys<sup>1</sup>, Lukas Razinkovas<sup>1</sup>, Viktorija Nargelienė<sup>1</sup>

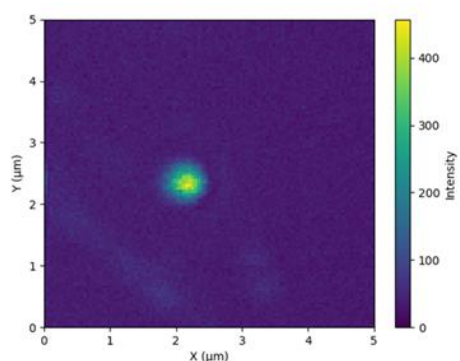
<sup>1</sup> Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva

tadas.paulauskas@ftmc.lt

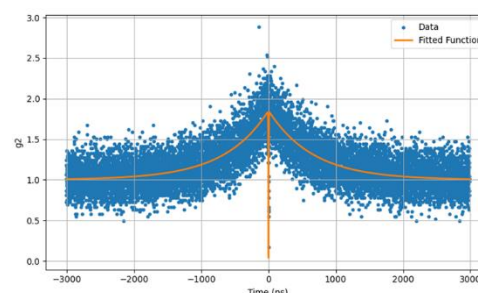
Kvantinių ryšių technologijų pažanga kritiškai priklauso nuo praktiškai pritaikomų vienfotoninių šaltinių prieinamumo. Šiame darbe demonstruojame femtosekundinio lazerio pagrindu sukurtų atominių defektų centrų heksagoniniame boro nitrido (hBN) sluoksniuose metodiką, leidžiančią generuoti ryškius vienfotoninius šaltinius. Šie šaltiniai spinduliuoja nuo matomosios iki artimosios infraraudonosios srities ir išlaiko stabilias charakteristikas kambario temperatūroje. Antros eilės koreliacijos matavimai patvirtina aukštą fotonų grynumą, o papildomi spektroskopiniai, struktūriniai ir elektronų sukinių rezonanso tyrimai, kartu su pirminiais principais grįstais tankio funkcionalo teorijos (DFT) skaičiavimais, suteikia įžvalgų apie galimas defektų atomines konfigūracijas.

Be fundamentalių defektų savybių analizės, aptariame ir prietaisų lygmens aspektus: šių vienfotoninių šaltinių integraciją į BB84 tipo kvantinio raktų paskirstymo (QKD) protokolus, jų potencialą kvantinių atsitiktinių skaičių generavimui bei mastelio didinimo galimybes įterpiančią fotonines platformas. Taip pat nagrinėjame integracijos iššūkius, susijusius su šaltinių stabilumo užtikrinimu, spektrinių savybių suderinamumu ir jų tinkamumu būsimoms kvantinio ryšio tinklų architektūroms.

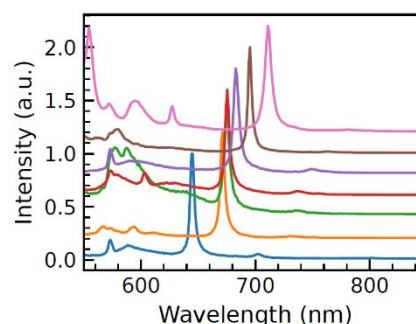
Mūsų rezultatai pabrėžia lazeriu rašytų hBN defektų potencialą kaip praktiškai pritaikomą ingredientą kvantinėse technologijose, turinčių perspektyvą tiek fundamentiniuose neklasikinės šviesos moksliniams tyrimams, tiek ir komercinėse kvantinės komunikacijos sistemose.



1 pav. Vienfotonis šaltinis hBN medžiagoje vaizduojamas skenuojančia lazerine florescencijos mikroskopija.



2 pav. Antros eilės koreliacijos funkcija,  $g^2(t)$ , indikuojanti pavienių fotonų švarumą.



3 pav. Florescencijos spektrai išmatuoti įvairiuose fs lazeriu sukurtuose atomiuose defektuose. Matomos siauros pavienių defektų juostos regimojoje dalyje.

*Reikšminiai žodžiai: vienfotoniai šaltiniai, kvantinės technologijos*

### Literatūra

- [1] Maciaszek, M.; Razinkovas, L. Blue Quantum Emitter in Hexagonal Boron Nitride and a Carbon Chain Tetramer: a First-Principles Study. *ACS Appl. Nano Mater.* 2024, 7 (16), 18979–18985. DOI: 10.1021/acsanm.4c02722.
- [2] Turiansky, M. E.; Alkauskas, A.; Van de Walle, C. G. Spinning up Quantum Defects in 2D Materials. *Nat. Mater.* 2020, 19, 487–489. DOI: 10.1038/s41563-020-0668-x.

# Magnetinio lauko kvantinių jutiklių optimizavimas

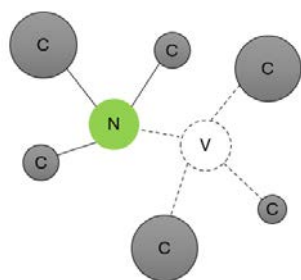
## Optimization of magnetic-field quantum sensors

Vakaris Šilys<sup>1</sup>, Julius Janušonis<sup>1</sup>, Tadas Paulauskas<sup>1</sup>

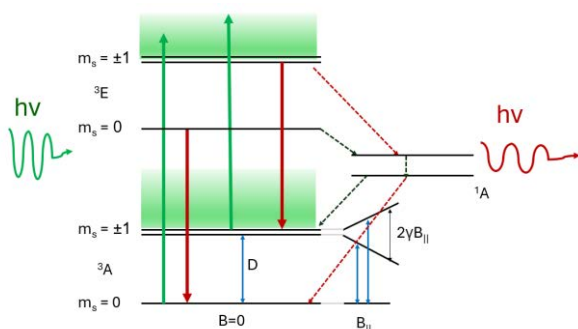
<sup>1</sup> Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva

[vakaris.silys@ftmc.lt](mailto:vakaris.silys@ftmc.lt)

Azoto–vakancijos (NV) centrai deimante tapo svarbia platforma tiksliam magnetinių laukų jutimui aplinkos sąlygomis, pasitelkiant galimybę koherentiškai kontroliuoti elektronų sukinių būsenas. [1]



### 1. Azoto-vakancijos struktūra



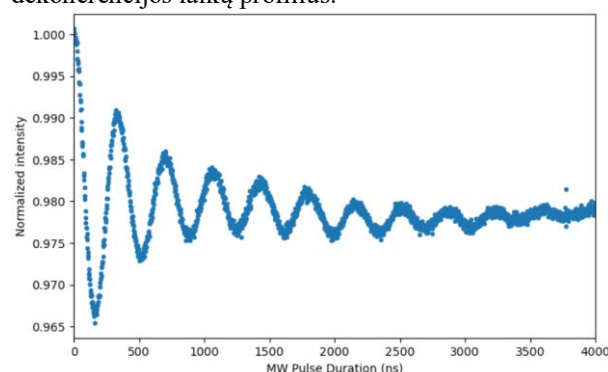
### 2. Azoto-vakancijos energijos lygmenų diagrama

Šiuose tyrimuose lyginame NV centrų koherencines savybes mikrodeimante, integruotame ant šviesolaidžio. Nagrinėdami NV centrų ansamblio atsaką nuolatinių (DC) ir kintamųjų (AC) magnetinių laukų jutime, taikant įvairias mikrobangų impulsų sekas — įskaitant Ramsey interferometriją ir dinaminį sukinių atkabinimą. Sistemingai vertindami optiškai detektuojamo magnetinio rezonanso (ODMR) signalą, Rabi osciliacijas, taip pat  $T_1$  ir  $T_2$  relaksacijos laikus, nustatome, kaip skirtingi mėginiai ir valdymo protokolai veikia koherencines savybes ir jutiklio jautrį.

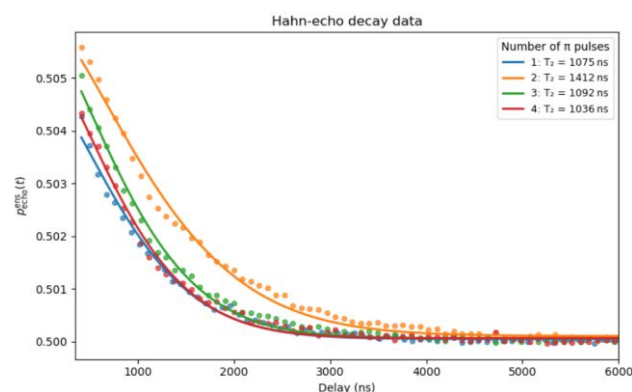
Mūsų skenuojančios konfokalinės lazerinės mikroskopijos platforma, skirta elektronų sukinių savybių tyrimams, integruoja vienfotonius detektorius ir laike koreliuotų fotonų analizę, mikrobangų bei lazerio impulsų formavimą.

Pademonstruojame optimizuotus NV centrų

ODMR spektrus vektoriniam magnetinio lauko matavimui, Rabi osciliacijas, taip pat  $T_1$  ir  $T_2$  dekoherencijos laukų profilius.



### 3. Sužadintų NV centrų Rabi osciliacijos



### 4. NV centro Hahn echo dekoherencija

Be to, parodome, kaip pritaikytos mikrobangų impulsų sekos gali padidinti mikrodeimantų jautrumą tiek nuolatiniams, tiek kintamiesiems magnetiniams laukams įvairiais eksperimentiniais scenarijais. Tai atveria galimybes itin kompaktiškai ir nebrangiai kvantinių jutiklių platformai magnetinio lauko jutimu pagrįstiems transduseriams, įskaitant temperatūros ir slėgio jutikliams bei fundamentiniams fazinių pokyčių tyrimams.

### Literatūra

[1] L Rondin *et al* 2014 *Rep. Prog. Phys.* **77** 056503 (2014).

# Atominio vandenilio kubitų molekuliname narvelyje EPR tyrimai

## EPR of atomic hydrogen qubits in molecular cage

Justinas Turčak<sup>1</sup>, Gediminas Usevičius<sup>1</sup>, Vidmantas Kalendra<sup>1</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup>, George Mitrikas<sup>2</sup>, Mantas Šimėnas<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Institute of Nanoscience and Nanotechnology, NCSR, Demokritos, Athens 15310, Greece

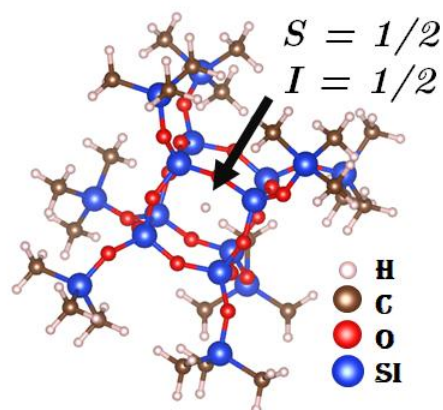
[justinas.turcak@ff.vu.lt](mailto:justinas.turcak@ff.vu.lt)

Viena iš daug žadančių kvantinių technologijų platformų yra elektrono sukinių kubitai kieto kūno sistemose [1]. Jie išsiskiria ilgu koherentiškumo laiku (iki sekundės) bei patogiu valdymu mikrobangų impulsais. Šiame darbe tiriama atominio vandenilio sukinių POSS (poliedrinio oligomerinio silseskvioksano) narvelyje (žr. 1 pav.). Šios molekulės struktūra užtikrina pakankamą elektrono sukinių izoliaciją nuo išorinių sąveikų [2], todėl tikimasi, kad ši medžiaga leis pasiekti ilgą koherentiškumą laiką, būtiną kvantinės atminties realizacijai.

Šio darbo tikslas – naudojant EPR spektroskopiją ištirti atominio vandenilio kubitų dekoherentiškumą POSS narvelyje. Impulsiniais metodais buvo tiesiogiai nustatyti koherentiškumo laikai plačiame temperatūrų diapazone, nuo 10 K iki 300 K. Didžiausias nustatytas koherentiškumo laikas – 13(1)  $\mu$ s – stebėtas 200 – 300 K temperatūrų intervale. Esant žemesnėms nei 200 K temperatūroms, sukinių kvantinę būseną veikia metilo grupių rotacijos [3], todėl koherentiškumas sumažėja iki  $\sim 1$   $\mu$ s. Dar žemesnėse temperatūrose šios rotacijos sustoja, todėl koherentiškumas vėl ilgėja ir artėja prie aukštesnėse temperatūrose stebimos vertės. Nustatyta, kad tirtame temperatūrų intervale sukinių-gardelės relaksacija neriboja koherentiškumo trukmės.

Atlikta koherentiškumo laiko matavimų Fourier analizė parodė, kad vandenilio elektronas sąveikauja su aplinkiniais protonais. Modeliuojant sukinių relaksaciją dėl sąveikos su protonais naudojant klasterių koreliacijos metodą, buvo įvertintas koherentiškumo laikas – 15,3  $\mu$ s, artimas eksperimentiškai gautai vertei.

Matavimai buvo atlikti trijuose dažnių ruožuose: su standartiniu Bruker ELEXSYS E580 spektrometru – X (9,7 GHz) ir Q (34 GHz) mikrobangų ruožuose, o su specialiai mažesnio dažnio eksperimentams skirtu, sukonstruotu EPR spektrometru – L (1,5 GHz) mikrobangų ruože. Platus dažnių pasirinkimas leido įvertinti ar atsiradusi galimybė priartėti prie žymaus vandenilio 1,42 GHz laikrodinio šuolio pagerina koherentiškumo laiką, kaip buvo nustatyta kitose sistemose [4]. Laikrodiniuose šuoliuose sukinyje pirmuoju artiniu yra nejautrus magnetinio lauko perturbacijoms, todėl tokiais atvejais koherentiškumą riboja tik sukinių-gardelės relaksacija, kuri šiai sistemai yra 100  $\mu$ s eilės 200 – 300 K temperatūroje.



1 pav. POSS molekulė su atominiu vandeniliu centre.

*Reikšminiai žodžiai:* sukinių kubitai, kvantinis koherentiškumas, laikrodinis šuolis, impulsinė EPR spektroskopija

### Literatūra

- [1] A. Gaita-Arino, F. Luis, S. Hill, and E. Coronado, „Molecular spins for quantum computation“, *Nature Chemistry*, 04 2019, **11**, 301-309.
- [2] G. Mitrikas and S. Menenakou, „Electron spin relaxation properties of atomic hydrogen encapsulated in octavinyl POSS cages“, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2022, **22**, 15751-15758.
- [3] G. Mitrikas, „Encapsulated Atomic Hydrogen in Octamethyl-POSS Cages: A Pulsed EPR Study“, *ChemPlusChem*, 2024, **89**, e202400146.
- [4] G. Wolfowicz, A. M. Tyryshkin, R. E. George, *et al.*, „Atomic clock transitions in silicon-based spin qubits“, *Nature Nanotechnology*, June 2013, **8**, 561-564.

# Lokalizuotos harmoninės emisijos CMOS sub-THz šaltinyje tyrimas AFM ir SNOM metodais

## Investigation of Localized Harmonic Emission in a CMOS Sub-THz Emitter by AFM and SNOM

Maksimas Anbinderis<sup>1,2</sup>, Elham Talvari<sup>3</sup>, Jakob Holstein<sup>3</sup>, Hartmut G. Roskos<sup>3</sup>, and Alvydas Lisauskas<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Institute of Applied Electrodynamics and Telecommunications, Vilnius University, Vilnius, 10257, Lithuania

<sup>2</sup>Center for Physical Science and Technology, Vilnius, 10257, Lithuania

<sup>3</sup>Physikalisches Institut, Goethe-University Frankfurt am Main, Frankfurt am Main, 60438, Germany

[maksimas.anbinderis@ff.vu.lt](mailto:maksimas.anbinderis@ff.vu.lt)

The scattering-type scanning near-field optical microscopy (s-SNOM) technique achieves nanoscale resolution across a wide electromagnetic range from ultraviolet to microwave [1]. Conventional s-SNOM systems in the terahertz (THz) regime typically rely on bulky and costly optoelectronic sources and detectors, but recent work has shown that purely electronic approaches are feasible [2]. Cost-efficiency can be further enhanced by chip-level integrated solutions [3] and compact voltage-controlled oscillators (VCOs) for continuous-wave (CW) THz emission [4]. Active electronic circuits might additionally simplify scattering-type near-field microscopy by eliminating the need for external radiation coupling.

Here, we present near-field characterization of an active sub-THz VCO fabricated in a 65 nm CMOS FET process [5]. A die micrograph (Fig. 1a) shows the VCO core co-integrated with antennas for efficient radiation coupling. Structural information was obtained by atomic force microscopy (AFM) (Fig. 1b), and SNOM was used to probe harmonic emission with nanoscale resolution. The s-SNOM measurements (Fig. 1c) confirmed the extraction of radiation at first, second, and third harmonics similar to systems that rely on the radiation from external sources. Importantly, the detected signals extended beyond the active device region and were also observed across passive parts of the chip, indicating that radiation propagation is not limited to the nominally active core. This observation opens new possibilities for studying substrate effects, long-range wave propagation, and chip-level interactions in CMOS THz circuits, as well as for mapping local dielectric properties on a sub-wavelength scale. To complement these findings, photocurrent measurements (Fig. 1d) provided a direct electrical readout of the nonlinear response of the active circuit, isolating the device core. Together, SNOM and photocurrent probing deliver a comprehensive picture of the emitter: the global radiative response and localized electronic current dynamics.

These results highlight the potential of CMOS-based emitters and detectors for non-invasive nanoscale characterization in future photonics and electronics technologies.

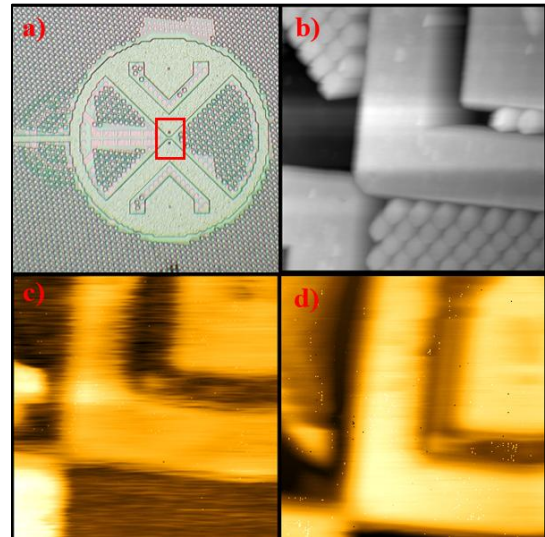


Fig. 1. a) Die microphotograph of the emitter, b) AFM of the bow-tie antenna center, c) s-SNOM mapping of third-harmonic emission, d) photocurrent response.

**Keywords:** CMOS VCO emitter, sub-terahertz radiation, SNOM, third-harmonic generation, photocurrent detection.

### Literature

- [1] F. Keilmann and R. Hillenbrand, "Near-field nanoscopy by elastic light scattering from a tip," in *Nano-Optics and Near-Field Optical Microscopy*, A. V. Zayats and D. Richards, eds. (Artech House, 2009).
- [2] C. Liewald et al., All-Electronic Terahertz Nanoscopy, *Optica* 5, 159–163 (2018).
- [3] M.M. Wiecha et al., Antenna-Coupled Field-Effect Transistors as Detectors for Terahertz Near-Field Microscopy, *Nanoscale Adv.* 3, 1717–1724 (2021).
- [4] D.B. But et al., Sub-Terahertz Feedback Interferometry and Imaging With Emitters in 130 nm BiCMOS Technology, *Sci. Rep.* 13, 16161 (2023).
- [5] K. Ikamas et al., All-Electronic Emitter–Detector Pairs for 250 GHz in Silicon, *Sensors* 21, 5795 (2021).

# THz srities metalėšiai pagaminti naudojant laidžius polimerus

## Conductive polymer based THz range metalenses

Simonas Driukas<sup>1</sup>, Rusnė Ivaškevičiūtė-Povilauskienė<sup>1</sup>, Vladislavas Čižas<sup>1</sup>, Linas Labanauskas<sup>2</sup>, Ernestas Nacius<sup>3</sup> and Gintaras Valušis<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Organinės chemijos skyrius, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio Al. 3, LT-10257, Vilnius, Lietuva

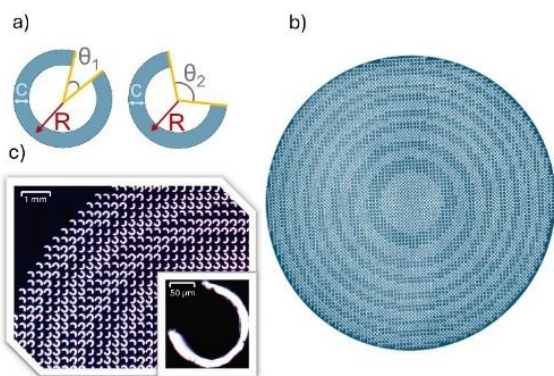
<sup>3</sup>Fundamentinių tyrimų skyrius, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio Al. 3, LT-10257, Vilnius, Lietuva  
[simonas.driukas@ftmc.lt](mailto:simonas.driukas@ftmc.lt)

Spartus terahercinių (THz) technologijų vystymasis ir perspektyvios jų pritaikymo galimybės komunikacijos, saugumo bei kitose pramonės srityse skatina didelę kompaktiškų fotonikos komponentų paklausą. Vienas patrauklių sprendimų – metalėšiai, kurie, priešingai nei tradiciniai lėšiai, yra plokšti ir gali būti lankstūs.

Paprastai metalėšiai gaminami iš laidžių metalų, siekiant kuo geresnės THz lauko sąveikos su metapaviršiumi.

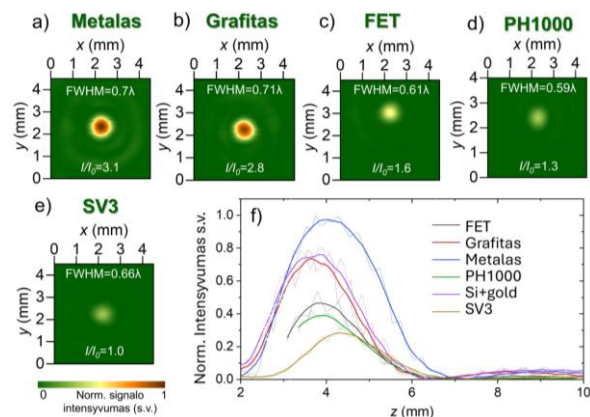
Šiame darbe nagrinėjamas alternatyvus metodas – kaip pagrindinė medžiaga metalėšių gamybai naudojami laidūs polimerai. Tai suteikia keletą esminių pranašumų – polimerai gali būti liejami iš tirpalų ant lankstaus plastikinio pagrindo, o tai leidžia efektyviai juos integruoti į tekstilę ar kitose taikymo srityse, kuriose reikalingas mechaninis lankstumas.

Metalinių lėšių gamybai buvo parinkti trys skirtingi laidūs polimerai – Clevios™ SV3, Clevios™ PH1000 ir FET. Palyginimui į tyrimą buvo įtraukti ir metalėšiai pagaminti iš metalo bei grafito.



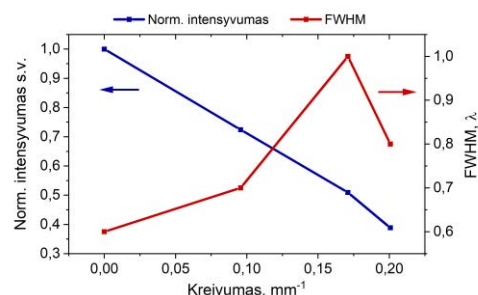
1 pav. Metalėšio dizainas: (a) Vieno C-tipo metaelemento schema. R žymi spindulį, c – storį, o  $\theta_1$  ir  $\theta_2$  – tarpų kampus. (b) Pagaminto metalėšio bendras vaizdas. (c) Ketvirtis FET metalėšio, kur įterptame vaizde parodytas vienas C metaelementas.

Metalėšių fokusavimo savybės buvo tiriamos naudojant nuolatinės veikos pluošto analizės sistemą, kurioje detektorius judinamas mechaninėmis ašimis, siekiant sukurti 3D pluošto profilį. Gautieji profiliai, fokuso dėmės pusplėčiai bei intensyvumo santykiai su ateinančia krentančia pavaizduoti 2 pav.



2 pav. Skirtingais metalėšiais gauti pluošto profiliai židinio taške: (a) metalo, (b) grafito, (c) FET, (d) PH1000 ir (e) SV3 metalėšių. (f) Visų metalėšių lėšių intensyvumo profiliai išilgai optinės ašies z.

Pluošto profiliavimo eksperimentas su FET bandiniu buvo pakartotas metalėšį po truputi lenkiant. Deformacijos stiprumas buvo išreikštas kreivumo parametru, apibrėžtu kaip lenkimo spindulio R atvirkštinė reikšmė. Rezultatai pavaizduoti 3 pav.



3 pav. Intensyvumo ir pusplėčio (FWHM) pokytis didėjant kreivumui. Kairioji ašis žymi intensyvumo skalę, o dešinioji – FWHM.

Apibendrinant rezultatus, metalėšiai pagaminti iš laidžių polimerų pasirodė šiek tiek prasčiau negu, kontroliniai metalo ir grafito bandiniai. Fokuso dėmės intensyvumo santykis su krentančia spinduliuote buvo kur kas mažesnis. Nepaisant to, gauti polimerinių metalėšių pusplėčiai buvo mažesni. Taip pat buvo pademonstruotas efektyvus jų fokusavimas net metalėšį sulenkus.

*Reikšminiai žodžiai: metalėšiai, laidūs polimerai, terahercai.*

# Derinamų InAsSb ir T2SL heterostrukturų taikymas ilgbangės infraraudonosios spinduliuotės aptikimui

## Long-Wave Infrared Detection Using Tunable InAsSb and T2SL Heterostructures

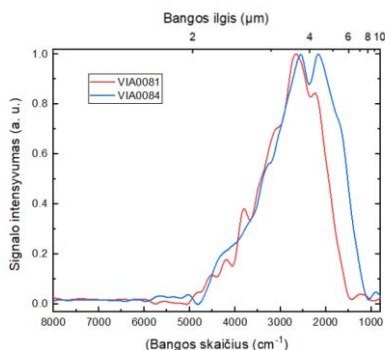
Karolis Galvanauskas<sup>1</sup>, Giedrė Čepurnaitė<sup>1</sup>, Jaunius Berškys<sup>1</sup>, Jan Devenson<sup>1</sup>

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

[karolis.galvanauskas@ftmc.lt](mailto:karolis.galvanauskas@ftmc.lt)

Ilgabangės infraraudonosios (LWIR) spinduliuotės detektorių rinkoje ilgą laiką dominuoja gyvsidabrio kadmio telurido (MCT) technologija. Tačiau gyvsidabrio toksiskumas skatina ieškoti našumu nenusileidžiančių, tačiau aplinkai saugesnių alternatyvų. Šiame pranešime pristatomi dviejų skirtingų stibidų pagrindu sukurtų fotodetektorių platformų kūrimo ir tyrimo rezultatai, kurie atveria kelią MCT detektorių pakeitimui.

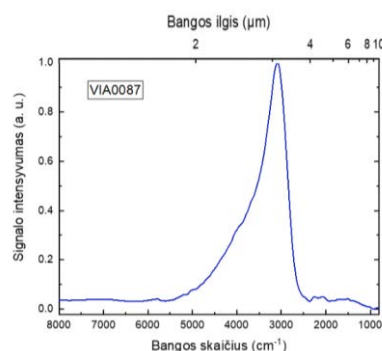
Pirmasis metodas yra paremtas InAsSb trijų komponentų lydinio fotodiodais. Mūsų tyrimai parodė, kad molekulinio pluoštelio epitaksijos (MPE) metu tiksliai valdant As ir Sb srautų santykį ( $P_{Sb}/P_{As}$ ) galima efektyviai keisti stibio (Sb) koncentraciją užaugintuose sluoksniuose nuo ~9% iki >20%. Fotoluminescencijos (PL) matavimai patvirtino, kad didėjant Sb kiekiui, draustinių energijų tarpas siaurėja ir pasiekia vertes, mažesnes nei 0.2 eV, o PL signalas nusidriekia į LWIR sritį, viršijančią 8  $\mu\text{m}$  bangos ilgį (1 pav.). Ši platforma leidžia paprastai ir efektyviai derinti detektorių spektrinį jautrį.



1 pav. InAsSb bandinių (VIA0081-VIA0084) fotoluminescencijos spektrai, rodantys bangos ilgio poslinkį didinant Sb koncentraciją sluoksniuose.

Antrasis, sudėtingesnis metodas, naudoja InAs/GaSb II-o tipo supergardeles (T2SL). Šios heterostrukturės suteikia daugiau lankstumo projektuojant prietaisus ir leidžia pasiekti mažesnes tamsines sroves. MPE metodu sėkmingai užauginta sudėtinga 7 pakopų InAs/GaSb T2SL tarpuostinio kaskadinio fotodetektoriaus (ICIP) struktūra (VIA0087). Didelės skiriamosios gebos rentgeno spindulių difrakcijos (HR-XRD) matavimais nustatytas supergardelės periodas ( $69 \pm 1 \text{ \AA}$ ) idealiai atitiko projekcinį ( $69 \text{ \AA}$ ), kas patvirtina aukštą MPE proceso tikslumą. Kambario temperatūroje išmatuotas

šio prietaiso fotovoltinis atsakas demonstravo itin stiprų signalą ties ~3.2  $\mu\text{m}$  (2 pav.), kuris buvo apie 110 kartų stipresnis nei InAsSb struktūrų signalas. Tai įrodo efektyvų kaskadinio stiprinimo veikimą, nors atsako smailė ir neatitiko tikslinio LWIR dizaino, kas siejama su sandūrų įtaka ir aukštesnės eilės optiniais šuoliais.



2 pav. T2SL ICIP bandinio (VIA0087) fotovoltinio atsako spektras kambario temperatūroje, rodantis stiprų signalą MWIR srityje.

Apibendrinant, abi tirtos stibidų platformos – derinami InAsSb fotodiodai ir T2SL ICIP struktūros – demonstruoja didelį potencialą ateities IR jutiklių kūrimui ir yra perspektyvios, aplinkai saugios alternatyvos MCT technologijai.

*Reikšminiai žodžiai: stibidai, fotodetektoriai, ilgbangis infraraudonasis diapazonas, InAsSb, T2SL, molekulinio pluoštelio epitaksija.*

### Literatūra

- [1] E. A. Plis, Advances in Electronics 2014, 831397 (2014).
- [2] A. Rogalski, Infrared Physics & Technology 111, 103522 (2020).

# Grafeno/h-BN/Si sandūrų žemadažnio triukšmo charakteristikos

## Low-frequency noise characteristics of graphene/h-BN/Si junctions

Ingrida Pliaterytė<sup>1</sup>, Justinas Glemža<sup>1</sup>, Šarūnas Meškiniš<sup>2</sup>, Rimantas Gudaitis<sup>2</sup>, Šarūnas Jankauskas<sup>2</sup>, Asta Guobienė<sup>2</sup>, Andrius Vasiliauskas<sup>2</sup>, Sandra Pralgauskaitė<sup>1</sup>, Jonas Matukas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas

[ingrida.pliateryte@ff.stud.vu.lt](mailto:ingrida.pliateryte@ff.stud.vu.lt)

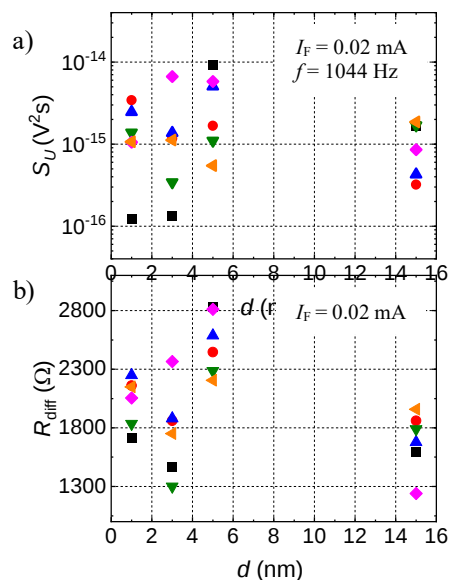
Grafenas pasižymi patraukliomis elektrinėmis, optinėmis ir šiluminėmis savybėmis, dėl kurių yra aktyviai siekiama jį pritaikyti įvairiuose elektronikos ir optoelektronikos prietaisuose. Grafeno/Si Šotkio sandūros yra tiriamos dėl potencialių taikymų saulės elementuose, dujų jutikliuose, fotodetektoriuose ir baristoriuose [1]. Vis dėlto, šių sandūrų taikymą vis dar riboja įvairios problemos, pavyzdžiui, stipriai svyruojančios neidealumo koeficiento vertės (~1 – 30), kurias gali lemti įvairių defektų sandūroje poveikis [2]. Tarp grafeno ir silicio įterpiant heksagoninio boro nitrido (h-BN) sluoksnį siekiama pasyvuoti laisvuosius ryšius silicio paviršiuje [3], tačiau toks įterpimas savo ruožtu lemia sudėtingesnę įtaiso sandarą, todėl yra reikalingas išsamus įterpto h-BN poveikio sandūros kokybei ir krūvio pernašos ypatumams tyrimas. Tam puikiai tinka žemadažnio triukšmo tyrimai, kurie yra pasitelkiami kaip jautrus prietaisų kokybės, defektingumo ir patikimumo įvertinimo įrankis, teikiantis žinių ir apie fizikinius procesus, vykstančius tiriamose sandūrose. Grafeno/h-BN/Si sandūrų charakterizavimas pasitelkiant žemadažnio triukšmo spektroskopiją dar nebuvo aprašytas literatūroje.

Šiame darbe buvo tirtos grafeno/h-BN/Si sandūrų su skirtingais h-BN sluoksnio storiais (1 – 15 nm) žemadažnio triukšmo charakteristikos, tekant tiesioginei ir atgalinei srovei, bei analizuotos voltamperinės charakteristikos plačiame temperatūrų intervale (90 – 295 K). Darbo tikslas buvo įvertinti h-BN sluoksnio storio įtaką žemadažnio triukšmo charakteristikoms ir prietaiso veikimui bei nustatyti vyraujančią krūvio pernašos mechanizmą grafeno/h-BN/Si sandūrose.

Tirtos sandūros buvo pagamintos nusodinant h-BN sluoksnį ant n-Si substrato didelės galios impulsinio magnetroninio dulkinimo (HiPIMS) būdu, o grafenas buvo tiesiogiai sintezuotas ant h-BN sluoksnio mikrobange plazma stimuliuoto cheminio garinio nusodinimo (PECVD) būdu.

Visos tirtos sandūros pasižymėjo  $1/f$  arba  $1/f^\alpha$  pavidalo įtampos fliktuacijų spektriniais tankiais, o kai kuriuose bandiniuose tekant tam tikroms srovėms stebėti ir Lorencio tipo spektrai. Tekant didelėms srovėms, daugumai bandinių buvo būdinga srovės fliktuacijų spektrinio tankio priklausomybė nuo srovės kaip  $\sim I^\gamma$ , kur  $\gamma > 2$ , siejama su grūdelių ribų (angl. grain boundaries), esančių grafeno ir h-BN sluoksniuose ir atsakingų už triukšmo augimą, poveikiu. Žemadažnio triukšmo bei temperatūrinių voltamperinių charakteristikų analizė parodė Pulo-Frenkelio (angl. Poole-Frenkel) emisijos

vyravimą storiausių h-BN sluoksnių (15 nm) bandiniuose, tekant didelėms srovėms, ir šio krūvio pernašos mechanizmo indėlio mažėjimą esant plonesniam h-BN sluoksniui. Statistinio tyrimo metu nustatyta, kad intensyviausiu žemadažniu triukšmu ir didžiausia diferencialine varža pasižymėjo 5 nm h-BN sluoksnio storio sandūros (1 pav.). Prastesnę 5 nm h-BN sluoksnio storio sandūrų kokybę patvirtino šioms bandiniams būdingas silpniausias fotoatsakas, juos apšvietus UV ir IR spinduliuote.



1 pav. Grafeno/h-BN/Si sandūrų įtampos fliktuacijų spektrinio tankio (a) ir diferencialinės varžos (b) priklausomybės nuo h-BN sluoksnio storio;  $d$  – h-BN sluoksnio storis.

*Reikšminiai žodžiai: fliktuacijos, heksagoninis boro nitridas, grafeno/h-BN/Si sandūra, žemadažnis triukšmas.*

### Literatūra

- [1] Y. An, A. Behnam, E. Pop, G. Bosman and A. Ural, J. Appl. Phys. **118**(11), 114307 (2015).
- [2] H. Wong, M. A. Anwar and S. Dong, Results Phys., **29**, 104744 (2021).
- [3] C. Wang, S. K. Behura and V. Berry, Semicond. Sci. Technol. **35**, 075020 (2020).

# Artimojo infraraudonojo spektro spinduliuotės šaltinių su GaAsBi kvantinėmis duobėmis žemo dažnio triukšmo charakteristikos

## Low Frequency Noise of GaAsBi QW based NIR Light Sources

Sandra Pralgauskaitė<sup>1</sup>, Ingrida Pliaterytė<sup>1</sup>, Lukas Dundulis<sup>1</sup>, Aivaras Špokas<sup>2</sup>, Andrea Zelioli<sup>2</sup>, Mindaugas Kamarauskas<sup>2</sup>, Andrius Bičiūnas<sup>2</sup>, Justinas Glemža<sup>1</sup>, Bronislovas Čechavičius<sup>2</sup>, Renata Butkutė<sup>2</sup>, Jonas Matukas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

[sandra.pralgauskaite@ff.vu.lt](mailto:sandra.pralgauskaite@ff.vu.lt)

Artimojo infraraudonojo spektro spinduliuotė yra dažnai naudojama aplinkos ir biomediciniuose jutikliuose, pvz., pulsoksimetruose neinvaziniam kraujo įsotinimo deguonimi nustatymui. Atspindžio principu veikiantiems pulsoksimetrui reikalingi šaltiniai, kurių spinduliuotės skverbties per minkštuosius audinius gylis būtų vienodas, o sugertis hemoglobine būtų skirtinga. Siūloma naudoti 800 nm ir 1100 nm spinduliuotę. 1100 nm spinduliuotei naudojami GaAsBi šviesos ir lazeriniai diodai.

Bismidiniai sluoksniai yra auginami žemesnėje (<420 °C) temperatūroje. Tai lemia didesnę taškinių defektų tankį darinyje ir didesnę paviršiaus šiurkštumą [1]. Svarbu ištirti tokių defektų ir struktūrinių netolygumų įtaką GaAsBi kvantinių duobių pagrindu kuriamų infraraudonosios spinduliuotės šaltinių charakteristikoms ir ilgalaikiškumui. Čia pasitarnauja žemo dažnio triukšmo charakteristikos, kurios yra labai jautrios įvairiems struktūriniams defektams ir netobulumams, o jų tyrimai leidžia atskleisti ir suprasti GaAsBi kvantinių darinių pagrindu pagamintų šaltinių veikos ypatumų priežastis [2].

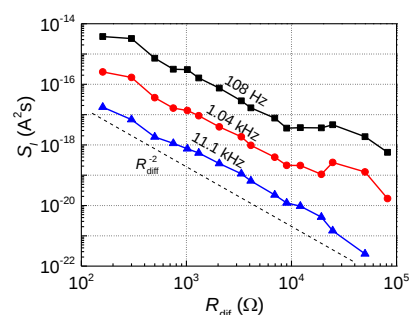
Šiame darbe pristatome išsamų GaAsBi kvantinių duobių pagrindu sukurtų šviesos ir lazerinių diodų žemo dažnio triukšmo charakteristikų tyrimą, kurio tikslas buvo išsiaiškinti triukšmo priežastis šiuose dariniuose bei jų įtaką diodų efektyvumui ir ilgalaikiškumui.

Tirtieji įtaisai buvo šviesos ir lazeriniai diodai su 3-5 GaAsBi kvantinėmis duobėmis aktyviojoje srityje. Dariniai buvo užauginti naudojant molekulinį pluoštų epitaksiją ant *n* tipo GaAs padėklo [3]. Šviesos šaltinių spinduliuotės bangos ilgis yra apie 1100–1200 nm. Triukšminė spektroskopija atlikta žemo dažnio srityje (10 Hz iki 100 kHz).

Tirtųjų diodų elektrinių fliktuacijų spektrai susideda iš  $1/f$ ,  $1/f^\alpha$  ir Lorencio tipo komponentų tiek tekančios tiesioginei, tiek atvirkštinei srovei.  $1/f$  ir  $1/f^\alpha$  tipo fliktuacijos yra nulemtos daugelio panašaus intensyvumo generacinių ir rekombinacinių vyksmų superpozicijos per krūvininkų pagavimo centrus, kurių charakteringoji trukmė yra plačiai pasiskirsčiusi.

Įprastai *pn* diodų įtampos fliktuacijų spektrinis tankis mažėja proporcingai tekančios srovės didėjimui. Kai kuriems tirtiesiems bandiniams buvo stebėtas triukšmo išaugimas tekant tam tikro stiprio srovei. Šiems bandiniams taip pat buvo stebima didesnė atgalinė srovė. Be to srovės fliktuacijų spektrinio tankio mažėjimas proporcingai diferencialinės varžos kvadratui (1 pav.)

rodo srovės nuotėkio kanalų egzistavimą. Išmatuota gana didelė atvirkštinė srovė ir intensyvios  $1/f$  fliktuacijos rodo, kad tokiuose dariniuose yra defektų, sudarančių mažos varžos srovės nuotėkio kanalus, lygiagrečius aktyviajai sričiai.



1 pav. Srovės fliktuacijų spektrinio tankio priklausomybė nuo diodo diferencialinės varžos (kambario temperatūros matavimai šviesos diodui).

Tam tikroms srovės ir temperatūros vėrtėms, buvo užregistruoti Lorencio tipo triukšmo spektrai, rodantys intensyvių generacinių ir rekombinacinių vyksmų, per šiomis veikimo sąlygomis aktyvius krūvininkų pagavimo centrus. Žemo dažnio triukšmo spektroskopija parodė, kad tirtiems GaAsBi kvantiniams dariniams yra būdingas centras su aktyvacijos energija apie (0,31–0,33) eV. Ankstesni mūsų darbai parodė, kad žemesnė GaAsBi sluoksnių augimo temperatūra lemia tokių centrų formavimąsi GaAsBi kvantinių duobių ir barjerų arba tarpinių sluoksnių sąlytyje, kurie veikia kaip šuntas diodo diferencialinei varžai [4]. Dėl tokio srovės perskirstymo sumažėja aktyviają sritimi tekančios srovės ir spinduliuotės efektyvumas. Taip pat nuotėkio srovė gali trumpinti įtaiso gyvavimo trukmę.

*Reikšminiai žodžiai: fliktuacijos, GaAsBi, kvantinės duobės, lazerinis diodas, šviesos diodas, triukšmas.*

### Literatūra

- [1] J. Puustinen, J. Hilska, and M. Guina, J. Cryst. Growth **511**, 33–41 (2019).
- [2] J. Glemža, V. Palenskis, S. Pralgauskaitė, et al., Infrared Phys. & Technol. **91**, 101–106 (2018).
- [3] A. Špokas, A. Zelioli, A. Bičiūnas, et al., Micromachines **16**, 506 (2025).
- [4] J. Glemža, A. Špokas, A. Zelioli, et al., Infrared Physics & Technology **147**, 105794 (2025).

# THz vaizdinimo kokybės priklausomybė nuo Gauso, Beselio ir Airy lęšių kombinacijų

## Dependence of THz Imaging Quality on Gaussian, Bessel, and Airy Lens Combinations

Kasparas Stanaitis<sup>1,2</sup>, Lukas Stacevičius<sup>1,2</sup>, Vladislovas Čižas<sup>1</sup>, Ignas Grigelionis<sup>1</sup>, Linas Minkevičius<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius

[kasparas.stanaitis@ftmc.lt](mailto:kasparas.stanaitis@ftmc.lt)

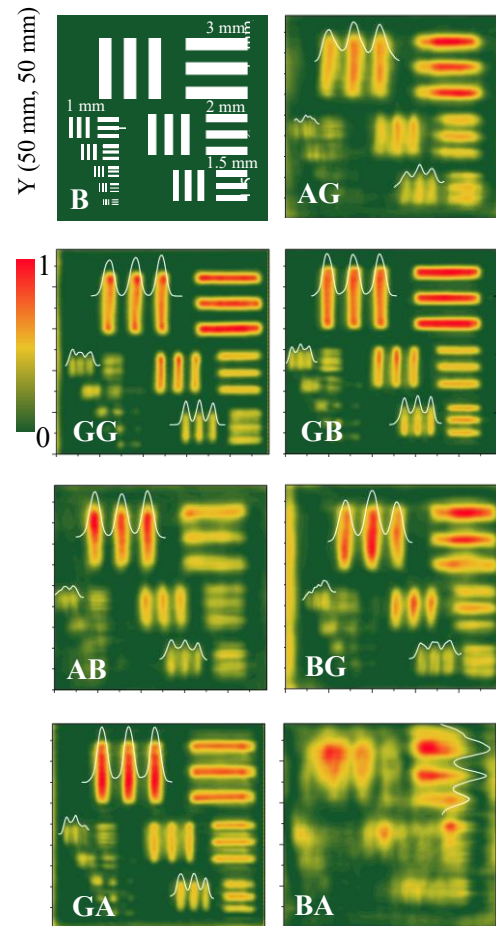
Terahercinis (THz) vaizdinimas – sparčiai besivystanti fotonikos sritis, leidžianti analizuoti objektus ir medžiagas jų nepažeidžiant. Skirtingai nei rentgeno spinduliuotė, THz bangos nepasižymi jonizuojančiu poveikiu, todėl yra gerokai saugesnės. Ši spinduliuotė išlieka skvarbi daugelyje dielektrinių medžiagų, tokių kaip polimerai, tekstilė ar popierius. Dėl šių savybių ši technologija vis dažniau pritaikoma medicinos, saugumo, medžiagų analizės ir kokybės kontrolės srityse [1].

Vienas iš iššūkių – tinkamų optinių komponentų pasirinkimas ir jų išdėstymas sistemoje. Šiame darbe buvo gaminami Gauso, Beselio ir Airy pluoštus formuojantys lęšiai. Šiam tikslui naudotas ekstruzinis 3D spausdinimas iš smūgiams atsparaus polistireno (angl. HIPS – High Impact Polystyrene), kuris pasižymi geromis optinėmis savybėmis THz ruože [2] bei yra lengvai spausdinamas.

Pagaminti lęšiai buvo sistemingai išdėstomi taip, kad sufokusuotų ir surinktų spinduliuotę į standartinį vaizdinimo taikinį (USAF 1951) (1 pav.). Naudotos septynios skirtingos lęšių kombinacijos, o kiekvienai iš jų įvertinta moduliacijos perdavimo funkcija (MTF) (sistemos kontrasto rodiklis) ir vidutinis kvadratinis nuokrypis (MSE) (vaizdo kokybės įvertis) [3]. Šie dydžiai įvertinti tiek objektui esant lęšių židinyje, tiek įvedus skirtingo lygio išfokusavimą. Šis eksperimentas leido išskirti optimalias sistemos veikimo sąlygas su skirtingomis lęšių kombinacijomis.

Rezultatai parodė, jog skirtingų lęšių panaudojimas ir išdėstymas turi įtaką THz vaizdinimo kokybei. Klasikinis Gauso-Gauso lęšių derinys užtikrina aukščiausią vaizdo kokybę, tačiau buvo itin jautrus net mažiausioms sistemos suvedimo ir išfokusavimo paklaidoms. Tuo tarpu Beselio lęšio taikymas spinduliuotės surinkimui pasirodė esantis optimalus, nes ženkliai sumažino sistemos jautrumą suvedimo netikslumams ir išfokusavimui. Dėl geros vaizdo kokybės objektui nesant židinyje Beselio lęšis taip pat yra labiau tinkamas storų objektų vaizdinimui. Naudojant Airy lęšį, itin gero kontrasto gauti nepavyko, tačiau lenkto pluošto pavidalo dėka atsiveria galimybė vaizdinti objektus dalinai užstotus kliūtis.

Apibendrinant galima teigti, kad THz optinių sistemų kokybę iš esmės lemia pasirinktų lęšių tipas bei jų tarpusavio padėtis. Gauti rezultatai rodo, jog tinkamai parinkus lęšių kombinacijas galima pagerinti vaizdinimo kontrastą ir užtikrinti didesnę sistemos stabilumą.



1 pav. Viršuje kairėje – THz ruožui modifikuotas USAF 1951 rezoliucijos taikinis, skirtas vaizdinimo kokybės įvertinimui. Kiti paveikslėliai – USAF taikinio vaizdinimo rezultatai esant skirtingoms lęšių kombinacijoms. Pirma raidė nurodo fokusuojantį lęšį, antra – surenkantį.

*Reikšminiai žodžiai: terahercai, vaizdinimas, 3D spausdinimas.*

### Literatūra

- [1] G. Valušis, A. Lisauskas, H. Yuan, W. Knap, and H.G. Roskos, *Sensors* 21, 4092 (2021).
- [2] K. Stanaitis, K. Redeckas, A. Bielevičiūtė, M. Bernatonis, D. Jokubauskis, V. Čižas, and L. Minkevičius, *Lith. J. Phys.* 63 (2023).
- [3] K. Stanaitis, V. Čižas, A. Bielevičiūtė, I. Grigelionis, and L. Minkevičius, *Sensors* 25, 131 (2024).

# GeS kristalinių plonų sluoksnių formavimas optoelektronikos prietaisams

## Crystalline GeS thin-films synthesis for optoelectronics

Andrej Vedernikov<sup>1,2</sup>, Rokas Kondrotas<sup>2</sup>, Vidas Pakštas<sup>2</sup>, Audrius Drabavičius<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Naugarduko g. 24, 03225 Vilnius

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Medžiagų struktūrinės analizės skyrius, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

[andrej.vedernikov@ftmc.lt](mailto:andrej.vedernikov@ftmc.lt)

Šiuolaikinėje optoelektronikoje fotodetektoriai yra esminiai komponentai, naudojami telekomunikacijose, vaizdinimo technologijose, medicininėje diagnostikoje bei aplinkos stebėsenos sistemose. Tradiciniai puslaidininkiniai detektoriai, paremti Si ar InGaAs junginiais, susiduria su fundamentaliais apribojimais – siauru spektro jautrumu, ribotu draustinės juostos valdomumu ir dideliu triukšmu esant silpnam apšvietimui. Todėl pasaulinėje mokslo bendruomenėje aktyviai ieškoma naujų medžiagų, galinčių užtikrinti platesnį spektrinį jautrumą, didesnę jautrį bei draugiškumą aplinkai.

Pastarąjį dešimtmetį itin daug dėmesio skiriama dvimatėms (2D) medžiagoms, kurios dėl savo sluoksniuotos struktūros pasižymi unikalėmis elektroninėmis ir optinėmis savybėmis: aukštu sugerties koeficientu ir krūvininkų judriu, bei mechaninėmis savybėmis kaip atsparumas ir lankstumas. Vis dėlto tradicinių 2D prietaisų gamyba remiasi rankiniu mikrokristalų perkėlimu ant elektrodų sistemos - tai yra sudėtingas ir nepritaikomas masinei gamybai procesas. Dėl to ypatingą svarbą įgyja polikristalinių, itin horizontaliai orientuotų 2D plonųjų sluoksnių sintezė, nebrangiais metodais.

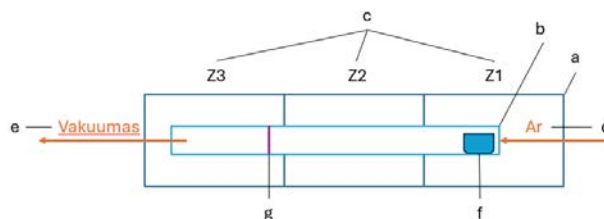
Viena iš daug žadančių medžiagų šioje srityje yra germanio sulfidas (GeS) – IV–VI grupės sluoksniuotas puslaidininkis. GeS yra p-tipo, turintis tiesioginį ~1,6 eV draustinės juostos plotį, plataus spektro optinę sugertį matomoje srityje, cheminį bei terminį stabilumą atmosferinėmis sąlygomis, taip pat junginys yra netoksiškas. Naujausi tyrimai rodo, kad fotodetektoriai iš GeS plonų sluoksnių gali pasiekti itin aukštą jautrumą<sup>1,2</sup>.

Šiame darbe pristatome GeS plonųjų sluoksnių sintezę garų pernašos (vapor transport) metodu ant Si/SiO<sub>2</sub> padėklų. Iš pradžių gaunami amorfiniai sluoksniai, toliau kaitinant juos ~380 °C temperatūroje, kristalizuojami į ortorombinę fazę, ir gaunami suformuoti tolygūs polikristaliniai sluoksniai, kuriuose stipriai vyrauja hkl (100) orientacija, 2D kristalai išsidėstę lygiagrečiai padėklui. Struktūrinė analizė rentgeno spindulių difrakcija (XRD) ir paviršiaus morfologijos tyrimai skenuojančiu elektroniniu mikroskopu (SEM) patvirtino šį kryptingumą ir dangų homogeniškumą.

Naudojant tokius sluoksnius buvo suformuoti GeS lauko tranzistoriai, regimosios šviesos sensorių pritaikymui. Išmatuoti parametrai, tokie kaip jautrumas šviesai, įsijungimo ir išsijungimo greitis rodo perspektyvias charakteristikas, tinkamas tolesnei optimizacijai. Nors rezultatai šiuo metu preliminarūs, jie

patvirtina, kad kryptingai orientuotų polikristalinių GeS sluoksnių auginimas tiesiogiai ant Si/SiO<sub>2</sub> padėklų, lauko tranzistoriams formuoti yra efektyvus kelias siekiant įveikti tradicinių 2D prietaisų gamybos ribotumus.

Apibendrinant galima teigti, jog GeS yra itin perspektyvi medžiaga naujos kartos fotodetektoriams. Mūsų darbas parodo, kad garų pernašos būdu užauginti ir terminio apdorojimo būdu kristalizuoti GeS sluoksniai gali būti sėkmingai pritaikomi optoelektronikos įrenginiuose.



I pav. Trijų zonų krosnies darbinė schema. A – didysis kvarcinis vamzdis, b – vidinis mažo diametro kvarcinis vamzdis, c – trys krosnies zonos, kaitinamos atskirai, d – pernašos dujų (Ar) srautas, e – vakuuminio siurblio ištraukimo kryptis, f – tiglis su GeS milteliais, g – Si/SiO<sub>2</sub> padėklas ant grafitinio laikiklio.

*Reikšminiai žodžiai:* germanio sulfidas, optoelektronika, garų pernaša, ploni sluoksniai.

### Literatūra

- (1) Drabavičius, A.; Kondrotas, R.; Spalatu, N.; Pakštas, V.; Talaikis, M.; Antanaitytė, M.; Franckevičius, M. High-Performance GeS Thin Film Photodetectors Obtained via Sulfurization and Boron Doping. *ACS Applied Optical Materials* 2025. <https://doi.org/10.1021/acsao.5c00312>.
- (2) Drabavičius, A.; Pakštas, V.; Jasiūnas, R.; Koltsov, M.; Talaikis, M.; Naujokaitis, A.; Spalatu, N.; Kondrotas, R.; Gulbinas, V.; Franckevičius, M. Synthesis and Characterization of Polycrystalline GeS Thin Films for Optoelectronic Applications. *Mater Sci Semicond Process* 2025, 188, 109193. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.msssp.2024.109193>.

# Sub-terahercinis jutiklio su KMOP šaltiniu taikymas tirpalų koncentracijų nustatymui

## Sub-terahertz sensor with a CMOS emitter for evaluating solution concentration

Domantas Vizbaras<sup>1</sup>, Justina Lukošiuūtė<sup>1</sup>, Kęstutis Ikamas<sup>1,2</sup>, Alvydas Lisauskas<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>2</sup>Generolo Jono Žemaičio Lietuvos karo akademija, Šilo g. 5A, LT-10322 Vilnius

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

[domantas.vizbaras@ff.vu.lt](mailto:domantas.vizbaras@ff.vu.lt)

Terahercų (THz) spinduliuotės šaltinių ir detektorių technologijos intensyviai vystomos jau daugiau nei du dešimtmečius, ir vis didesnė dalis mokslinių išteklių skiriama šių įtaisų praktiniams taikymams. Viena iš sparčiai augančių taikymo sričių yra medžiagotyra. Pastaraisiais metais buvo pademonstruotas jutiklis, paremtas KMOP (angl. CMOS) tranzistoriais su integruota antena, ir įrodytas jo sėkmingas taikymas medžiagų identifikavimui bei charakterizavimui [1][2]. Šiame darbe pristatome analogiškos architektūros įtaisą, kurio pagrindą sudaro ne pasyvus THz jutiklis, bet aktyvus elementas – sub-THz spinduliuotės šaltinis. Parodomas jo taikymas vandens tirpalų koncentracijų tyrimui.

Mūsų sukurtas THz šaltinis pagamintas naudojant 65 nm Si KMOP technologiją. Spinduliuotė generuojama „Colpitts“ osciliatoriaus elektrinėje grandinėje [3], kurioje aktyvių elementų vaidmenį atlieka metalo oksido lauko tranzistoriai [4]. Šaltinio dizainas optimizuotas taip, kad slopintų pagrindinės, 95 GHz dažnio modos virpesius, bet leistų efektyviai, į atvirą erdvę, spinduliuoti trečiąją harmoniką, kurios dažnis siekia 285 GHz [5].

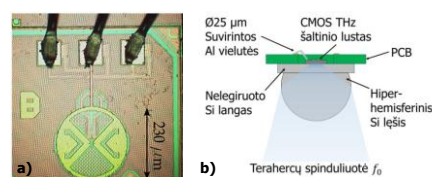
KMOP technologijos esmė yra aktyvių ir pasyvių elementų formavimas keliuose plonuose puslaidininkio ir dielektriko sluoksniuose bei jų tarpusavio sujungimas metaliniais laidininkais. Dėl šios priežasties, projektuojant įtaisą būtina atsižvelgti į kraštines sąlygas, kurios tiesiogiai lemia parazitines charakteristikas ir impedansą. Rezonatoriaus atveju impedanso pokyčiai sąlygoja rezonansinio dažnio poslinkį [3].

Kadangi mūsų THz šaltiniai atitaikyti spinduliuotei į atvirą erdvę, modeliavimo rezultatai rodo, jog pakeitus dielektrinę medžiagą virš antenos (įprastai tai yra oras), galima išorinėmis pasyviomis priemonėmis valdyti šaltinio spinduliuotės dažnį.

THz šaltinis paruošiamas matavimams prijungus pagalbinę elektroniką (1 pav.). Šaltinio lustas prijungtas ant nelegiruoto silicio plokštelės ir sujungtas su hiperhemisferiniu silicio lęšiu. Ši plokštelė prijungta prie spausdintos plokštės (angl. PCB). Pritaikius ultragarsinį aliuminio vielos suvirinimą, lustas elektriškai prijungtas prie valdymo plokštės. Kontaktinės vielos apsaugotos nuo trumpo jungimo skysčiuose epoksidiniais klijais.

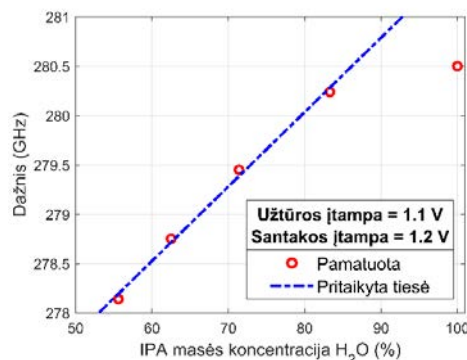
THz šaltinio dažniui ir jo pokyčiui matuoti surinkta heterodininė matavimo sistema. Atraminio dažnio spinduliuotė sukurama komerciniu THz šaltiniu („Virginia Diodes Inc.“ elektroninis dažnio daigintuvas). Abu THz spinduliai suvesti į vieną plačiajuosį KMOP jutiklį su logaritminės spiralės antena. Maišymo skirtuminis signalas leidžia su paprastu, 100 MHz juostos

oscilografu išmatuoti, kada atraminio ir tiriamojo šaltinių dažniai sutampa. Medžiagotyros eksperimentas atliktas ant THz šaltinio lašinant įvairių koncentracijų izopropanolio, etanolio ir vandens tirpalus, ir matuojant šaltinio dažnio pokytį.



1 pav. THz šaltinio nuotrauka su: a) atrankine antena, ir b) pagalbine elektronika ir optiniais elementais.

Pamatuota THz KMOP šaltinio trečios harmonikos dažnio priklausomybė nuo izopropanolio (IPA) ir vandens masių santykių tirpale pateikta 2 pav. Priklausomybė tiesiška, kai IPA koncentracija mažesnė už 85 proc. Prie didesnių koncentracijų dažnio pokytis, lyginant su grynu IPA, artėja į nulį. Rezultatams pritaikius tiesinį artinį suskaičiuotas teorinis jutiklio jautris – 130 ppt/Hz IPA daliai H<sub>2</sub>O tirpale.



2 pav. THz šaltinio dažnio priklausomybė nuo izopropanolio ir vandens masių santykio tirpale.

*Reikšminiai žodžiai: tirpalų jutiklis, terahercų šaltinis, dielektrinė spektroskopija, harmoninis osciliatorius*

### Literatūra

- [1] A. Krysl, et. al., IEEE Sensors Journal, t. 24, nr. 21, p. 33 872–33 880 (2024).
- [2] A. V. Chernyadiev, et. al., Scientific Reports, t. 14, nr. 1, p. 11483, (2024).
- [3] B. Khamaisi, et. al., IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology, t. 3, nr. 2, p. 141–150 (2013).
- [4] D. B. But, et. al., Opto-Electronics Review (2023).
- [5] K. Ikamas, et. al., Sensors, t. 21, nr. 17, p. 5795 (2021).

# InGaAs ir GaAsBi MQW VECSEL tipo lazeriai skirti 976 nm ir 1070 nm emisijai

## InGaAs and GaAsBi MQW VECSELs for emission at 976 nm and 1070 nm

A. Zelioli<sup>1</sup>, A. Špokas<sup>1</sup>, M. Krivičius<sup>2</sup>, D. Gailevičius<sup>2</sup>, E. Dudutienė<sup>1</sup>, B. Čechavičius<sup>1</sup> and R. Butkutė<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio av. 3, Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup> Laser research center, Vilnius University, Saulėtekio av. 10, Vilnius, Lithuania

[andrea.zelioli@ftmc.lt](mailto:andrea.zelioli@ftmc.lt)

Vertical-External-Cavity Surface-Emitting Lasers (VECSELs) have gained attention as a versatile alternative to conventional Vertical-Cavity Surface-Emitting Lasers (VCSELs). By replacing the top Distributed Bragg Reflector (DBR) with an external coupler, the VECSEL architecture enables efficient optical pumping, straightforward access to the cavity, and significantly higher output power potential, with the main limitation arising from thermal management challenges [1,2].

In this work, two VECSEL chips were fabricated, targeting emission wavelengths of 976 nm and 1070 nm. The 976 nm device employed InGaAs multiple quantum wells (MQWs) in the active region, while the 1070 nm device incorporated GaAsBi MQWs. Bismuth incorporation into GaAs reduces the bandgap even at low concentrations, improves the thermal stability of the bandgap, and increases the spin-orbit split-off energy. These effects suppress non-radiative Auger recombination, making GaAsBi an attractive material platform for extending GaAs-based optoelectronics to longer wavelengths.

Both VECSEL structures were grown by solid-source Molecular Beam Epitaxy (MBE) in a Veeco GENxplor system. The bottom mirrors consisted of 30 AlAs/GaAs periods, designed such that the MQW emission was centered within the DBR stopband. To enhance thermal management and reduce overall chip thickness, the gain regions incorporated alternating barrier thicknesses. Furthermore, the MQW design was optimized to minimize strain-induced dislocations, thereby enabling fabrication of devices with larger usable surface areas. The structures were characterized by a combination of structural and optical methods. Surface and crystalline quality were assessed using AFM, XRD, and HR-TEM, while photoluminescence (PL) measurements were performed at room temperature and across a wide temperature range, including both cryogenic and near-operational conditions. Room-temperature PL mapping was employed to evaluate the spatial uniformity of the emission. Lasing operation was successfully demonstrated in both devices. The InGaAs/GaAs MQW VECSEL emitted at 976 nm from a 500  $\mu\text{m}$  diameter pumped region, whereas the GaAsBi/GaAs MQW VECSEL produced emission at 1070 nm. Figure 1 shows the lasing characteristics of the GaAsBi device: (a) emission spectra at increasing pump powers, illustrating the transition from spontaneous emission to lasing; (b) the evolution of the emission wavelength and full width at half maximum (FWHM) with pump power; and (c) the

normalized emission intensity as a function of pump power, demonstrating continuous increase without saturation. To the best of our knowledge, this marks the first reported demonstration of lasing from a GaAsBi-based VECSEL.

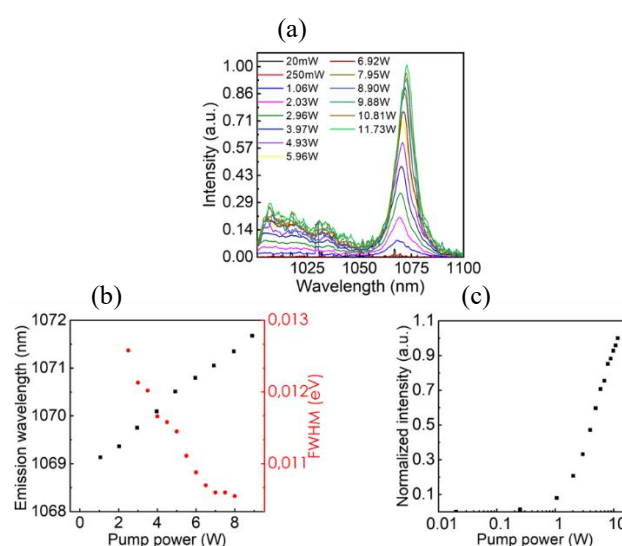


Figure 1. Lasing characteristics of the GaAsBi-based VECSEL. (a) Emission spectra recorded at increasing pump powers, showing the transition from spontaneous photoluminescence to lasing. (b) Evolution of the lasing wavelength and full width at half maximum (FWHM) with pump power. (c) Output intensity as a function of pump power, demonstrating continuous increase without evidence of saturation.

### Bibliography

- [1] Muszalski Jan, et al. "VECSELs emitting at 976nm designed for second harmonic generation in the blue wavelength region." *Laser Technology 2012: Progress in Lasers*. Vol. 8702. SPIE, (2013).
- [2] Jacquemet Mathieu, et al. "Single-frequency cw vertical external cavity surface emitting semiconductor laser at 1003 nm and 501 nm by intracavity frequency doubling." *Applied Physics B* 86 (2007): 503-510.

## Trinario puslaidininkio $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$ sluoksnių sintezė ir savybių tyrimas

### Synthesis and characterization of ternary semiconductor $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$ layers

Tautvilas Breivė<sup>1</sup>, Rokas Kondrotas<sup>1</sup>, Asta Bronušienė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Medžiagų struktūrinės analizės skyrius, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius  
[b47tautwe@mail.com](mailto:b47tautwe@mail.com), [asta.bronusiene@ftmc.lt](mailto:asta.bronusiene@ftmc.lt)

Nuolat augantis iškastinio kuro vartojimas kelia rimtų energetikos ir aplinkosaugos problemų, dėl kurių itin svarbu skubiai plėtoti atsinaujinančius ir aplinkai nekenksmingus energijos šaltinius, ypač saulės energiją. Saulės šviesa laikoma ekologišku ir beveik neišsenkančiu energijos šaltiniu, galinčiu patenkinti dabartinius ir būsimus energetikos bei aplinkosaugos poreikius. Dėl šios priežasties energijos technologijų, skirtų saulės energijos eksploatavimui, tyrimai tapo itin aktualia mokslinių tyrimų tema [1].

Pastaraisiais metais mokslo bendruomenėje daug dėmesio skiriama naujų puslaidininkinių medžiagų paieškai, galinčių pakeisti saulės elementams plačiai naudojamą kadmio sulfidą ( $\text{CdS}$ ). Nors  $\text{CdS}$  pasižymi palankiomis optinėmis ir elektrinėmis savybėmis, jo naudojimą riboja toksiškumas bei poveikis aplinkai. Trinaris junginys - cinko indžio sulfidas ( $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$ ) yra viena iš perspektyviausių alternatyvų kadmio sulfidui, nes jis pasižymi panašiu draudžiamosios juostos dydžiu (*angl. bandgap*), geru regimosios šviesos pralaidumu ir yra sudarytas iš nekenksmingų elementų.  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$  (ZIS) sulaukė didelio susidomėjimo ir, tikėtina, artimiausioje ateityje taps nauju junginiu, kuris pakeistų  $\text{CdS}$  [2].

Šio darbo tikslas yra nusodinti plonus ZIS sluoksnius ir ištirti jų struktūrines savybes remiantis rentgeno spindulių difrakcijos (XRD), skenuojančios elektroninės mikroskopijos (SEM), pralaidumo spektrų matavimų, draudžiamosios juostos pločio skaičiavimo bei laidumo tipo nustatymo karštojo taško zondo (*angl. hot-point probe*) metodais. Plonų sluoksnių nusodinimui buvo pasirinkta dvipakopė  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$  sintezės metodika. Pirmojo etapo metu ZIS milteliai buvo termiškai nusodinami ant įvairių padėklų garinimo būdu vakuumu, siekiant užtikrinti sluoksnio homogeniškumą ir norimą nepakitusią cheminę sudėtį, su tikslu išlaikyti  $\text{Zn}:\text{In}$  santykį artimą 1:2. Antrojo etapo metu atliktas gautų sluoksnių sierinimas srios garų srautu, kas sudarė sąlygas ZIS junginiui susiformuoti bei keičiant padėklo temperatūrai, buvo galima kontroliuoti, kokia kristalinė gardelė susidaro po sierinimo. Esant žemesnei temperatūrai, apie 400 °C, susidaro kubinė, o aukštesnei, apie 800 °C temperatūrai, susidaro heksagoninė kristalinė gardelė.

ZIS sluoksnių struktūrinių savybių, įvertintų taikant rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) analizę, gautos difraktogramos patvirtino charakteringą ZIS kristalinių fazių formavimą ir kristalinių, kubinių bei heksagoninių gardelių susidarymą. Paviršiaus morfologija buvo ištirta skenuojančios elektroninės mikroskopijos (SEM) metodu, atskleidusiu, kad sintezės

parametrai daro įtaką grūdelių dydžiui, sluoksnių tolygumui bei paviršiaus vienodumui.

Optinėms savybėms tirti buvo registruojami pralaidumo spektrai ultravioletinėje, regimojoje ir artimojoje artimosios infraraudonosios spinduliuotės (UV–Vis–NIR) srityse. Gautų spektrų analizė leido nustatyti draudžiamosios juostos (*angl. bandgap*) reikšmę, kuri, priklausomai nuo sintezės sąlygų, heksagoninės kristalinės gardelės buvo apie 2,5 eV, kubinės apie 2,3 eV [3], o tuo tarpu  $\text{CdS}$  draudžiamoji juosta yra 2,4 eV [4]. Papildomai buvo atliktas laidininko tipo (n ar p) nustatymas naudojant karštojo taško zondo (*angl. hot-point probe*) metodą, kurio metu buvo nustatytas puslaidininkio n-tipo laidumas.

Šiame tyrime sistemingai aprašytas  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$  plonų sluoksnių formavimas taikant dviejų etapų sintezės metodą. Terminio ZIS miltelių garinimo metu susidarė stabilios amorfinės dangos, tai patvirtino EDS ir XRD analizės. Kristalizacija keičiant padėklo temperatūrą parodė, kad medžiaga išlieka chemiškai stabili, kartu pasižymi nuo gautos kristalinės fazės priklausančiomis struktūrinėmis ir optinėmis savybėmis. Sintezės parametrų ir medžiagos savybių koreliacija suteikia vertingų žinių apie ZIS galimą panaudojimą optoelektroniniuose ir fotovoltiniuose prietaisuose.

Apibendrinant galima teigti, kad dvipakopė ZIS sluoksnių sintezės metodika yra tinkama vienalytės struktūros puslaidininkiniams sluoksniams gauti. Gauti pirminiai rezultatai rodo, jog  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$  pasižymi savybėmis, artimomis  $\text{CdS}$ , tačiau neturi toksiškumo problemos, todėl gali būti perspektyvus kandidatas panaudojant saulės elementuose, fotodetektoriuose ir kituose optoelektroniniuose įrenginiuose.

#### Literatūra

- [1] Chao Liu, Qinfang Zhang, Zhigang Zou, “Recent advances in designing  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$ -based heterostructured photocatalysts for hydrogen evolution.” *Journal of Materials Science & Technology*, vol. 139, 167-188 (2023)
- [2] Mengzhu Li, Longlu Wang, Xinyu Zhang, Weinan Yin, Yingbo Zhang, Jingwen Li, et al. “Recent status and future perspectives of  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$  for energy conversion and environmental remediation.” *Chinese Chemical Letters*, vol. 34, Issue 7, 107775 (2023)
- [3] Chen, Yongjuan, et al. “Exploring the different photocatalytic performance for dye degradations over hexagonal  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$  microspheres and cubic  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$  nanoparticles.” *ACS applied materials & interfaces* 4.4 (2012): 2273-2279.
- [4] Cheng, Lei, et al. “CdS-based photocatalysts.” *Energy & Environmental Science* 11.6 (2018): 1362-1391.

# Plonasluoksnio termoelektrinio generatoriaus (Bi-Ni) gamyba naudojant magnetroninio dulkinimo technologiją ir tyrimai

## Fabrication of thin film thermoelectric generator(Bi-Ni) using magnetron sputtering technology and investigations

Žydrūnas Kavaliauskas<sup>1,2</sup>, Aleksandras Iljinas<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Kauno kolegija, Informatikos, inžinerijos ir technologijų fakultetas, Pramonės pr. 20, LT-50468 Kaunas

<sup>2</sup>Lietuvos energetikos institutas, Plazminių technologijų laboratorija Breslaujos g. 3, LT-44403 Kaunas

<sup>3</sup>Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas  
[zydrunas.kavaliauskas@go.kauko.lt](mailto:zydrunas.kavaliauskas@go.kauko.lt)

Daugelyje pramoninių procesų (pvz., metalurgijos pramonėje, perdirbant įvairias medžiagas ir kt.) gaminant įvairius produktus, kaip šalutinis produktas išsiskiria didelis šilumos kiekis. Didelė dalis šilumos prarandama kaip energija. Literatūroje teigiama, kad net trečdalis miestų šildymui skirtos šilumos prarandama perdavimo linijose [1, 2]. Tobulėjant pramonės procesams, susidaro vis daugiau šilumos nuostolių, todėl kyla problema, kaip efektyviai panaudoti šią šilumą kitų rūšių energijai išgauti, pavyzdžiui, elektrai. Vienas iš būdų, kaip pagamintą šilumą paversti elektra, yra termoelektrinio generatoriaus (TEG) naudojimas [1, 2]. Šie įrenginiai gali būti naudojami ne tik perteklinei šilumai paversti elektra, bet ir kaip atsinaujinantys energijos šaltiniai. TEG naudojami įvairiose srityse elektros energijai gaminti, įskaitant kosminių zondų, tokių kaip „Mars Curiosity“ marsaeigis, maitinimą. Be to, TEG prisideda prie hibridinių automobilių efektyvumo didinimo, nes dalį vidaus degimo variklių generuojamos šilumos paverčia elektra. TEG gali būti naudojami kuriant hibridinius saulės elementus, kurie naudoja tiek matomą šviesą, tiek infraraudonųjų spindulių bangas. Sukurti eksperimentiniai įrenginiai, pritaikyti elektros energijos gamybai, pasinaudojant tuo, kad tarp natūralių vandens telkinių paviršiaus ir giliųjų sluoksnių yra temperatūrų skirtumas [1].

Jei viena (TEG) metalo gabalo pusė tam tikru metu kaitinama, o kita – aušinama, karštojoje pusėje esantys elektronai turės daugiau energijos nei atitinkami elektronai šaltojoje pusėje, o tai reiškia, kad karštieji elektronai turi daugiau kinetinės energijos nei šaltojoje pusėje esantys. Taigi, karštieji elektronai keliauja į šaltąją pusę greičiau nei šaltieji elektronai juda į karštąją pusę, ir galiausiai, šaltasis termoelektrinio generatoriaus galas įkraunamas neigiamai, o karštasis – teigiamai. Dėl šios įtampos gaunamas potencialų skirtumas. Šių prietaisų veikimas pagrįstas Seebecko efekto principu [1, 2]. TEG prietaisų efektyvumas yra mažas ir siekia iki 10 %, tačiau tai gana paprasti prietaisai, kurie tarnauja ilgą laiką ir nereikalauja dažnos priežiūros [1]. Be to, šie prietaisai veikia be triukšmo, gamindami elektros energiją, ir neišskiria jokių kenksmingų medžiagų į aplinką. Pagrindinė tyrėjų užduotis formuojant TEG yra gauti medžiagas, pasižyminčias didžiausiu elektriniu laidumu, bet mažiausiu šilumos laidumu [2]. Šie du veiksniai lemia TEG efektyvumą gaminant elektros energiją iš šilumos. Siekdami pagerinti TEG efektyvumą,

mokslininkai naudoja įvairius medžiagų ir nanodalelių derinius jų formavimui, kad šilumos srautas sulėtėtų netrukdam laisvam elektrinių dalelių srautui.

Tyrimo rezultatai rodo, kad plonasluoksniai Bi-Ni (50–100 nm) TEG gali būti sėkmingai formuojami ant įvairių paviršių naudojant magnetroninio dulkinimo technologiją. Analizuojant TEG paviršiaus SEM vaizdus, stebima aiški riba ties Bi-Ni sandūra. Bi-Ni paviršiuje stebimos netaisyklingos formos mikrostruktūros. EDS tyrimai rodo, kad paviršiuje yra 4,3 % deguonies, 13,9 % bismuto ir 81,8 % nikelio pagal atominę masę. Kaip rodo XRD rezultatai, TEG suformuotas Bi-Ni sluoksnis buvo polikristalinis. Polikristalinis sluoksnis labiau tinka TEG gamybai, nes polikristalinės struktūros greičiau įkaista, todėl potencialų skirtumas susidaro greičiau ir yra ekonomiškesnis. Matuojant TEG elektrines charakteristikas, nustatyta, kad per 100 s (nuo TEG kaitinimo pradžios), esant 125 K temperatūrų skirtumui ir 4 kW/m<sup>2</sup> šilumos srautui, pasiekiamas maksimalus 0,35 V elektrinis potencialų skirtumas ir 150 μW maksimali galia. Verta paminėti, kad įtampos skirtumo didėjimas didėjant temperatūrų skirtumui ir šilumos srautui nėra tolygus procesas realiomis TEG darbo sąlygomis. Tiriamo TEG maksimalus efektyvumo koeficientas yra 4,5 %. Plonasluoksniai TEG, kaip ir šio tyrimo atveju (Bi-Ni), turi pranašumą tuo, kad juos galima formuoti ant labai didelių paviršių, be to, jie tinka maitinti mažus mobiliuosius įrenginius (pvz., nano/mikrorobotus, nanopalydovus ir kt.). TEG gali būti naudojami hibridinėse/integruotose energijos gamybos sistemose (pvz., TEG ir saulės elektrinėse, TEG ir vėjo elektrinėse, TEG ir sintezės dujų šaltiniuose ir kt.).

*Reikšminiai žodžiai: magnetronas, ploni sluoksniai, plonasluoksniai termoelektriniai generatoriai, Seebecko efektas, elektros energijos gamyba.*

### Literatūra

- [1] H. Jouhara; A. Zabnienska; N. Khordehgha; Q. Doraghia; L. Ahmada; L. Normana, B. Axcella, L. Wrobela, S. Daid, Int. J. Adv. Thermofluid Res., **9**, 100063, (2021).
- [2] K. Karthick, S. Suresh, G.C Joy., R. Dhanuskodi, Energy Sustain. Dev., **48**, 107–114. (2019).

# **Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> užuomazginių sluoksnių formavimas sparčios selenizacijos būdu iš metalinio stibio sluoksnelių**

## **Formation of Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> seed layers by rapid selenization of metallic antimony films**

Pijus Kuliavas<sup>1,2</sup>, Rokas Kondrotas<sup>2</sup>, Vidas Pakštas<sup>2</sup>, Audrius Drabavičius<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus Universitetas, Chemijos fakultetas, Naugarduko g. 24, Vilnius, 03225 Vilniaus m. sav.

<sup>2</sup>Fizinių ir Technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, Vilnius, 10257 Vilniaus m. sav.

[pijus.kuliavas@chgf.stud.vu.lt](mailto:pijus.kuliavas@chgf.stud.vu.lt)

Stibio selenidas pastaruoju metu sulaukė didelio dėmesio kaip perspektyvi medžiaga plonų sluoksnių saulės elementams dėl tinkamo draustinės energijos juostos pločio (~1,1–1,2 eV), didelio sugerties koeficiento ( $>10^5 \text{ cm}^{-1}$ ), bei plataus elementų paplitimo žemėje [1]. Kaip ir daugelis kvazi-1D medžiagų Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> pasižymi anizotropinėmis savybėmis. Norint pasiekti efektyvų krūvininkų ištraukimą, itin svarbu suformuoti absorbcinį sluoksnį su vyraujančia pageidaujama hkl ( $l \neq 0$ ) kristalografine orientacija. Aukštos kokybės užuomazginių sluoksnių formavimas išlieka itin svarbus siekiant gauti kompaktiškus, vientisus, bei plonus sluoksnius ant oksidinių padėklų, tokių kaip TiO<sub>2</sub>. Užuomazginio sluoksniu kristalografinė orientacija stipriai lemia tolesnį grūdelių augimą, jų orientaciją, bei sluoksniu morfologiją [2].

Šiame darbe pateikiamas Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> užuomazginių sluoksnių formavimo metodas, pagrįstas termiškai išgarintų Sb sluoksnių, nusodintų ant FTO/TiO<sub>2</sub> padėklų, selenizacija. Metalinis Sb buvo nusodintas naudojant terminio garinimo (TE) metodą aukšto vakuumo sąlygomis, po to plėvelės selenizuotos greito terminio apdorojimo (RTA) krosnyje Se turtingoje atmosferoje. Sistemingai keičiant selenizacijos temperatūrą, trukmę ir seleno dalinį slėgį, siekta identifikuoti optimalius parametrus, užtikrinančius Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> sluoksnių kristalinę orientaciją, būdingą didžiausiam (hkl,  $l \neq 0$ ) plokštumų išsidėstymui, kuris yra palankus fotovoltiniam našumui.

Struktūriniai ir morfologiniai tyrimai atlikti naudojant rentgeno spindulių difrakciją (XRD) ir skenuojančiąją elektroninę mikroskopiją (SEM), patvirtino gryno Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> susidarymą ir atskleidė grūdelių orientacijos priklausomybę nuo Sb garinimo, bei selenizacijos sąlygų. Tyrimai taip pat parodė, kad susiformavo kompaktiški ir tolygūs Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> užuomazginiai sluoksniai.

Apibendrinant, mūsų rezultatai rodo, kad sparti termiškai užgarintų Sb plėvelių selenizacija leidžia kontroliuoti Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> užuomazginių sluoksnių vyraujančią kristalografinę orientaciją ir morfologines savybes.

## **Literatūra**

- [1] Zhiqiang Li, Xu Chen, Hongbing Zhu, Jingwei Chen, Yuting Guo, Chong Zhang, Wen Zhang, Xiaona Niu, Yaohua Mai, *Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin film solar cells in substrate configuration and the back contact selenization*, Solar Energy Materials and Solar Cells, 161 (2017), p. 190–196.
- [2] Juškėnas, R.; Naujokaitis, A.; Drabavičius, A.; Pakštas, V.; Vainauskas, D.; Kondrotas, R. *Seed Layer Optimisation for Ultra-Thin Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> Solar Cells on TiO<sub>2</sub> by Vapour Transport Deposition*. Materials 2022, 15, 8356. <https://doi.org/10.3390/ma15238356>

# Gama spektrometrinio metodo taikymas radioaktyviųjų atliekų paviršiaus ir tūrio aktyvumui nustatyti in-situ naudojant CeBr<sub>3</sub> scintiliacinį detektorių

## Application of gamma spectrometric method for radioactive waste surface and volume activity determination in-situ using CeBr<sub>3</sub> scintillation detector

Kristina Mikalauskienė, Rita Plukienė, Grigorijus Duškesas, Darius Germanas, Arūnas Gudelis, Laurynas Juodis, Marina Konstantinova, Elena Lagzdina, Artūras Plukis, Vidmantas Remeikis  
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius  
[kristina.mikalauskiene@ftmc.lt](mailto:kristina.mikalauskiene@ftmc.lt)

Significant quantities of radioactive waste, including contaminated concrete from reactor structures and shielding, are generated during the operation and decommissioning of nuclear facilities, and their radiological assessment begins with nuclide composition estimation using gamma-ray spectroscopy to support waste classification and management. The non-destructive analysis technique for surface and volume activity determination in-situ would be extremely useful when selecting optimal management technologies for decision about decontamination and clearance [1].

We propose a method for surface and volume activity determination in metallic radioactive waste (MRW) or mixed (metallic/concrete) (RW) samples. The method applies in-situ gamma measurement of the RW sample and MCNP6 modelling of gamma ray interaction with materials including exact geometry of the sample and detector during measurement. Especially it could be used for reactor buildings or compartments characterization for clearance or sorting of metallic waste considering the possibility of a specific decontamination process. Our method is based on gamma spectrum analysis to obtain both the Compton edge-to-peak ratio and the Compton backscatter-to-peak ratio from measurements with any considered detector. It was developed by using portable CeBr<sub>3</sub> scintillation detector under laboratory conditions for concrete and mixed metal/concrete samples containing <sup>137</sup>Cs and <sup>60</sup>Co as surface contaminant or diffused contaminate in the sample volume, heterogeneously or homogeneously distributed.

Laboratory experiments with laboratory-made concrete and steel samples with <sup>137</sup>Cs and <sup>60</sup>Co point sources, imitating real radioactive construction in the building (concrete and possibly metallic constructions of different dimensions) were performed (Fig. 1). An exact MCNP6 modelling of each geometry case for validation purposes was performed.

Gamma-ray spectrometric measurements were carried out using a standard high-resolution CeBr<sub>3</sub> scintillation detector 51B51/2M-CEBR-X (Scionix, Netherlands) with 42% relative efficiency and a resolution of 8%. CeBr<sub>3</sub> detector efficiency calibration was performed for the standard geometry of the measurement with reference standard sources of <sup>137</sup>Cs and <sup>60</sup>Co including coincidence-summing corrections for the two peaks of <sup>60</sup>Co, also taking into account the drift of the energy scale of the spectrum due to temperature changes in the room or outside the correction of energy

calibration, that is especially important for longer measurement time [2].

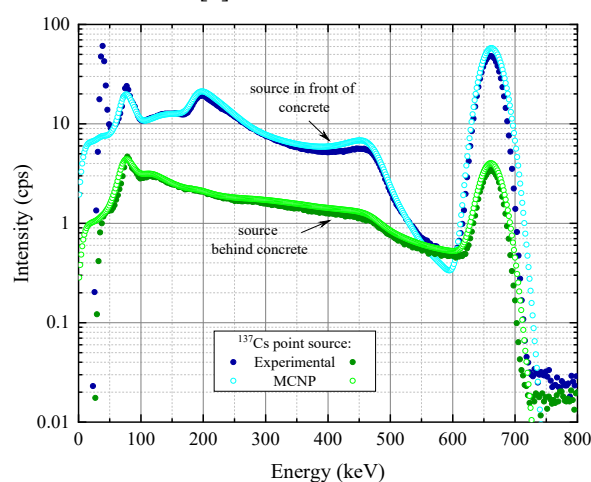


Fig. 1. Comparison of simulated MCNP and measured  $\gamma$ -spectra obtained with collimator, using concrete shielding

Inter-comparison of MCNP modelling and experimental  $\gamma$ -spectra and graphical representation of Compton edge/Peak and Compton(backscatter)/Peak ratios versus absolute efficiency for different lab-made samples of <sup>137</sup>Cs and <sup>60</sup>Co in different steel shielding conditions have shown a good (within 1 $\sigma$ ) consistency of experimental and modelled results and validated the method for given measurement geometry and allows to use this type of analysis for real radioactive waste contamination or volume activation identification.

**Keywords:**  $\gamma$ -spectrometry; radioactive concrete waste; MCNP modelling; Compton scattering; Compton (edge)/photopeak and Compton(backscatter)/photopeak ratios.

### References

- [1] V. Remeikis, J. Grinevičiūtė, G. Duškesas, L. Juodis, R. Plukienė, A. Plukis, Nucl Eng Des, 239(4), 813-818 (2021).
- [2] M. Konstantinova, D. Germanas, A. Gudelis, A. Plukis, Lith. J. Phys., 61, 1, 66-73.

# Gama spektrometrinio metodo paremto Komptono-pilnos sugerties smailės santykiu taikymas metalinių atliekų charakterizavimui taikant lazerinį deaktyvavimą

## Application the gamma spectrometric method based on Compton-to-peak ratio for the metallic radioactive waste characterization applying laser decontamination

Rita Plukienė, Kristina Mikalauskiene, Grigorijus Duškesas, Darius Germanas, Laurynas Juodis, Marina Konstantinova, Artūras Plukis

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

[rita.plukiene@ftmc.lt](mailto:rita.plukiene@ftmc.lt)

One of the important tasks for successful nuclear power plant (NPP) decommissioning process is optimization of management of nuclear facility low-level metallic radioactive waste (MRW) by grouping and decontamination of MRW. Approximately 1000 m<sup>3</sup> of contaminated metal waste is generated for every 1 GW decommissioned (13% by volume) [1]. Laser surface cleaning based on the surface ablation of radioactive metallic waste is an alternative method for decontamination especially if sandblasting/shot blasting fails to decontaminate. A high-power laser beam vaporizes the contaminated surface layer (oxide and radioactive contaminants) and a vacuum/HEPA system collects the dust generated during the ablation. Compared to chemical or mechanical methods, laser cleaning is performed remotely from the surface to be cleaned and in a dry manner, which significantly reduces secondary waste and exposure to workers [2]. For efficient characterization of the metallic waste before and after laser decontamination procedure, the determination of surface contamination is done by  $\gamma$ -spectrometry measurement combined with Monte Carlo simulation of applied measurement geometry [3]. The aim of this work was to develop method based on analysis of gamma spectra of metallic radioactive waste before and after laser ablation decontamination procedure, to estimate which part or total surface contaminates are removed from MRW.

The method is based on analysis of contaminants gamma emissions, utilizing both the Compton edge-to-peak and the Compton backscatter-to-peak ratios obtained from measurements with a portable CeBr<sub>3</sub> scintillation detector. Modelling, inter-comparison of  $\gamma$ -spectra, and analysis of the nuclide peaks and Compton edge and backscattering parts of the spectra of the samples with different activity <sup>60</sup>Co sources in established iron shielding conditions were investigated.

Inter-comparison of modelling and experimental  $\gamma$ -spectra and graphical representation of  $C_E/P$  and  $C_B/P$  ratios versus absolute efficiency for different lab-made samples of <sup>60</sup>Co in different steel shielding conditions is presented in Fig. 1. The modelling of point/planar/volume sources shielded by different thickness in terms of  $C_B/P$  ratios are quite well distinguishable in case of small thicknesses (up to 15 cm) of shield and contrary are very close in case of high shield thickness (30 cm and more). The similar conclusion is valid also for  $C_E/P$  ratios, but the differences between

point/planar/volume sources shielding cases are even smaller (more difficult to distinguish between cases). It was found a good (within 1 $\sigma$ ) consistency of experimental and modelled results. The method could be used for real radioactive waste contamination or volume activation identification if the standard (cleaning geometry) is used.

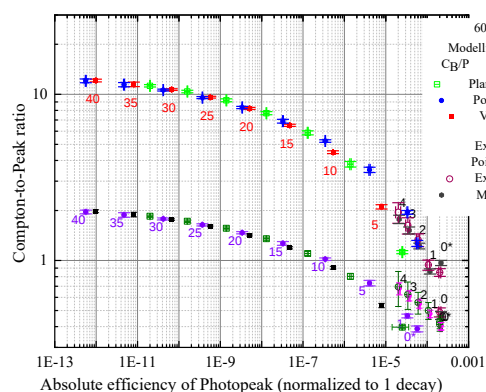


Fig. 1. Graphical representation of  $C_E/P$  and  $C_B/P$  ratios versus absolute efficiency for different lab-made samples with <sup>60</sup>Co source in different steel shielding conditions. Numbers 0–40 represents the metal thickness in cm.

**Keywords:**  $\gamma$ -spectrometry; radioactive metallic waste; MCNP modelling; Compton scattering; Compton (edge)/photopeak and Compton(backscatter)/photopeak ratios.

### References

- [1] V. R. Traboulsi et al., Metallic Low-Level Waste (LLW) Handling Options: An Optimal Lifecycle-Based Approach for North American Operations, Proc. of Int. Conf. WM2019, March 3 – 7, 2019, Phoenix, Arizona, USA.
- [2] Ki-Hee Song et al., „Surface removal of stainless steel using a single-mode continuous wave fiber laser to decontaminate primary circuits“. Nuclear Engineering and Technology, 54(9), p. 3293–3298 (2022).
- [3] K. Mikalauskiene et al., Assessment of Compton/photopeak ratio for various thickness metal shielding, Proc. of Int. Conf. “Medical Physics in the Baltic States 2023”, 09–11 November, 2023, Kaunas, Lithuania.

# SDC plonasluoksnių keramikų elektrinių savybių tyrimas

## Investigation of the electrical properties of SDC thin ceramic films

Darius Virbukas

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

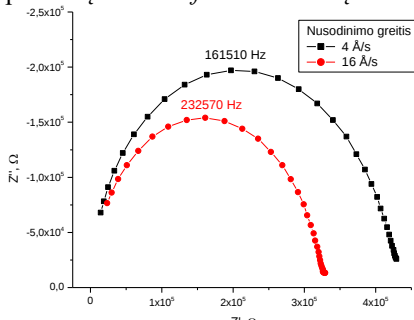
darius.virbukas@ktu.lt

Cerio oksidas su samario oksido priemaišomis (SDC) turi fluorito tipo struktūrą. Pastaruoju metu daug dėmesio skiriama tyrinėjant cirkonio oksidas stabilizuotas itrio oksidu (YSZ). Tačiau  $\text{CeO}_2$  pagrindo keramikos stabilizuotos  $\text{Sm}_2\text{O}_3$  ar  $\text{Gd}_2\text{O}_3$  pasižymi geresnėmis elektrinėmis savybėmis. Plonasluoksnių keramikų elektrinės savybės priklauso naudojamo formavimo metodo, bei nusodinimo parametrų [1].

Nusodinimo parametrai įtakoja joninį laidį ir yra susiję su deguonies jonų difuzijos koeficientu bei judrumu.

Naudojantis elektronų spindulio garinimo sistema buvo suformuotos plonasluoksnės ( $\text{Sm}_{0,15}\text{Ce}_{0,85}\text{O}_{1,925}$ ) SDC keramikos, esant 4 Å/s ir 16 Å/s nusodinimo greičiui, ant optinio kvarco padėklų. Keramikų rentgeno struktūrinė analizė rodo, kad gaunama kubinė centruota paviršiuje gardelė su dominuojančia [111] kristalografine orientacija ir didėjant nusodinimo greičiui formavosi mažesni grūdeliai.

Plonų sluoksnių elektrinių savybių tyrimui buvo naudojamas kompleksinės varžos spektrometras (NorECs AS). Elektrinės keramikų savybės tirtos 473–873 K temperatūrų ir  $10^{-1} \leq f \leq 10^6$  dažnių intervaluose.



1 pav. SDC plonų sluoksnių  $-ImZ(ReZ)$  priklausomybė, esant 673 K temperatūrai.

Kad formuojasi didesni grūdeliai patvirtina ir kompleksinės varžos spektrometrijos tyrimai. Esant didesniam nusodinimo greičiui (16 Å/s) gauname didesnę grūdelių varžą (1 pav.).

Grūdelių laidumo aktyvacijos energija nustatyta iš grūdelių laidžio priklausomybės nuo temperatūros grafiko ir jų vertės pateiktos (1 lentelėje).

Suformuotų SDC plonasluoksnių keramikų deguonies jonų laidis priklauso ne tik nuo aktyvacijos energijos, bet ir susijęs su deguonies jonų difuzijos koeficientu ir judriu. Deguonies vakansijų difuzijos koeficientas  $D$  yra susijęs su kampiniu dažniu  $\omega_R$  pagal išraišką:

$$D = \frac{1}{6} \gamma d^2 \omega_R, \quad (1)$$

čia  $D$  yra deguonies difuzijos koeficientas,  $d^2$  yra vidutinis kvadratinis šuolio atstumas tarp anijonų vietų gardelėje,  $\gamma$  yra koreliacijos koeficientas ir  $\omega_R$  kampinis. Fluorito tipo struktūrai buvo gauta, kad  $d^2\gamma = 0,35a^2$  kur  $a$  yra gardelės konstanta [2].

Bendras deguonies jonų joninis laidis  $\sigma$ , priklauso nuo vakansijų judrio  $\mu$ , bendros Sm katijonų koncentracijos  $N$ , deguonies vakansijų valentingumo  $z$  ir elektrono krūvio  $e$  [19]:

$$\sigma_{tot} = \mu \cdot N \cdot z \cdot e, \quad (2)$$

Deguonies vakansijų difuzijos koeficientas yra proporcingas krūvininkų judrumui ir gaunamas iš Nernsto-Einšteino lygties:

$$D = \mu kT / ze = kT \sigma / Nz^2 e^2, \quad (3)$$

čia  $k$  yra Bolcmano konstanta, o  $T$  absoliutinė temperatūra.

Iš (2) ir (3) lygties, gauname krūvininkų koncentraciją ( $N$ ):

$$N = kT \sigma / Dz^2 e^2 \quad (4).$$

Gautos relaksacijos dažnio  $f_R$ , joninio laidumo  $\sigma$ , difuzijos koeficiento  $D$ , krūvininkų koncentracijos  $N$  ir deguonies vakansijų judrumo  $\mu$  vertės pateikiamos (1 lentelėje).

1 lentelė. SDC keramikų joninio laidumo  $\sigma$ , relaksacijos dažnio  $f_R$ , difuzijos koeficiento  $D$ , krūvininkų koncentracijos  $N$  ir deguonies vakansijų judrumo  $\mu$  vertės esant 573 K ir 673 K temperatūroms.

| Nusodinimo greitis | 4 Å/s                    |             |                                    |                                 |                                        | $\Delta E_g$ , eV |
|--------------------|--------------------------|-------------|------------------------------------|---------------------------------|----------------------------------------|-------------------|
|                    | $\sigma$ , $10^{-2}$ S/m | $f_R$ , kHz | $D$ , $10^{-14}$ m <sup>2</sup> /s | $N$ , $10^{29}$ m <sup>-3</sup> | $\mu$ , $10^{-13}$ m <sup>2</sup> /V·s |                   |
| 573 K              | 1,215                    | 10,48       | 0,1022                             | 9,176                           | 0,4138                                 | 0,83              |
| 673 K              | 11,65                    | 161,5       | 1,575                              | 6,710                           | 5,428                                  |                   |
| Nusodinimo greitis | 16 Å/s                   |             |                                    |                                 |                                        | 0,81              |
|                    | $\sigma$ , $10^{-2}$ S/m | $f_R$ , kHz | $D$ , $10^{-14}$ m <sup>2</sup> /s | $N$ , $10^{29}$ m <sup>-3</sup> | $\mu$ , $10^{-13}$ m <sup>2</sup> /V·s |                   |
| 573 K              | 1,423                    | 18,11       | 0,1767                             | 6,219                           | 0,7150                                 | 0,81              |
| 673 K              | 16,31                    | 232,5       | 2,268                              | 6,517                           | 7,816                                  |                   |

Buvo nustatyta, kad esant didesniam nusodinimo greičiui formuojasi keramikos su mažesniais grūdeliais, dėl ko atitinkamai gauname didesnę difuzijos koeficientą ir didesnę krūvininkų judrumą. Pagal tai galime teigti, kad laidumas dominuoja tarp kristalinėmis ribomis.

*Reikšminiai žodžiai: elektronų spindulio nusodinimo metodas, cerio oksidas stabilizuotas samario oksidu.*

### Literatūra

- [1] B. C. Viana et al. Solid State Communications 378 (2024) 115412.
- [2] G. Laukaitis et al. Lithuanian Journal of Physics, 47/4 (2007) 465–470.

## Trečiasis tarplaboratorinis radionuklidų kalibratorių palyginimas EURAMET.RI(II)-S9

### The third interlaboratory comparison of the radionuclide calibrators EURAMET.RI(II)-S9

Arūnas Gudelis, Gintautas Kandrotas, Lina Gaigalaitė  
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius  
[arunas.gudelis@ftmc.lt](mailto:arunas.gudelis@ftmc.lt)

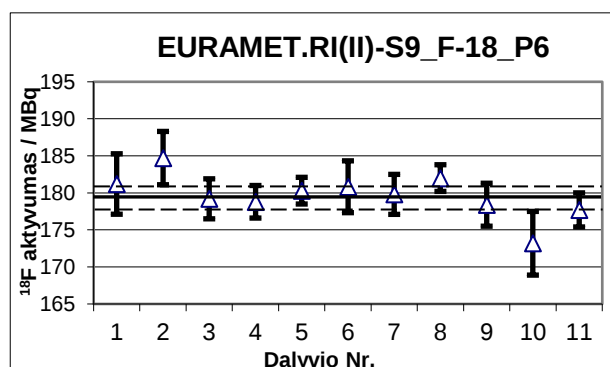
Pirmasis palyginimas šia tema buvo dvišalis CMI (Čekijos metrologijos instituto) ir FTMC palyginimas, jis įvyko 2013 m. Prahoje pagal EURAMET projektą Nr. 1243 „Radionuklidų kalibratorių tarplaboratorinis palyginimas“. Kitas palyginimas vyko tarp CMI, FTMC ir SMU (Slovakijos metrologijos instituto) 2018 m. Prahoje kaip EURAMET projektas Nr. 1437 „Antrasis tarplaboratorinis radionuklidų kalibratorių palyginimas“ [1].

2023 m. kovo 1 d. EURAMET jonizuojančiosios spinduliuotės techninio komiteto TC-IR posėdyje pasiūlyta dar kartą surengti radionuklidų kalibratorių palyginimą, kad būtų galima išmatuoti branduolinėje medicinoje naudojamų trumpaamžių radionuklidų – F-18, Ga-67, Y-90, Tc-99m, In-111, I-123, I-131, Sm-153, Lu-177 ir Tl-201 – aktyvumą. Svarbių branduolinei medicinai radionuklidų, tokių kaip Y-90, Sm-153 ir Lu-177 [2-4] aktyvumas ankstesniuose dviejuose palyginimuose nebuvo matuojamas.

Palyginimo techninis protokolą buvo patvirtintas BIPM 2023 m. rugpjūčio 8 d. po jonizuojančiosios spinduliuotės konsultacinio komiteto CCRI(II) ir pagrindinių palyginimų darbo grupės KCWG(II) peržiūrų. Trumpaamžių radionuklidų matavimai atlikti 2023 m. rugsėjo 11-14 d. Prahoje.

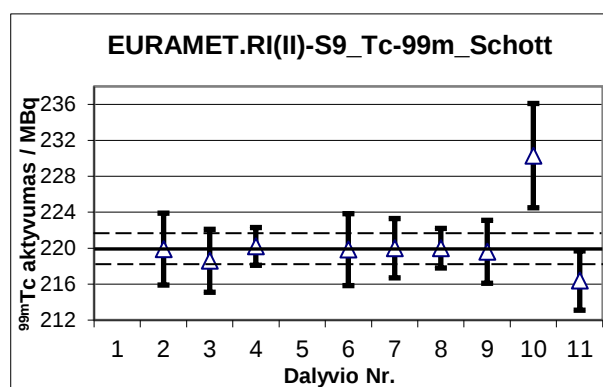
Dalyviai – 9 Europos šalių nacionaliniai metrologijos institutai (NMI) ir paskirtieji institutai (PI), 1 prietaisų gamybos pramonės atstovas: BEV (Austrija), BFKH (Vengrija), CIEMAT (Ispanija), CMI (naudojo 2 matuoklius), FTMC – pilotinė laboratorija, IFIN-HH (Rumunija), NUVIA (Čekija), SCK CEN (Belgija), SMU, STUK (Suomija).

Radionuklidų tirpalai buvo matuojami 4 geometrijose: P6 tipo indelis, Schott tipo indelis, 2 ml ir 5 ml tūrio ampulės.



1 pav. F-18 aktyvumo P6 tipo indelyje matavimo rezultatai. PPV yra 179,5(12) MBq, punktyrinėmis linijomis pavaizduotas standartinis nuokrypis

Palyginimo pamatinės vertės (PPV) gautos įvertinus dalyvių pateiktus aktyvumo matavimo rezultatus, pakoreguotus nustatytai atskaitos datai, vidurkio moderavimui naudojant statistinį metodą [5].



2 pav. Tc-99m aktyvumo Schott tipo indelyje matavimo rezultatai. PPV yra 220,0(17) MBq, punktyrinėmis linijomis pavaizduotas standartinis nuokrypis

Lietuvos branduolinės medicinos praktikoje plačiai naudojamų radionuklidų aktyvumo matavimo rezultatai pateikiami grafiniu būdu. FTMC dalyvio numeris paveiksluose yra 4.

Rezultatai patvirtina dalyvavusių NMI ir PI kalibravimo ir matavimo galimybes (angl. CMC – Calibration and Measurement Capabilities), užtikrinant metrologinę sietį su pirminiais etalonais.

*Reikšminiai žodžiai: radionuklidų kalibratorius; trumpaamžiai radionuklidai; branduolinė medicina; palyginimo pamatinė vertė; kalibravimo ir matavimo galimybės (KMG).*

#### Literatūra

- [1] A. Gudelis, I. Gorina, P. Dryak, Z. Vesela, A. Javornik, M. Krivosik, J. Ometakova, and K. Skovorodko, ICRM technical series on radionuclide metrology, **2**, 52 (2020). URL: [https://physics.nist.gov/ICRM/ICRM\\_technicalseries\\_2.pdf](https://physics.nist.gov/ICRM/ICRM_technicalseries_2.pdf)
- [2] M.-R. Ioan, M. Sahagia, A. Luca, A. Antohe, and C. Ivan, J. Radioanal. Nucl. Chem. **305**, 507 (2015).
- [3] B.E. Zimmerman, T. Altitzoglou, A. Antohe, et al., Appl. Rad. Isot., **70**, 1825 (2012).
- [4] V. Reijonen, P. Toroi, and M. Tehnunen, Eur. J. Nucl. Med. Mol. Imaging **50** (Suppl 1), S12 (2023).
- [5] S. Pomme and J. Keightley, Metrologia, **52**, 3 (2015).

# Purcelio efektu sustiprintos sukinio kubit relaksacijos modeliavimas esant stipriai nehomogeniškai sukinio–rezonatoriaus sąveikai

## Modeling Purcell-enhanced spin qubit relaxation for strongly inhomogeneous spin-resonator coupling

Aistė Peštenytė<sup>1</sup>, Gediminas Usevičius<sup>1</sup>, John J.L. Morton<sup>2,3</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup>, Mantas Šimėnas<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>London Centre for Nanotechnology, University College London, London WC1H 0AH, UK

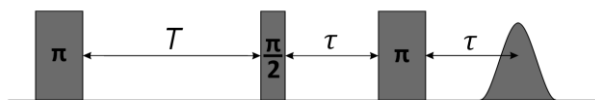
<sup>3</sup>Dept. of Electronic & Electrical Engineering, University College London, London WC1E 7JE, UK

[aiste.pestenyte@ff.stud.vu.lt](mailto:aiste.pestenyte@ff.stud.vu.lt)

Kvantinių technologijų pažanga lemia, jog elektronų sukinio rezonansas (ESR) tampa vis svarbesne ir vertinga priemone sukinio pagrindu veikiančių kvantinių įrenginių kūrimui, kadangi jis suteikia galimybę tiesiogiai tirti sukinio būsenas ir jų dinamiką. Tokie ESR matavimai dažnai reikalauja milikelvino (mK) temperatūrų, nes tik tokiomis sąlygomis galima reikšmingai sumažinti šiluminį triukšmą, pasiekti didesnę sukinų poliarizaciją ir užtikrinti ilgus koherencijos laikus. Vis dėlto, esant tokioms žemoms temperatūroms, išilginės relaksacijos trukmė ( $T_1$ ) žymiai padidėja, todėl ESR eksperimentai tampa sudėtingi ir neretai nepraktiški dėl labai ilgo matavimų laiko.

Siekiant įveikti šiuos iššūkius, plačiai taikomi superlaidūs mikrobangų rezonatoriai, pasižymintys dideliais kokybės faktoriais ( $Q$ ). Tokie rezonatoriai sustiprina lauką, kurį patiria sukiniai, taip padidindami sukinio ir rezonatoriaus sąveiką. Sustiprėjus šiai sąveikai, atsiranda Purcelio relaksacijos efektas, kuris ženkliai paspartina sukinio relaksaciją, taip sudarydamas galimybes atlikti ESR eksperimentus net ir itin žemose temperatūrose [1].

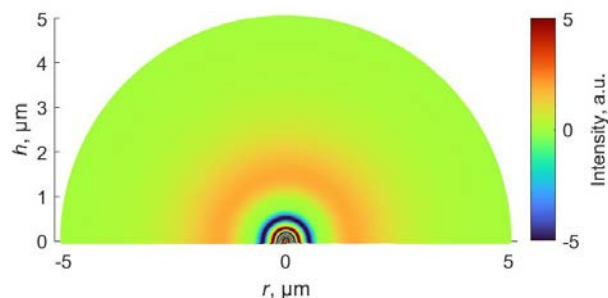
Vienas iš pagrindinių ESR metodų sukinų relaksacijos laikui  $T_1$  nustatyti yra inversijos atkūrimo eksperimentas. Šiame metode naudojama impulsų seka pavaizduota 1 paveiksle. Pirmasis  $\pi$  impulsas invertuoja elektrono įmagnetėjimo vektorių, o po jo seka kintamo ilgio laiko tarpas  $T$ , leidžiantis sistemai dalinai arba visiškai relaksuoti į pusiausvyros būseną. Vėliau taikoma sukinų aido seka, kuri leidžia išmatuoti signalą, proporcingą likusiam įmagnetėjimui. Keičiant laiko tarpą  $T$ , galima nustatyti, kaip greitai sistema grįžta į pusiausvyrą ir nustatyti relaksacijos laiką  $T_1$ .



1 pav. Inversijos atkūrimo eksperimento mikrobangų impulsų seka.

Šiame darbe mes sprendžiame Blocho lygtis, taikydami jas inversijos atkūrimo impulsų sekai, kurioje sukinų relaksacija yra ribojama išimtinai Purcelio efekto, atsirandančio esant tiesiam, superlaidžiam mikrobangų rezonatoriaus induktoriui. Tai suteikia

galimybę analizuoti erdviškai kintančios sukinio – rezonatoriaus sąveikos ir žadinančių magnetinių laukų poveikį sukinų relaksacijos dinamikai. Mūsų taikomas metodas suteikia naujų įžvalgų apie Purcelio efektu ribojamą sukinų relaksaciją, kai matavimai atliekami naudojant mikrobangų mikrorezonatorius, pasižyminčius dideliais kokybės faktoriais.



2 pav. Inversijos atkūrimo signalo erdvinis pasiskirstymas.

*Reikšminiai žodžiai: ESR, EPR, sukinų relaksacija, Purcelio efektas, mikrorezonatoriai.*

### Literatūra

[1] A. Bienfait, J. Pla, Y. Kubo, *Nature* 531, 74 (2016)

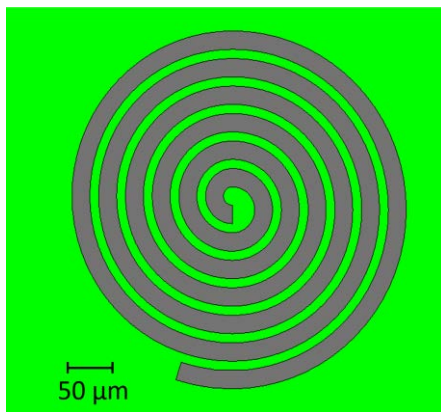
# Superlaidžių planarinių mikrozondatorių modeliavimas bei taikymas aukšto jautrumo EPR spektroskopijai

## Simulation of coupling of superconducting planar microresonators for high-sensitivity EPR

Ignas Pocius<sup>1</sup>, Gediminas Usevičius<sup>1</sup>, Jūras Banys<sup>1</sup>, Mantas Šimėnas<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius  
[ignas.pocius@ff.stud.vu.lt](mailto:ignas.pocius@ff.stud.vu.lt)

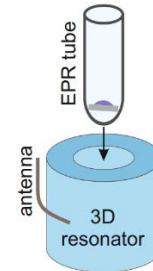
Elektronų paramagnetinio rezonanso (EPR) spektroskopija yra plačiai naudojamas įrankis tirti paramagnetiniams centrams (nesuporuotų elektronų sukinių sistemoms) įvairiose medžiagose, nuo kietųjų kūnų iki baltymų. Šis metodas paremtas kvantine elektrono sukinių prigimtimi, dėl kurios sukinių energijos lygmenys suskyla patalpinus jį į magnetinį lauką. EPR spektroskopijos esmė yra šuolių tarp šių lygmenų sužadimas bei sugerties detektavimas naudojant mikrobangų rezonatorius.

Kai kurios medžiagos gali būti išgaunamos tik labai mažais kiekiais (fL), tokiais atvejais įprasti EPR rezonatoriai (mL) netinka tokiems bandiniams, dėl labai mažo rezonatoriaus užpildymo faktoriaus, kuris nulemia labai prastą, o kartais visai neaptinkamą EPR signalą. Galimas šios problemos sprendimas - superlaidūs mikrozondatoriai, kurių dizainas reikalauja daug mikrobangų sužadimo bei rezonanso savybių skaitinio modeliavimo [1, 2]. Rezonatoriai pagaminti iš žemų temperatūrų superlaidininkų turi trūkumų juos naudojant standartinei EPR spektroskopijai: žema superlaidumo temperatūra, bei jautrumas išoriniam magnetiniam laukui. Dėl šių žemų temperatūrų superlaidininkų trūkumų yra tiriami aukštos kritinės temperatūros  $T_c$  superlaidininkai [3]. Šiame darbe tirtas spiralės tipo superlaidus mikrozondatorius pavaizduotas 1 pav.



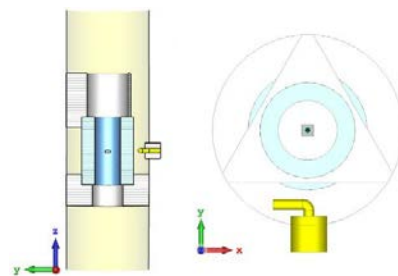
1 pav. Plokštuminis spiralės tipo EPR mikrozondatorių.

Plokštuminiai superlaidūs mikrozondatoriai yra skirti naudoti standartiniuose EPR spektrometruose uždėjus lašelį bandinio ant mikrozondatoriaus. Mikrozondatorių panaudojimo schema pavaizduota 2 pav.



2 pav. Mikrozondatorių naudojimo schema.

Šiame darbe modeliavimui buvo naudojamas CST Studio mikrobangų paketas. Naudojantis šiuo paketu buvo tiriamas mikrozondatorių sužadimas naudojant Bruker MD-5 dielektrinio žiedo dizaino rezonatoriaus anteną. Šis dielektrinis rezonatorius yra pavaizduotas 3 pav. Buvo tiriamos spiralinio mikrozondatoriaus rezonansinės savybės priklausomai nuo jo padėties bei orientacijos dielektriniame žiede. Atliktų skaičiavimų metu pavyko pasiekti kritiškai suderintus bei perdėto sužadimo režimus (angl. „critically coupled“ ir „overcoupled“), kurie yra suderinami tiek su nuolatinės bangos (CW), tiek su impulsiniais EPR eksperimentais [4].



3 pav. Bruker MD-5 dielektrinio žiedo dizaino rezonatoriaus dizainas yz-plokštumoje, bei palei z ašį.

*Reikšminiai žodžiai: Elektronų paramagnetinis rezonansas, sūkiniai, rezonatoriai, superlaidininkai.*

### Literatūra

- [1] A. Bienfait, et al., Reaching the quantum limit of sensitivity in electron spin resonance, Nat. Nanotechnol. 11, 253-257 (2016).
- [2] J.J.L. Morton, P. Bertet, Storing quantum information in spins and high-sensitivity ESR, J. Magn. Reson. 287, 128-139 (2018).
- [3] Ghirri, A. et al. YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> microwave resonators for strong collective coupling with spin ensembles, Appl. Phys. Lett. 106, 184101 (2015).
- [4] G. Usevičius, M. Šimėnas, B.L. Geoghegan, O.W. Kennedy, I. Pocius, P. Hogan, et al. Versatile high-sensitivity EPR using superconducting spiral microresonators. ChemRxiv. (2025).

# Talpinių jutiklių sistemos skirtos vandens nuotekų valymo procesui kontroliuoti sukūrimas ir tyrimai

## Development and research of capacitive sensor systems for monitoring water and wastewater treatment processes

Aleksandras Iljinas<sup>1</sup>, Žydrūnas Kavaliauskas<sup>1</sup>, Giedrius Blažiūnas<sup>1</sup>, Igor Šajev<sup>1</sup>, Dovilė Gimžauskaitė<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Kauno kolegija, Informatikos, inžinerijos ir technologijų fakultetas, Pramonės pr. 20, LT-50468 Kaunas

[aleksandras.iljinas@go.kauko.lt](mailto:aleksandras.iljinas@go.kauko.lt)

Vystantis pramonei ir augant gyventojų skaičiui (ypatingai didmiesčiuose), susidaro vis didesnis užteršto vandens (nuotekų) kiekis. Jų tinkamas surinkimas ir išvalymas tampa vis svarbesne problema. Gamybos proceso metu (pvz., chemijos pramonėje, maisto pramonėje, naftos perdirbimo ir kt.) susidaro labai dideli kiekiai įvairios cheminės sudėties nuotekų. Dideli kiekiai skystų nuotekų, kuriose yra sudėtingų junginių, susidaro namų ūkiuose ir kasdienėje veikloje (pvz., plaunant indus, prausiantis duše, atliekant valymo darbus ir kt.). Buitinėse nuotekose paprastai yra organinių medžiagų, tokių kaip riebalai, baltymai, angliavandeniai, taip pat įvairių ploviklių, muilų, fosfatų, buitinių chemikalų ir mikroorganizmų, kurie gali sukelti ligas [1,2].

Pramoninėms ir buitinėms nuotekoms būdinga skirtinga, tačiau aplinkai pavojinga, cheminės sudėties įvairovė. Jos yra daug pavojingesnės dėl jose esančių toksiškų cheminių junginių, tokių kaip sunkieji metalai (švinas, gyvsidabris, kadmis), naftos produktai, rūgštys, šarmai, tirpikliai, fenoliai, pesticidai ar net radioaktyviosios medžiagos. Abiejų tipų nuotekos kelia grėsmę aplinkai ir žmonių sveikatai: jos gali užteršti dirvožemį, gruntinius vandenis, paviršinius vandenis, sukelti deguonies trūkumą vandenyje, pralaužyti žuvis ir kitus organizmus, o kai kurie teršalai gali patekti į žmonių mitybos grandinę.

Kad nuotekos būtų tinkamai tvarkomos ir nekeltų grėsmės aplinkai ir žmonių sveikatai, jos turi būti surenkamos, transportuojamos ir valomos specialiai tam skirtose nuotekų valymo įrenginiuose [3]. Pirmiausia iš nuotekų pašalinamos stambios priemaišos – smėlis, šiukšlės, riebalai, o tada atliekamas biologinis valymas, kurio metu mikroorganizmai skaido organines medžiagas. Pramoninės nuotekos dažnai turi būti valomos toje įmonėje, kurioje jos susidarė, prieš patenkant į bendrą sistemą, nes jose gali būti agresyvių ar toksiškų cheminių junginių, kuriems reikalingas specialus neutralizavimas. Tinkamai išvalytas nuotekas galima saugiai išleisti į gamtinę aplinką arba, kai kuriais atvejais, pakartotinai panaudoti.

Nuotekų valymo procesų automatizavimas apima įvairių sistemų ir įrangos valdymą ir stebėjimą, siekiant užtikrinti efektyvų mechaninį, fizinį, cheminį ir specializuotą valymą. Mechaninio valymo metu automatizuoti sietų valytuvai, konvejeriai ir smėlio gaudyklių purkštuvai valdomi programuojamais loginiais valdikliais (PLC), kurie užtikrina nuoseklų veikimą ir reakciją į apkrovas. Fizinio valymo metu filtrų užsikimšimas stebimas naudojant slėgio jutiklius ir

srauto matuoklius, kurių duomenys perduodami į SCADA sistemas stebėjimui ir valdymui realiuoju laiku. Cheminio valymo metu tikslus reagentų dozavimas atliekamas naudojant dozavimo siurblius, valdomus pH, redokso ir laidumo jutiklių duomenimis, kurie padeda palaikyti optimalias reakcijos sąlygas. Specializuotuose procesuose, tokiuose kaip atvirkštinis osmozė ar ozonavimas, naudojami automatizuoti vožtuvai, membraninių filtrų diferencinio slėgio jutikliai, ozono koncentracijos analizatoriai ir UV intensyvumo matuokliai, o visa sistema koordinuojama per valdymo pultus su HMI (žmogaus ir mašinos sąsaja). Automatizavimas ne tik pagerina valymo kokybę ir efektyvumą, bet ir sumažina energijos suvartojimą bei personalo poreikį. Užtikrina saugų ir stabilų proceso valdymą.

Talpuminių jutiklių sistema leidžia nuolatos matuoti nuotekų (skysčio) tekančio tarp dviejų elektrodų dielektrines charakteristikas, kurios leidžia spręsti apie pratekančio vandens išvalymo kokybę. Taip iškart yra fiksuojami nukrypimai nuo užduotų parametų (skysčio švarumo) ir yra keičiama kenksmingas chemines medžiagas neutralizuojančių reagentų kiekio padavimą į pratekanti vandenį. Pastebėjus kritinį nukrypimą nuo užduotų vandens parametų operatyviai uždaryti nekokybiškai išvalyto vandens srautą, suteikiant daugiau laiko svarbių parametų stabilizavimui.

Darbe pateikta sukurta ir įvertinta automatizuotą pramoninę nuotekų valymo sistemą, integruojančią „Siemens S7-1214“ programuojamą valdiklį ir dviejų sluoksnių LSTM neuroninį tinklą, siekiant optimizuoti reagentų dozavimą, aeraciją ir nuosėdų atskyrimą remiantis realaus laiko duomenimis, padidinti valymo efektyvumą, sumažinti sąnaudas ir užtikrinti atitiktį aplinkosaugos standartams.

*Reikšminiai žodžiai: talpiniai jutikliai, vandens nuotekų valymo stebėjimo sistema, tvarumas.*

### Literatūra

- [1] S. Adamovic, R. Milosevic, M. Prica, Desalin. Water Treat. **321**, 100982 (2025).
- [2] N. Chavhan, R. Bhattad, S. Khot, S. Patil, A. Pawar, T. Pawar, P. Gawli, Digit. Chem. Eng. **14**, 100217 (2025).
- [3] O. Sedaghat, N. Bahramifar, M. Nowrouzi, H. Younesi, J. Water Process Eng., **71**, 107257 (2025).

## Sintiliaciniais detektoriams su signalo formavimu skirta duomenų apdorojimo ir analizės realiojo laiko sistema

### Scintillation detector's with signal form shaping data analysis and real-time processing system

Vilius Žalėnas

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius  
[vilius.zalenas@ftmc.lt](mailto:vilius.zalenas@ftmc.lt)

Šiame darbe tiriama sintiliacinių detektorių, skirtų jonizuojančios spinduliuotės matavimo optimizavimui, sukurta realaus laiko skaitmeninė sistema. Šiai sistemai reikalingas sintiliacinio signalo impulso formavimas – proporcingas išplėtimas laiko srityje (konkretūs parametrai priklauso nuo naudojamo kristalo fizikinių savybių.) Sistemos privalumas yra galimybė efektyviai fiksuoti ekvivalentinę signalo impulso formą naudojant pigesnę nei greitiems sintiliaciniams impulsams fiksuoti skirtą aparatinę įrangą. Įvertinant formuojančios sistemos grandies tiesiškumą išlaikoma informacija net ir apie į dinaminį sistemos matavimo diapazoną nepatenkančius didelių energijų dalelių sukurtus impulsus.

Pirminiame-analoginiame signalo apdorojimo etape panaudojamas Gauso formos stiprintuvas su atitinkama eksponentinio slopimo konstanta. Priklausomai nuo to, koks sintiliacinis kristalas naudojamas, signalas integruojamas 2 arba 3 kartus atsižvelgiant į dažninio stabilumo kriterijų. (angl. *pole-zero cancelation*)

Signalą laiko ašyje išplėtus iki 6–8 mikrosekundžių atsiveria platus skaitmeninio apdorojimo galimybių spektras. Iš visų atvirojo kodo sistemų buvo pasirinkta ESP32 dėl savo aparatinės įrangos galimybių, lanksčios programavimo platformos ir palaikomų duomenų perdavimo sąsajų gausos. Siekiant gauti kuo tikslesnę diskrečią signalo formą panaudotas papildomas išorinis analoginis-skaitmeninis keitiklis. Impulsų išskyrimui taip pat reikalingas slenkstinės vertės algoritmas, kuriuo automatiškai būtų fiksuojami tik nustatyta impulso kriterijų atitinkantys signalai. Šiai užduočiai atlikti panaudotas dvejetainis amplitudės komparatorius su reguliuojama slenkstinės vertės reikšme.

Atsižvelgiant į signalo formą ir po formavimo padidėjusį kylančio fronto laiką, 10-90% amplitudės periodo kriterijus tampa visiškai neefektyvus signalo slenkstinei reikšmei nustatyti. Sukurtas patobulintas signalo išskyrimo kriterijaus algoritmas, išnaudojantis fizikinę formuojančio stiprintuvo savybę – signalo formos su laiko ir amplitudės santykio proporcingumą. Žinant tipinio sintiliacinio kristalo impulso laikines charakteristikas ir formuojančio stiprintuvo laiko konstantą galima apskaičiuoti maksimalią signalo trukmę. Taip pat žinant sistemos diskretizavimo dažnį galima apskaičiuoti maksimalų diskrečių taškų, tenkančių vienam impulsui, skaičių. Pasiekiamas rezultatas – krentančio impulso fronto palyginimas su slenkstine komparatoriaus verte ir determinuoto taškų

skaičiaus išsaugojimas atmintyje. Nors signalo forma yra vienintelis vartotojui realiu laiku nepasiekiamas parametras, aprašytas algoritmas užtikrina, kad įrašytame duomenų pakete užkoduotas sintiliacinis impulsas.

Kitas prietaiso privalumas yra automatizuotas jo valdymas TCP/IP duomenų sąsaja. Tai užtikrina galimybę prietaisą naudoti nuotoliu arba per kompiuterį. Vartotojo sąsajos aplikacija užtikrina standartizuotą duomenų surinkimą tekstinių failų pavidalu ir galimybę atlikti išvestinius skaičiavimus (grafiškai atvaizduoti signalo formą, sukurti spektrines energijos histogramas, pagal pasirinktą slenkstinę reikšmę apskaičiuoti jonizuojančiosios spinduliuotės foną arba aproksimuoti konkretaus izotopo skilimo intensyvumą.)

Prietaiso paprastumas ir moduliarumas suteikia didelį potencialą tolesniam prietaiso tobulinimui, įdiegiant papildomų duomenų perdavimo sąsajų funkcijas, pavyzdžiui USB, RS232 ir kitas. Vykdam ilgus ir pasikartojančius arba mažo aktyvumo šaltinių matavimus duomenų perdavimas belaidžiu ryšiu būtų daug patogesnis. Šios funkcijos įdiegimui visos prielaidos yra palankios, nes tiek naudojamo mikrovaldiklio ESP32 aparatinė įranga, tiek programinė platforma turi integruotus Wi-Fi ir Bluetooth ruošinius.

Atlikus reikiamas analoginės signalų apdorojimo grandinės korekcijas šį prietaisą galima naudoti taip pat ir puslaidininkinių jonizuojančios spinduliuotės detektorių signalų fiksavimui ir apdorojimui.

*Reikšminiai žodžiai: sintiliaciniai detektoriai, signalo formavimas, realaus laiko sistema.*

# Dielektrinės rezonansinės antenos, pagamintos iš perovskito–ilmenito medžiagų su magnio nestechiometrija

## Dielectric resonator antennas based on perovskite–ilmenite materials with magnesium non-stoichiometry

Mantas Krejars<sup>1</sup>, Justina Žemgulytė<sup>1</sup>, Modestas Sadauskas<sup>1</sup>, Oleksandr Fedorchuk<sup>2</sup>, Tetiana Plutenko<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>V. I. Vernadsky Institute of General and Inorganic Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

[justina.zemgulyte@ftmc.lt](mailto:justina.zemgulyte@ftmc.lt)

Šiuolaikinių radijo bangų energijos rinkimo ir perdavimo sistemų kūrimui reikalingos aukštos kokybės termiškai stabilios medžiagos su mažais dielektriniais nuostoliais ir aukštu  $Q$  koeficientu. Tokių medžiagų kūrimas atveria kelią technologinei vizijai, kurioje mažos galios prietaisai galės veikti be baterijų.

V. I. Vernadskio institute buvo sukurta dviejų fazių kompozitinė keramika, su padidinta Mg koncentracija ir termokompensacine faze Ca pagrindu. Optimizuotas  $0.93(\text{Mg}_{0.97}\text{Ni}_{0.05})\text{TiO}_3 \cdot 0.07\text{Ca}_{0.8}\text{Sm}_{0.13}\text{TiO}_3$  mėginys parodė puikius parametrus ( $Q \times f \approx 97\,000$  GHz,  $\varepsilon \approx 17.5$ ,  $\tau_f \approx -2$  ppm/K, kur  $Q$  pažymėtas dielektriko kokybės faktorius,  $f$  – mikrobangų dažnis,  $\varepsilon$  – santykinė dielektrinė skvarba ir  $\tau_f$  – temperatūrinis rezonanso poslinkio koeficientas), pranokstančius visus žinomus  $\text{CaTiO}_3$  pagrindu sukurtus analogus. Ši keramika buvo panaudota rezonansinės dielektrinės antenos gamybai.

Sukurta antena sudaryta iš horizontaliai orientuoto dielektrinio cilindro (žr. 1 pav.) paguldyto ant metalo plokštumos, cilindro ilgis  $L = 12.5$  mm, o diametras  $D = 6$  mm. Abiejuose antenos galuose yra apskriti metaliniai kontaktai, kurių diametras  $d_m$ . Metaliniams kontaktams ant dielektriko pagrindo suformuoti buvo naudojama SSAIL technologija [1]. Nustatant optimalius antenos parametrus, buvo atliktas atspindžio ir stiprinimo parametrų modeliavimas su CST Studio Suite programine įranga.

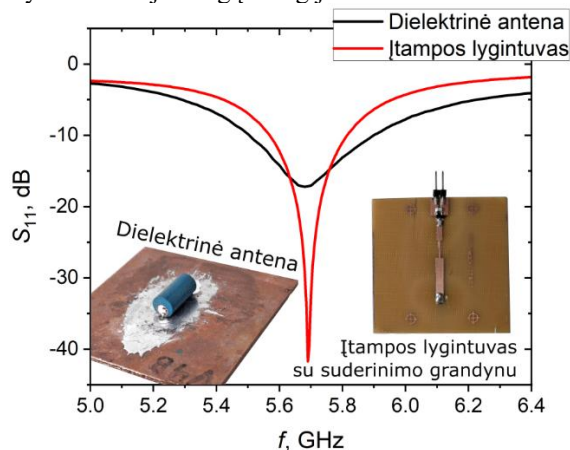
Pagamintos antenos atspindžio koeficiento ir dažninės charakteristikos buvo išmatuotos mikrobangų beaidėje kameroje naudojant R&S®ZNB vektorinį spektro analizatorių. Rezultatai parodė gerą modeliavimo bei matavimo sutapimą: apskaičiuota rezonansinė dažnio vertė buvo 5,65 GHz, o išmatuota – 5,7 GHz. Antenos stiprinimas siekė 6,2 dBi, o išmatuotas pusės galios juostos plotis yra apie 1 GHz (aprėpiamas beveik visas 5 GHz WiFi diapazonas). Spinduliuotės diagramos matavimai parodė 40° pusės galios kryptingumo kampą.

Didelis stiprinimo koeficientas ir platus spinduliuavimo kampas rodo, kad ši antena tinka radijo bangų energijos rinkimui 5G WiFi dažnių ruože. Tam buvo pagaminta mikrobangų lygintuvo grandinė su dviem Skyworks SMS7630 Šotki diodais. Norint efektyviai išlyginti antenos sukauptą kintamą energiją buvo suprojektuotas impedanso derinimo grandynas. Išmatuota antenos ir įtampos lygintuvo su suderinimo grandynu atspindžio priklausomybė nuo dažnio

pavaizduota 1 pav. Matyti, kad antena ir lygintuvas yra suderinti veikimui tame pačiame dažnyje. Buvo išmatuotas įtampos lygintuvo efektyvumas esant 1 mW įėjimo galiai, 3 kΩ apkrovai ir 5,7 GHz dažniui. Gautas efektyvumas siekė apie 16 %, o išėjimo įtampa buvo 690 mV. Sujungus mikrobangų lygintuvą su pagaminta dielektrine antena ir juos pastačius 1 m atstumu nuo 150 mW galios mikrobangų šaltinio sistema surinko 16 μW DC galios.

Aukštas dažnis lemia ne tik didelius diodo nuostolius bet ir sudėtingesnį impedando derinimą. Tolimesniuose darbuose bus tobulinamas suderinimas tarp antenos ir lygintuvo, taip pat lygintuvo schema bus sumontuota kitoje antenos pusėje, šie veiksmai turėtų pagerinti bendrą sistemos efektyvumą.

Pagaminta dielektrinė antena yra tinkama efektyvioms radijo bangų energijos rinkimo sistemoms.



1 pav. Dielektrinės rezonansinės antenos (juoda linija) ir įtampos lygintuvo su suderinimo grandynu (raudona linija) atspindžio priklausomybė nuo dažnio.

*Reikšminiai žodžiai: dielektrinė rezonansinė antena, ilmenito-perovskito keramika.*

### Literatūra

[1] K. Ratautas, et al., Appl. Surf. Sci., Vol. 470, pp. 405–410, 2019.

Tyrimas remiamas NATO Science for Peace and Security Program projekte G6002 “3D Metamaterials for Energy Harvesting and Electromagnetic Sensing.”

# Pageidaujama orientacija ir sisteminis stilbeno rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) smailių gesinimas

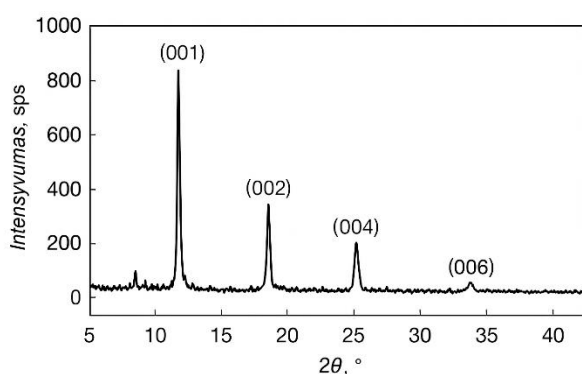
## Preferred Orientation and Systematic Extinctions in the XRD Pattern of Stilbene

Rokas Dobužinskas<sup>1</sup>, Mindaugas Mačernis, Darius Abramavičius

<sup>1</sup>Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, Vilnius, 10257, Lithuania  
rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt

Stilbenas (1,2-difeniletėnas) – tai aromatinis angliavandenilis, sudarytas iš dviejų benzeno žiedų, sujungtų eteno jungtimi. Dėl šios struktūros junginys pasižymi dviem izomerinėmis formomis – cis ir trans – kurių savybės bei stabilumas skiriasi. Trans-stilbenas yra termodinamiškai stabilesnis ir dažniau aptinkamas kristaline forma. Literatūroje stilbenas aprašomas kaip fotochemiškai aktyvi molekulė: veikiant ultravioletinei spinduliutei jis gali izomerizuotis, polimerizuotis ar sudaryti įvairius darinius, todėl plačiai tiriamas optikos, organinės elektronikos ir fotocheminių procesų kontekste. Be to, kristalinis stilbenas yra geras junginys kaip modelis, leidžiantis nagrinėti organinių molekulių kristalų sluoksniavimąsi, struktūrinius pokyčius bei difrakcijos intensyvumo pasiskirstymą, todėl dažnai naudojamas kaip pavyzdinis objektas rentgeno difrakcijos metodikos tyrimuose<sup>1-3</sup>.

Šiame darbe buvo ištirtas trans-stilbeno miltelių rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) raštas naudojant Cu K $\alpha$  spinduliuotę. Tyrimo tikslas – nustatyti stilbeno kristalinę struktūrą ir įvertinti gautų difrakcijos smailių intensyvumo pasiskirstymą. Difrakcijos matavimai atskleidė būdingą sluoksniuotą kristalinę gardelę, kuriai būdingi stiprūs (001) plokštumų atspindžiai. Gauti rezultatai leidžia tiksliau suprasti ne tik molekulės išsidėstymą gardelėje, bet ir bandinio paruošimo įtaką difrakcijos vaizdui.



1 pav. Stilbeno sluoksniuotos struktūros difraktograma

Ryškiausios refleksijos buvo užfiksuotos ties (001), (002), (004) ir (006) plokštumomis. Šios plokštumos yra statmenos *c* ašiai, todėl stilbeno kristalai galimai yra smarkiai orientuoti sluoksnio kryptimi. Intensyviausios smailės susidaro būtent iš bazinių plokštumų, nes jose

elektronų tankis pasikartoja ir sudaro sąlygas stipriam interferenciniam signalui.

Nelyginių 1 refleksijų (003 ir 005) nebuvimas aiškintinas sisteminė anihilacija (angl. systematic extinctions). Stilbeno kristalinėje gardelėje yra du molekuliniai sluoksniai, pasislinkę vienas kito atžvilgiu per *c*/2. Dėl tokio poslinkio, skaičiuojant struktūros faktorių, nelyginio 1 atveju fazės tampa priešingos ir tarpusavyje panaikina signalo stiprumą. Todėl šios difrakcijos smailės yra arba labai nuslopintos, arba visiškai nematomos matuojant standartiniu režimu.

(001) plokštumos atspindys rodo, kad reali gardelės simetrija nėra ideali. Molekulių pasvirimai, nedideli netobulumai, terminiai virpesiai ar net bandinio paruošimo sąlygos gali sumažinti visišką destruktivios interferencijos efektą ir leisti atsirasti silpnam, bet vis dar aptinkamam pirmajam difrakcijos maksimumui. Tai svarbi užuomina, jog net ir simetriškose gardelėse praktikoje egzistuoja nuokrypiai, galintys iškreipti teorines intensyvumo prognozes.

Apibendrinant, stilbeno miltelių XRD tyrimas patvirtina kristalinę struktūrą, sisteminių užkirtimų įtaką difrakcijos pavidalui ir parodo, kaip mėginio paruošimas gali paveikti smailių intensyvumo santykį. Šie rezultatai yra svarbūs ne tik analizuojant stilbeną, bet ir plačiau – nagrinėjant organinių molekulių kristalų struktūras bei jų difrakcijos signalų interpretaciją. Jie suteikia praktinių įžvalgų apie kristalitų tekstūrą, leidžia įvertinti gardelės simetrijos ypatumus ir patvirtina, jog eksperimentiniai duomenys dažnai atskleidžia įdomių rezultatų ne tik patvirtinančių idealizuotus struktūrinius modelius, bet ir suteikiančių naujos informacijos apie medžiagų formavimosi ypatybes.

*Reikšminiai žodžiai: rentgeno spindulių difrakcija, stilbenas, cheminė fizika.*

### Literatūra

- [1] J. Bernstein, Acta Cryst B **31**, 1268 (1975).
- [2] N. Zaitseva, A. Glenn, L. Carman, H. Paul Martinez, R. Hatarik, H. Klapper, and S. Payne, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **789**, 8 (2015).
- [3] I. Halimski, R. Karpicz, A. Dement'jev, M. Jankunec, J. Chmeliov, M. Macernis, D. Abramavicius, and L. Valkunas, Physical Chemistry Chemical Physics **26**, 23692 (2024).

## Autorių rodyklė

### A

Abakevičienė Brigita – 128 p., 199 p., 216 p.  
Abramavičius Darius – 28 p., 43 p., 132 p., 249 p.  
Acus Artūras – 46 p.  
Adlienė Diana – 161 p., 171 p., 217 p.  
Adomavičius Karolis – 71 p.  
Adomavičiūtė-Grabusovė Sonata – 160 p.  
Aidas Kęstutis – 58 p., 114 p.  
Aikas Mindaugas – 208 p.  
Albatoul Kasabji Fatima – 84 p.  
Alexander J. – 108 p.  
Ali Haider – 104 p.  
Alminas Saulius – 224 p.  
Ambrosch M. – 66 p.  
Anbinderis Maksimas – 228 p.  
Andrulevičius Mindaugas – 75 p.  
Anisimovas E. – 130 p.  
Antonovič Darius – 192 p.  
Antuzevics Andris – 29 p.  
Ardaravičius Linas – 179 p., 182 p.  
Armalytė Simona – 38 p.  
Arslonova Shirin – 161 p.  
Ašmontas Steponas – 184 p.  
Astachov Vladimir – 85 p.  
Astrauskas Rokas – 138 p.  
Aukorius Egidijus – 71 p., 176 p.  
Ayyagari Surya Revanth – 33 p.  
Ažukas Julius – 111 p.

### B

Babelis T. – 224 p.  
Bagdonas Kristupas – 195 p., 198 p., 213 p.  
Bagdonas Saulius – 69 p.  
Balakauskas Saulius – 220 p.  
Balčiūnaitė Ugnė – 193 p.  
Balčiūnas Sergejus – 19 p., 202 p., 214 p.  
Bale Barkha – 66 p.  
Balkauskas Dainius – 150 p.  
Baltaševičiūtė Paula – 194 p.  
Banevičius Dovydas – 195 p., 198 p., 213 p.  
Bankovskaitė Goda – 120 p.  
Banys Jonas – 26 p., 37 p.  
Banys Jūras – 19 p., 108 p., 207 p., 209 p., 210 p.,  
214 p., 227 p., 244 p., 245 p.  
Barauskienė Ieva – 222 p.  
Baronas Paulius – 205 p.  
Barre Maud – 218 p.  
Barzda Virginijus – 168 p., 177 p.  
Bašinskas Matas – 109 p.  
Bastakys Lukas – 208 p.  
Beklešovas Benas – 193 p.  
Belko Nikita – 121 p.  
Belosludtsev Alexandr – 103 p., 141 p., 150 p.  
Bendžiūtė Simona – 29 p.

Beniušis Neilas – 122 p.  
Berenis Domantas – 195 p., 198 p., 213 p.  
Berndhardsson Ch. – 171 p.  
Berškys Jaunius – 96 p., 230 p.  
Bezručkinas-Nadtočij Ireneuš – 156 p.  
Bibi I. – 97 p.  
Bičiūnas Andrius – 100 p., 149 p., 232 p.  
Bielskutė S. – 58 p.  
Bitinaitis Ignas – 103 p., 141 p.  
Biveinytė Margarita – 180 p.  
Blažiūnas Giedrius – 246 p.  
Blyweert Pauline – 210 p.  
Bočkutė Kristina – 222 p.  
Boiko Vitalii – 113 p.  
Boubaker Hana – 84 p.  
Boyle Robert – 152 p.  
Bragaglia Angela – 65 p.  
Breivė Tautvilas – 237 p.  
Bronušienė Asta – 237 p.  
Bubilaitis Vytautas – 120 p.  
Buivydas Šarūnas – 171 p.  
Bukauskas Virginijus – 85 p., 93 p., 100 p., 149 p.  
Bulotienė Danutė – 162 p.  
Burba Domantas – 14 p., 224 p.  
Butkutė Renata – 90 p., 91 p., 92 p., 100 p., 149 p.,  
219 p., 232 p., 236 p.  
Butkutė Rita – 213 p.  
Byčenkienė Steigvilė – 159 p.

### C

Celzard Alain – 210 p.  
Cernescu Adrian – 89 p.  
Cescutti G. – 155 p.  
Charniakova Katsiaryna – 121 p.  
Chimičius Titas – 222 p.  
Chiu Yi-Jen – 100 p.  
Chmeliov Jevgenij – 43 p., 118 p., 119 p., 173 p.  
Cicėnas Erikas – 80 p., 81 p.  
Cizdziel James V. – 171 p.  
Craske Dominic – 85 p.

### Č

Čechavičius Bronislovas – 90 p., 92 p., 100 p., 149 p.,  
219 p., 232 p., 236 p.  
Čepas Romualdas Jonas – 112 p.  
Čepas V. – 64 p.  
Čeponis Tomas – 180 p., 181 p., 187 p.  
Čeponkus Justinas – 116 p., 160 p.  
Čepurnaitė Giedrė – 96 p., 230 p.  
Čerapaitė-Trušinskienė Reda – 166 p.  
Černeckytė Augustė – 147 p.  
Čerškus Aurimas – 90 p., 100 p., 184 p.  
Čirgelis Vilius – 113, 173, 178  
Čiupaila Emilis – 57 p.

Čižas Vladislovas – 229 p., 233 p.  
Čurjurić Bruno – 65 p.  
Čyvienė Jurgita – 193 p., 206 p.

## D

D'Orazi Valentina – 65 p.  
Dailidėnas Ignas – 95 p.  
Dapkevičius Manvydas – 101 p., 196 p.  
Dapšys Dominykas – 107 p.  
Dargys Adolfas – 46 p.  
Daugalas Tomas – 85 p., 220 p.  
Daugėla Saulius – 197 p., 218 p.  
Daugėlaitė Alėja Marija – 80 p., 162 p., 170 p.  
Daugevičius Karolis – 80 p., 81 p.  
Deltuva Arnoldas – 131 p.  
Dementjev Andrej – 43 p., 44 p., 119 p.  
Deveikis Laimonas – 180 p.  
Devenson Jan – 96 p., 230 p.  
Dobužinskas Rokas – 209 p., 249 p.  
Dodonova-Vaitkūnienė Jelena – 172 p.  
Doke Guna – 29 p.  
Drabavičius Audrius – 234 p., 239 p.  
Draukšas Simonas – 47 p.  
Drazdauskas Arnas – 65 p., 66 p.  
Driukas Simonas – 229 p.  
Druteikienė Rūta – 171 p.  
Dubauskas Aurimas – 57 p.  
Dubietis Audrius – 38 p.  
Ducournau Guillaume – 33 p.  
Dudutienė Evelina – 90 p., 92 p., 100 p., 149 p.,  
219 p., 236 p.  
Dumbryte Irma – 163 p.  
Dundulis Lukas – 232 p.  
Dusek Ulrike – 158 p.  
Duškesas Grigorijus – 240 p., 241 p.

## E

Eckert Clara Leonie Brigitte – 59 p.  
Elkady Amina – 114 p.  
Ežerinskis Žilvinas – 157 p.

## F

Farshchi Rouin – 73 p.  
Fedorchuk Oleksandr – 248 p.  
Fedotova Jelizaveta – 43 p.  
Fernández-Terán Ricardo J. – 27 p.  
Franckevičius Marius – 173 p., 194 p.  
Franulevičius Jonas – 120 p.

## G

Gadonaitė Pija – 39 p.  
Gaigalaitė Lina – 243 p.  
Gaigalas Gediminas – 18 p., 125 p.  
Gailevičius Darius – 100 p., 236 p.  
Galvanauskas Karolis – 96 p., 230 p.

Garankin Jevgenij – 127 p.  
Garbačauskas Rokas – 115 p.  
Gavutis Martynas – 172 p.  
Gaweł Przemysław – 205 p.  
Gečys Paulius – 74 p., 145 p.  
Gedminaitė Danielė – 169 p.  
Gegevičius Rokas – 204 p.  
Gelžinis Andrius – 118 p., 137 p., 173 p., 178 p.  
Genevičius Kristijonas – 112 p.  
German Karolina – 93 p.  
Germanas Darius – 127 p., 136 p., 240 p., 241 p.  
Getautis Vytautas – 112 p.  
Gimžauskaitė Dvilė – 246 p.  
Glemža Justinas – 100 p., 149 p., 231 p., 232 p.  
Golubewa Lena – 100 p., 113 p., 173 p., 178 p.  
Gradauskas Jonas – 184 p.  
Gražulevičius Juozas Vidas – 21 p.  
Grigalaitis Robertas – 19 p., 202 p., 214 p.  
Grigalavičius Mantas – 69 p.  
Grigaliūnaitė-Vonsevičienė Gražina – 156 p.  
Grigelionis Ignas – 233 p.  
Grinevičiūtė Lina – 148 p.  
Grivois Théo – 218 p.  
Gromadzki M. – 64 p.  
Gruodis Alytis – 112 p.  
Grybauskaitė Goda – 195 p., 198 p., 213 p.  
Gudaitis Rimantas – 75 p., 231 p.  
Gudelis Arūnas – 240 p., 243 p.  
Gulbinas Vidmantas – 113 p., 188 p., 194 p., 204 p.  
Guobienė Asta – 75 p., 102 p., 199 p., 231 p.  
Guralskyi Illia – 214 p.  
Gvozdaite Rasa – 171 p.

## H

Habib Durre Nayab – 158 p.  
Haist Jonas Jeffrey – 127 p.  
Halimski Ivan – 43 p., 119 p.  
Harnik Artur – 107 p., 163 p.  
Haronin Vadzim – 209 p.  
Henzie Joel – 84 p.  
Hickman Graham J – 85 p.  
Hogan P. – 108 p.  
Holstein Jakob – 228 p.  
Holvoet Eliza – 123 p.  
Hreniak Dariusz – 113 p.  
Hsiu-Pen Lin – 70 p., 162 p., 165 p., 170 p., 174 p.

## I

Ignatjev Ilja – 86 p., 220 p.  
Ihanec N. – 64 p.  
Ikamas Kęstutis – 235 p.  
Ilickas Mindaugas – 199 p.  
Iljinas Aleksandras – 193 p., 206 p., 238 p., 246 p.  
Indrišiūnas Simonas – 33 p., 74 p.  
Iršėnas Mikas – 200 p.  
Ivanauskas Feliksas – 138 p.  
Ivaškevičiūtė-Povilauskienė Rusnė – 229 p.

Ivickas Ažuolas – 157 p.

## Y

Yang Chunhong – 173 p., 178 p.

Yaw-Kuen Li – 70 p., 162 p., 165 p., 170 p., 174 p.

## J

Jacob A. – 108 p.

Jakštas Vytautas – 96 p., 220 p.

Jankauskas Šarūnas – 75 p., 231 p.

Jankauskas Vygintas – 112 p.

Janonis Vytautas – 89 p.

Jansonas Gaudenis – 39 p.

Janušonis Julius – 97 p., 225 p., 226 p.

Jarutis Vygandas – 26 p., 37 p.

Jašinskas Vidmantas – 194 p.

Jegorove Aiste – 112 p.

Jelinskas Tadas – 164 p.

Jocytė Gerarda – 201 p.

Jokubauskaitė Monika – 92 p., 219 p.

Jonauskaitė U. – 64 p.

Jonauskas Valdas – 48 p., 129 p.

Jorudas Justinas – 74 p., 98 p., 179 p.

José María De Teresa – 13 p.

Jreije Antonio – 221 p.

Jukna Artūras – 156 p.

Juodagalvis Andrius – 139 p.

Juodėnas Mindaugas – 36 p.

Juodis Laurynas – 157 p., 240 p., 241 p.

Jurgutis Džiugas – 70 p., 165 p., 172 p., 174 p.

Juzeliūnas Gediminas – 14 p.

## K

Kadys Arūnas – 93 p.

Kalendra Vidmantas – 19 p., 108 p., 227 p.

Kaliasas Remigijus – 206 p.

Kaliatka Tadas – 25 p.

Kalinauskas Ramutis Kazys – 136 p.

Käll Mikael – 36 p.

Kalnaitytė Marija – 69 p.

Kalnaitytė-Vengeliene Agnė – 68 p., 69 p., 169 p.

Kalvaitis Kristupas – 34 p.

Kamarauskas Egidijus – 112 p.

Kamarauskas Mindaugas – 100 p., 149 p., 220 p., 232 p.

Kancleris Žilvinas – 203 p.

Kandrotas Gintautas – 243 p.

Karabanovas Vitalijus – 70 p., 162 p., 165 p., 170 p.,  
172 p.

Kareiva Aivaras – 215 p.

Karpavičienė Greta – 166 p.

Karpicz Renata – 43 p., 44 p., 119 p., 121 p.

Karpus Vytautas – 91 p.

Karpuškienė Rasa – 124 p.

Karvelis Dominykas – 39 p.

Kašalynas Irmantas – 33 p., 74 p., 89 p., 98 p., 179 p.

Kasparavičius Ernestas – 188 p.

Katelnikovas Arturas – 29 p.

Kavaliauskas Žydrūnas – 238 p., 246 p.

Kavaliukė Vilma – 281 p.

Kazakevičius Rytis – 34 p.

Kazakevičiūtė Laima – 157 p.

Kazlauskas Karolis – 101 p., 195 p., 196 p., 198 p.,  
205 p., 213 p.

Kennedy O. W. – 108 p.

Keršulis Skirmantas – 102 p., 192 p., 211 p.

Keršys Martynas – 144 p.

Khalil Zulfīqar – 104 p.

Kiaušaitė Faustina – 181 p.

Kiminaite Ieva – 59 p.

Kinka Martynas – 202 p.

Kiprijanovič Oleg – 179 p., 182 p.

Kirsch Matthias – 160 p.

Kisieliūnas Romas – 124 p.

Kitovienė Laima – 125 p.

Kjeldsen Hans – 16 p.

Klimavičius Vytautas – 42 p., 57 p., 58 p.

Klinavičius Tomas – 83 p.

Koklevičius Augustas – 203 p.

Koliada Mykola – 102 p.

Kondrotas Rokas – 30 p., 201 p., 234 p., 237 p., 239 p.

Kononovicius Aleksejus – 138 p.

Konstantinova Marina – 171 p., 240 p., 241 p.

Kontenis Gabrieliūnas – 100 p.

Koroliūnas Anton – 127 p., 142 p.

Kovalevskij Vitalij – 141 p.

Koženiauskienė Vaida – 213 p.

Krasikov Dmitry – 73 p.

Kraujalienė Lina – 167 p.

Kraujalis Tadas – 167 p.

Kreiza Gediminas – 143 p., 195 p., 198 p., 209 p.,  
213 p.

Krejaras Mantas – 248 p.

Krieke Guna – 29 p.

Kriščiūnas Eimantas – 80 p., 81 p.

Krivičius M. – 236 p.

Kruszynska K. – 64 p.

Kuciauskas Darius – 73 p.

Kučinskas Mantas – 125 p.

Kuktaite G. – 183 p.

Kuliavas Pijus – 239 p.

Kuzhir Polina – 44 p., 121 p.

Kynienė Aušra – 129 p.

Kyshchun Vladyslav – 184 p.

## L

Laaksonen A. – 58 p.

Labanauskas Linas – 229 p.

Ladika Dimitra – 61 p., 107 p., 163 p.

Lagzdina Elena – 240 p.

Lamberti Patrizia – 43 p., 119 p.

Lapčinskis Linards – 202 p.

Latvys Tomas – 37 p.

Laukaitis Giedrius – 222 p.

Laurikaitienė Jurgita – 221 p.

Laurinavičius Arvydas – 177 p.

Lazauskas Algirdas – 128 p.

Ledinauskas E. – 130 p.  
 Ledzinskas Ignas – 204 p.  
 Lekavičius Justas – 101 p., 196 p., 205 p.  
 Lemežis Rokas – 57 p.  
 Lengvinaitė Dvilė – 58 p., 117 p.  
 Likandrovas Darius – 131 p.  
 Lisauskas Alvydas – 228 p., 235 p.  
 Litvakas Andrejus – 206 p.  
 Liudvinavičius Rodrigas – 87 p.  
 Logminas Žygimantas – 207 p.  
 Lukošitė Justina – 235 p.  
 Lukša Algimantas – 220 p.

## M

Maceika Evaldas – 157 p.  
 Mačernis Mindaugas – 49 p., 120 p., 249 p.  
 Maciaszek M. – 97 p.  
 Mačiulis Mykolas – 168 p., 177 p.  
 Mackonis Paulius – 147 p.  
 Macutkevič Jan – 19 p., 189 p., 210 p.  
 Mačytė Jogilė – 116 p.  
 Magrini L. – 155 p.  
 Majauskaitė G. – 58 p.  
 Majdecki Maciej – 205 p.  
 Majeed Abdul Mannan – 143 p.  
 Makniusevičius Orestas – 167 p.  
 Malinauskas Mangirdas – 61 p., 107 p., 163 p.  
 Malinauskas Tadas – 93 p., 112 p.  
 Malmiga Benjaminas – 117 p.  
 Maltanava Hanna – 121 p.  
 Malykhin Sergei – 44 p.  
 Mandl Martin – 95 p.  
 Manionis Matas – 57 p.  
 Marcinauskas Liutauras – 208 p., 212 p.  
 Markauskas Edgaras – 97 p., 145 p., 225 p.  
 Martinaitytė Eglė – 209 p.  
 Mašalaitė Agnė – 158 p.  
 Masalskyi Oleksandr – 184 p.  
 Maskoliūnas Marius – 64 p., 152 p.  
 Masys Šarūnas – 48 p., 129 p.  
 Matkovič Sebastjan – 208 p.  
 Mattsson Sören – 171 p.  
 Matukas Jonas – 100 p., 149 p., 189 p., 231 p., 232 p.  
 Mažeika Viktoras – 168 p., 177 p.  
 Mažeikytė Neda – 145 p.  
 Mazėtytė-Godienė Airina – 172 p.  
 McReynolds Kevin – 73 p.  
 Meilutytė-Lukauskienė Diana – 166 p.  
 Meisak Darya – 189 p.  
 Melnikas Simas – 148 p.  
 Melninkaitis Andrius – 144 p.  
 Merkininkaitė Greta – 107 p.  
 Meškiniš Šarūnas – 75 p., 102 p., 231 p.  
 Miasojedovas Saulius – 143 p.  
 Mickevičius Saulius – 136 p.  
 Migauskas Mantas – 185 p.  
 Mikalauskas Aidas – 91 p.  
 Mikalauskas Lukas – 42 p.  
 Mikalauskienė Kristina – 127 p., 240 p., 241 p.

Mikalčiūtė Austėja – 132 p.  
 Mikolaitis Šarūnas – 66 p., 124 p., 140 p.  
 Mikołajczyk P. J. – 64 p.  
 Miliukaitė Rasa – 68 p., 169 p.  
 Minkevičius Linas – 233 p.  
 Minkevičiūtė R. – 66 p.  
 Mireckas Frydrichas – 189 p.  
 Mitrikas George – 227 p.  
 Mocci F. – 58 p.  
 Morton John J.L. – 108 p., 244 p.  
 Moscotin Maxim – 74 p., 98 p., 179 p.  
 Mougin Karine – 84 p.  
 Moussavi Maziar – 84 p.  
 Mozdeikis Marijus – 146 p.  
 Mozers Arturs – 24 p.  
 Murnikova Žyginta – 60 p., 111 p., 114 p.

## N

Nacius Ernestas – 229 p.  
 Naimovičius Lukas – 101 p.  
 Narbutis Donatas – 163 p.  
 Nardone Marco – 73 p.  
 Nargelas Saulius – 215 p.  
 Nargelienė Viktorija – 96 p., 225 p.  
 Narkevičius Domantas – 41 p.  
 Naujokaitė Kotryna – 167 p.  
 Naujokaitis Arnas – 30 p., 100 p., 201 p.  
 Navickas Marius – 61 p.  
 Nedobezkinas Martynas – 129 p.  
 Niaura Gediminas – 61 p., 86 p.  
 Novičenko Viktor – 106 p.

## O

Orentas Edvinas – 61 p., 195 p., 198 p.  
 Osteikaitė Elena – 168 p.

## P

Pačebutas Vaidas – 91 p.  
 Paciukonytė Augustė – 169 p.  
 Padrez Yaraslau – 100 p., 173 p., 178 p.  
 Pakštas Vidas – 30 p., 85 p., 194 p., 234 p., 239 p.  
 Pakštienė E. – 64 p.  
 Palaimienė Edita – 55 p., 210 p.  
 Paukštaitienė Renata – 166 p.  
 Paulauskas Tadas – 97 p., 225 p., 226 p.  
 Paulavičiūtė Meda – 126 p.  
 Pavlov Jevgenij – 181 p., 187 p.  
 Pažerauskaitė Paulina – 29 p.  
 Pečiukaitytė Emilė – 70 p., 170 p.  
 Pečiulytė Rugilė – 147 p.  
 Peckus Domantas – 84 p.  
 Pédehontaa-Hiaa Guillaume – 171 p.  
 Peštenytė Aistė – 244 p.  
 Petkutė Martyna – 68 p.  
 Petrauskas Kazimieras – 184 p.  
 Petrikaitė Vita – 76 p.  
 Petrolis Robertas – 166 p.

Piatrou Pavel – 211 p.  
 Pikas Ignas – 148 p.  
 Pilipavičius Jurgis – 57 p.  
 Pilyugin Leonid S. – 63 p.  
 Pimpė Jokūbas – 37 p.  
 Platnieks Oskars – 212 p.  
 Plaušinitienė Valentina – 102 p.  
 Pliaterytė Ingrida – 231 p., 232 p.  
 Plukienė Rita – 127 p., 160 p., 240 p., 241 p.  
 Plukis Artūras – 127 p., 142 p., 161 p., 240 p., 241 p.  
 Plutenko Tetiana – 248 p.  
 Plyushch Artyom – 207 p.  
 Pocius Ignas – 108 p., 245 p.  
 Poderys Vilius – 70 p., 162 p., 170 p., 174 p., 175 p.  
 Podlipskas Žydrūnas – 185 p., 186 p., 215 p.  
 Ponte Marina Dal – 65 p.  
 Poulsen Kasper M. – 205 p.  
 Pralgauskaitė Sandra – 52 p., 53 p., 100 p., 149 p.,  
 189 p., 231 p., 232 p.  
 Puidokas Giedrius – 213 p.  
 Puišo Judita – 51 p., 217 p.  
 Pukalskaitė Klaudija – 116 p.  
 Puzas Andrius – 171 p.  
 Pyragas Kęstutis – 133 p., 134 p., 135 p.  
 Pyragas Viktoras – 133 p.  
 Pyragienė Tatjana – 134 p.

## Q

Quarshie Mariam – 44 p.

## R

Račiukaitis Gediminas – 20 p.  
 Račkauskas Simas – 199 p.  
 Racz Rūta – 32 p.  
 Radavičius Marijus – 138 p.  
 Radiunas Edvinas – 101 p.  
 Ragulis Paulius – 203 p.  
 Raišys Steponas – 101 p., 196 p.  
 Rakickas Tomas – 103 p.  
 Ramalis Lukas – 148 p.  
 Randich S. – 155 p.  
 Rankelytė Gabrielė – 118 p.  
 Ratas Irmantas – 135 p.  
 Raudeliūnas Saulius – 152 p.  
 Razinkovas L. – 225 p.  
 Razinkovas Lukas – 97 p.  
 Reich Carey – 73 p.  
 Reklaitis Ignas – 95 p.  
 Remeikis Vidmantas – 142 p., 240 p.  
 Reshetnyak Viktor – 103 p.  
 Riauka Martynas – 168 p., 177 p.  
 Rimkus Gabrielius – 214 p.  
 Rindzevičius Paulius – 43 p., 44 p., 119 p.  
 Rinkevičius Žilvinas – 48 p.  
 Ritasalo Riina – 95 p.  
 Robert Bruno – 43 p., 49 p., 173 p., 178 p.  
 Rodin Aleksej – 147 p., 184 p.  
 Ros Rosa María – 140 p.

Roskos Hartmut G. – 228 p.  
 Rotomskis Ričardas – 70 p., 162 p., 165 p., 170 p.,  
 174 p., 175 p.  
 Rousseau Anthony – 218 p.  
 Rubežienė Vitalija – 203 p.  
 Rudokas Vakarīs – 102 p.  
 Rutkauskas D. – 97 p.  
 Rynkun Pavel – 125 p.

## S

Sacco G. G. – 155 p.  
 Sadauskas Modestas – 248 p.  
 Saniuk Mirosław – 98 p.  
 Sankauskaitė Audronė – 203 p.  
 Sarigul H. – 190 p.  
 Selskis Algirdas – 207 p.  
 Semionov Dmitrij – 152 p.  
 Shah Shabir Ahmad – 197 p.  
 Shieh Fa-Kuen – 202 p.  
 Shmeleva Liudmyla – 103 p.  
 Shundalau Maksim – 43 p., 119 p.  
 Siebentritt Sussane – 30 p.  
 Sipavičius Einaras – 42 p., 58 p.  
 Skapas Martynas – 100 p., 102 p.  
 Skibickaja Jekaterina – 172 p.  
 Skorulskienė Rigonda – 54 p.  
 Skruodienė Monika – 215 p.  
 Skuodas Eimantas – 153 p.  
 Skuodis Eigirdas – 195 p., 198 p.  
 Solovjovas Arnoldas – 215 p.  
 Soltanaitė Gabija – 185 p., 186 p., 215 p.  
 Spangenberg Arnaud – 84 p.  
 Spielman I. B. – 224 p.  
 Spigulis Janis – 100 p.  
 Spitoni E. – 155 p.  
 Sriubas Mantas – 216 p.  
 Stacevičius Lukas – 233 p.  
 Stadulis Jonas – 29 p.  
 Stanaitis Kasparas – 233 p.  
 Stanionytė Sandra – 85 p., 90 p., 92 p., 100 p., 219 p.  
 Stankevič Voitech – 102 p., 211 p.  
 Stankevičius Evaldas – 76 p., 86 p., 87 p., 146 p.  
 Stankus Gabrielius – 217 p.  
 Stankus Vytautas – 192 p.  
 Stašys Karolis – 96 p.  
 Stefanski Mariusz – 113 p.  
 Steiner Gerald – 160 p.  
 Steponavičius Raimundas – 120 p.  
 Steponkienė Simona – 70 p., 162 p., 165 p., 170 p.  
 Stepšys Augustinas – 136 p.  
 Stonkus Tomas – 159 p.  
 Stonkutė E. – 64 p., 66 p.  
 Stonkutė Neila – 216 p.  
 Stonkutė Rima – 78 p., 80 p., 81 p.  
 Strandberg Erik – 36 p.  
 Strassburg Martin – 95 p.  
 Strazdienė Viktorija – 84 p.  
 Streckaitė Simona – 43 p., 113 p., 173 p., 178 p.  
 Strigūnas Mykolas – 187 p.

Strumilaitė Patricija – 90 p.  
Subačius Liudvikas – 179 p.  
Suprun Anatoly – 103 p.  
Sužiedėlis Algirdas – 184 p.  
Svirskaitė Lauryna Monika – 112 p., 188 p.  
Svirskas Šarūnas – 19 p., 207 p., 209 p.  
Sytychkova Anna – 141 p.

## Š

Šablinskas Valdas – 116 p., 160 p.  
Šajev Igor – 246 p.  
Šakirzanovas Simas – 107 p.  
Šalkus Tomas – 216 p., 218 p.  
Šapolaitė Justina – 157 p.  
Šarpis Mindaugas – 32 p., 122 p., 123 p., 126 p.  
Šatkovskienė Dalia – 52 p., 53 p.  
Ščajev Patrik – 73 p., 143 p.  
Ščefanavičius Šarūnas – 214 p.  
Šermukšnis Emilis – 179 p.  
Šeškauskaitė Kristupa – 128 p.  
Šetkus Arūnas – 85 p., 220 p.  
Šilys Vakarīs – 97 p., 225 p., 226 p.  
Šimėnas Mantas – 19 p., 108 p., 183 p., 214 p., 227 p.,  
244 p., 245 p.  
Šimukovič Artur – 179 p.  
Šipová-Jungová Hana – 36 p.  
Širmulis Edmundas – 184 p.  
Šnipas Mindaugas – 167 p.  
Špečkauskienė Vita – 166 p.  
Špokas Aivaras – 90 p., 92 p., 100 p., 148 p., 219 p.,  
232 p., 236 p.  
Štaupienė Aistė – 100 p., 219 p.  
Šulskus Juozas – 120 p.  
Šutka Andris – 202 p.

## T

Taege Sebastian – 95 p.  
Talaikis Martynas – 30 p., 43 p., 61 p., 85 p., 100 p.,  
119 p., 149 p.  
Talanovaitė Skaistė – 174 p.  
Talvari Elham – 228 p.  
Tamoliūnaitė Greta – 175 p.  
Tamošauskas Titas – 150 p.  
Tamošiūnas Andrius – 59 p.  
Tamulaitis Gintautas – 215 p.  
Tamulevičienė Asta – 83 p., 84 p.  
Tamulevičius Sigitas – 84 p., 128 p.  
Tamulevičius Tomas – 82 p., 84 p., 190 p.  
Tamulienė Viktorija – 37 p.  
Tarasiuk Nikolaj – 171 p.  
Tartėnas Matas – 79 p., 153 p.  
Tarvydas Erikas – 71 p., 176 p.  
Tautvaišienė Gražina – 17 p., 63 p., 65 p., 66 p., 155 p.  
Temino A. V. R. – 108 p.  
Tien Trong – 30 p.  
Toliautas Stepas – 41 p., 115 p.  
Tomašiūnas Roland – 95 p.  
Traškina Nadežda – 57 p.,

Trečiokaitė Austėja – 71 p., 176 p.  
Treideris Marius – 220 p.  
Tumėnas Saulius – 91 p., 148 p.  
Turčak Justinas – 227 p.

## U

Ulčinas Artūras – 106 p., 163 p., 164 p.  
Uogintė Ieva – 159 p.  
Urbonavičius Benas Gabrielis – 109 p.  
Urbonavičius Marius – 216 p.  
Usevičius Gediminas – 108 p., 183 p., 227 p., 244 p.,  
245 p.

## V

Vagner Milita – 102 p.  
Vaičiaitė Justina – 137 p.  
Vailionis Arturas – 23 p.  
Vailionytė Agnė – 106 p.  
Vaitekoniš Šarūnas – 106 p.  
Vaitkevičius Augustas – 100 p., 126 p., 200 p.  
Valiokas Ramūnas – 172 p.  
Valkunas Leonas – 43 p., 49 p., 118 p., 137 p., 173 p.,  
178 p.  
Valle Nathalie – 30 p.  
Valušis Gintaras – 229 p.  
Valytė Milda – 154 p.  
Vansevičius Vladas – 78 p., 80 p., 81 p.  
Varanavičius Arūnas – 15 p., 39 p.  
Varnagiris Šarūnas – 216 p.  
Varnytė Juta – 210 p.  
Vasiliauskaitė Dvilė – 188 p.  
Vasiliauskas Andrius – 75 p., 231 p.  
Vasini A. – 155 p.  
Vázquez Carlos Viscasillas – 140 p., 155 p.  
Vedernikov Andrej – 234 p.  
Vengelis Julius – 26 p., 37 p., 38 p.  
Vengris Mikas – 61 p.  
Venskauskaitė Reda – 221 p.  
Verstraete J.-B. – 108 p.  
Vertelis Vilius – 102 p., 192 p., 211 p.  
Vidal Loic – 84 p.  
Vienažindytė Dominyka – 177 p.  
Vilčiauskas Linas – 57 p.  
Vilkevičius Kernius – 86 p.  
Viñuales Ederlinda – 140 p.  
Virbukas Darius – 242 p.  
Virkėtis Robertas – 107 p., 163 p.  
Vizbaras Domantas – 234 p.  
Voitechovic Editā – 103 p.  
Vyšniauskas Džiugas – 41 p.

## W

Wu Tung-Kung – 70 p., 162 p., 165 p., 170 p., 174 p.  
Wyrzykowski Łukasz – 64 p.

## **Z**

Zalieckas Martynas – 121 p.  
Zdanavičius Justas – 63 p., 152 p.  
Zelioli Andrea – 90 p. , 92 p., 100 p., 149 p., 219 p.,  
232 p., 236 p.  
Zhairabany Hassan – 212 p.  
Zharchenko Ihor – 184 p.  
Zielinski P. – 64 p.  
Zubauskas Laimis – 74 p.  
Zubovas Kastytis – 79 p., 153 p., 154 p.

## **Ž**

Žalėnas Vilius – 247 p.  
Žarkov Aleksej – 29 p.  
Žemaitytė Patricija – 178 p.  
Žemgulytė Justina – 248 p.  
Žurauskas Edvardas – 168 p.  
Žurauskienė Nerija – 102 p. , 192 p., 211 p.  
Žuvelis Justas – 90 p., 92 p.  
Žyprė Paulina – 100 p.



**Lietuvos  
Nacionalinė  
Fizikos  
Konferencija**