

MTEP (MTTP) PROJEKTO ĮGYVENDINIMO ATASKAITA*

_____ Nr. _____

(Data)

Vilnius

1. Projekto pavadinimas, vykdytojas ir biudžetas

Projekto pavadinimas	Puslaidininkinėse ir nano-technologijose perspektyvių medžiagų kūrimas ir charakterizavimas nuostoviosios ir ultrasparčiosios spektrometrijos metodais plačioje spektrinėje srityje
Akronimas	LaMeTech Mokslas
Projekto vykdytojas/ vykdančioji institucija	Vilniaus universitetas
Projekto finansavimo ir administravimo sutarties numeris	VP1-3.1-ŠMM-08-K-01-004
Projektui įgyvendinti skirta lėšų suma, €	1375299,47
Tarpiniuose ir galutiniame mokėjimo prašymuose prašomos pripažinti tinkamomis finansuoti lėšos (nurodant kiek buvo patvirtinta), €	2012 metais 265697,35
	2013 metais 513271,17
	2014 metais 434688,89
	2015 metais 161642,06

2. MTEP (MTTP) projekto sritis, vadovas ir trukmė

MTEP (MTTP) projekto pavadinimas; mokslų sritis bei kryptis(-ys)	Puslaidininkinėse ir nano-technologijose perspektyvių medžiagų kūrimas ir charakterizavimas nuostoviosios ir ultrasparčiosios spektrometrijos metodais plačioje spektrinėje srityje; Fizinių mokslų sritis (000P) Fizikos (02P) ir Chemijos (03P) kryptys
MTEP (MTTP) projekto vadovas	Prof. Valdas Šablinskas

* Jei buvo įgyvendinami keli MTEP (MTTP) projektai, MTEP (MTTP) projekto įgyvendinimo ataskaita pildoma atskirai kiekvienam iš jų.

	Laipsnis, pavardė	Dalyvavo poveiklėje
MTEP (MTP) vykdydžiusi grupė	Dr. J. Dodonova	1.1.1 (1.1.1.1)
	Prof. S. Tumkevičius	1.1.1 (1.1.1.1 - 3)
	Dokt. S. Višniakova	1.1.1 (1.1.1.1 - 3)
	Dokt. J. Bucevičius	1.1.1 (1.1.1.1 - 3)
	Doc. A. Žilinskas	1.1.1 (1.1.1.1 - 3)
	Dr. Reda Kubiliūtė (pakeitė Dr.V.Ratautaitė)	1.1.1 (1.1.1.5)
	Prof. A. Ramanavičius	1.1.1 (1.1.1.4 - 6)
	Dokt. I. Balevičiūtė	1.1.1 (1.1.1.4 - 6)
	Dokt. L. Mikoliūnaitė	1.1.1 (1.1.1.4 - 6)
	Prof. A. Abrutis	1.1.1 (1.1.1.7 - 10)
	Dr. V. Plaušinitienė	1.1.1 (1.1.1.8 - 10)
	Doc. A. Ramanavičienė	1.1.1 (1.1.1.11 - 13)
	Dokt. A. Makaravičiūtė	1.1.1 (1.1.1.11 - 13)
	Prof. A. Padaruskas	1.1.1 (1.1.1.14 - 16)
	Dokt L. Taujenis	1.1.1 (1.1.1.14 - 16)
	Prof. S. Tautkus	1.1.1 (1.1.1.14 - 16)
	Prof.V. Vičkačkaitė	1.1.1 (1.1.1.14 - 16)
	Dr. A. Žalga	1.1.1 (1.1.1.17-18)
	Dokt. Skirmantė Butkutė	1.1.1 (1.1.1.17-18)
	Dokt. Martynas Misevičius	1.1.1 (1.1.1.17-18)
	Prof. A. Kareiva	1.1.1 (1.1.1.17-18)
	Dokt. O. Darčanova	1.1.1 (1.1.1.19 - 20)
	Dr. Edita Garškaitė	1.1.1 (1.1.1.19 - 20)
	Dokt. J. Pilipavičius	1.1.1 (1.1.1.21 - 22)
	Prof. A. Beganskienė	1.1.1 (1.1.1.21 - 22)
	Dr. S. Šakirzanovas	1.1.1 (1.1.1.21 - 22)
	Dokt. Kipras Redeckas	1.1.1 (1.1.1.23)
	Dr. Kęstutis Steponkevičius	1.1.1 (1.1.1.23)
	Doc. M. Vengris	1.1.1 (1.1.1.23-24 ir 31)
	Dr. Martynas Peckus	1.1.1 (1.1.1.23-24 ir 31)
	Dokt. V. Voiciuk	1.1.1 (1.1.1.25)
	Dr. E. Gaižauskas	1.1.1 (1.1.1.26)
	Dr. V. Pyragaitė	1.1.1 (1.1.1.27)
Prof. V. Smilgevičius	1.1.1 (1.1.1.28)	
Dr. R. Butkus	1.1.1 (1.1.1.28)	
Dr. R. Antipenkov	1.1.1 (1.1.1.29)	
Dr. A. Varanavičius	1.1.1 (1.1.1.29)	
Dokt. T. Stanislauskas	1.1.1 (1.1.1.29)	
Dr. V.Vaičiaitis	1.1.1 (1.1.1.30)	
Dr. V. Jarutis	1.1.1 (1.1.1.32)	
Dr. Aidas Matijošius	1.1.1 (1.1.1.32)	
Doc. J. Šulskus	1.1.1 (1.1.1.33)	
Dr. S. Toliautas	1.1.1 (1.1.1.33)	

Dr. A. Maršalka	1.1.1 (1.1.1.33)
Dokt. S. Malickaja	1.1.1 (1.1.1.33)
Dr. V. Klimavičius	1.1.1 (1.1.1.33)
Dr. K. Aidas	1.1.1 (1.1.1.34 - 35)
Prof. V. Balevičius	1.1.1 (1.1.1.34)
Doc. V. Urbonienė	1.1.1 (1.1.1.35)
Dr. J. Čeponkus	1.1.1 (1.1.1.35)
Dr. A. Gruodis	1.1.1 (1.1.1.35)
Dokt. S. Tamošaitytė	1.1.1 (1.1.1.35)
Prof. V. Šablinskas	1.1.1 (1.1.1.36)
Prof. V. Aleksa	1.1.1 (1.1.1.36)
Prof. J. Matukas	1.1.1 (1.1.1.37)
Dokt. M. Pučetaitė	1.1.1 (1.1.1.36)
Doc. S. Pralgauskaitė	1.1.1 (1.1.1.38)
Dr. R. Grigalaitis	1.1.1 (1.1.1.39)
Dr. A. Brilingas	1.1.1 (1.1.1.39)
Dr. V. Kalendra	1.1.1 (1.1.1.39)
Dokt. M. Ivanov	1.1.1 (1.1.1.40)
Dr. R. Tamošiūnas	1.1.1 (1.1.1.41 - 42)
Dr. T. Girnys	1.1.1 (1.1.1.41 - 42)
Dokt. I. Reklaitis	1.1.1 (1.1.1.42)
Dr. P. Ščajev	1.1.1 (1.1.1.43)
Dr. S. Nargėlas	1.1.1 (1.1.1.43)
Prof. E. Gaubas	1.1.1 (1.1.1.44 - 45)
Dr. T. Čeponis	1.1.1 (1.1.1.44 - 45)
Prof. G. Tamulaitis	1.1.1 (1.1.1.46-48)
Dr. J. Mickevičius	1.1.1 (1.1.1.46-48)
Dr. D. Ševčenko	1.1.1 (1.1.1.46-48)
Dr. D. Dobrovolskas	1.1.1 (1.1.1.46-48)
Dokt. J. Jurkevičius	1.1.1 (1.1.1.46-48)
Dr. K. Genevičius	1.1.1 (1.1.1.49 - 50)
Dokt. G. Juška	1.1.1 (1.1.1.49 - 50)
Prof. K. Arlauskas	1.1.1 (1.1.1.51 - 52)
Dokt. T. Grigaitis	1.1.1 (1.1.1.51 - 52)
Prof. S. Juršėnas	1.1.1 (1.1.1.53 - 55)
Dokt. T. Serevičius	1.1.1 (1.1.1.53 - 55)
Dr. A. Miasojedovas	1.1.1 (1.1.1.53 - 55)
Dokt. L. Skardžiūtė	1.1.1 (1.1.1.53 - 55)

53 mokslininkai, 22 doktorantai, 6 doktorantai, kurie įgyjo mokslinį laipsnį projekto metu. Viso projektą įgyvendino 81 tyrėjas, iš kurių nepertraukiamus metus projekte išdirbo 76.

MTEP (MTTP) projekto įgyvendinimo pradžia (metai, mėn.)	2012 m. rugpjūčio mėn.
MTEP (MTTP) projekto įgyvendinimo pabaiga (metai, mėn.)	2015 m. rugsėjo mėn.

3. MTEP (MTTP) projekto tikslas ir uždaviniai

Projekto tikslas: Gerinti žmogiškųjų išteklių kokybę ir kiekybę Vilniaus universitete, siekiant padidinti MTTP pajėgumą ir potencialą.

Projekto uždaviniai: Tobulinti tyrėjų kvalifikaciją ir kompetenciją Vilniaus universitete, skatinant aukšto lygio tarp. mokslinius tyrimus ir tyrėjų mobilumą.

Projekto veiklos: Skatinti aukšto tarptautinio lygio mokslinių tyrimų vykdymą ir tyrėjų mobilumą 7.2 Nacionalinės kompleksinės programos tematikose.

Įsipareigojimai paraiškoje: 37 ISI publikacijos WOS žurnaluose; 73 įdarbinti pagal darbo sutartis tyrėjai; 38 pranešimai tarpt. konferencijose; 1 vnt. ataskaita ŠMM.

Projekto tikslas yra "MTEP veiklų vykdymas puslaidininkinėse ir nano-technologijose perspektyvių medžiagų kūrimui ir charakterizavimui nuostoviosios ir ultrasparčiosios spektrometrijos metodais plačioje spektrinėje srityje". Siekiant šio tikslo projekto metu buvo planuojama gerinti žmogiškųjų išteklių kokybę ir kiekybę Vilniaus universitete, tuo pačiu didinant MTTP pajėgumą ir potencialą bei skatinant aukšto tarptautinio lygio mokslinių tyrimų vykdymą ir tyrėjų mobilumą 7.2 Nacionalinės kompleksinės programos tematikose.

Projekto tikslas dėl savo kompleksiskumo galėjo būti pasiektas tik suburus į bendrą kolektyvą pavienes mokslininkų grupes iš Vilniaus universiteto Fizikos ir Chemijos fakultetų bei Taikomųjų mokslų instituto. Tokiu būdu buvo suformuota solidi molekulinųjų darinių su pageidaujomis optinėmis, elektrinėmis ir mechaninėmis charakteristikomis kūrimo bazė, reikalinga selektyviam medžiagų kurimui bei naujų technologijų vystymui. Projekte buvo realizuotas tamprus grįžtamasis ryšis tarp naujų medžiagų kūrimo bei jų charakterizavimo metodikų, kurios remiasi spektroskopija ir sparčiai besivystančia ultrasparčiąja lazerine spektroskopija. Norint pasiekti užsibrėžtą mokslinių tyrimų ir eksperimentinės plėtros tikslą šiame projekte buvo sprendžiami **uždaviniai**, jungiantys naujas medžiagas, medžiagotyrimines žinias ir prietaisų technologijas, t.y.:

- 1.1. Naujų organinių puslaidininkinių medžiagų, nanodarinių aukštosios technologijoms kūrimas ir tyrimas.
- 1.2. Pažangių ultrasparčiosios, nuostoviosios ir mikrobangės spektroskopijos metodų vystymas bei jų taikymo ribų plėtra.
- 1.3. Pažangių puslaidininkinių technologijų vystymas bei jų taikymas opto- ir nanoelektronikos proveržio kryptyse.

4. MTEP (MTTP) projekto vykdymo eiga ir rezultatai

Projekte buvo numatyta bendra veikla - Aukšto tarptautinio lygio mokslinių tyrimų vykdymo ir tyrėjų mobilumo 7.2 Nacionalinės kompleksinės programos tematikose skatinimas.

Projekto pradžioje buvo suorganizuota bendras seminaras, kurioje dalyvavo mokslinės grupės iš Fizikos fakulteto, Chemijos fakulteto ir Taikomųjų mokslų instituto. Grupių atstovai trumpai pristatė savo galimybes projekte iškeltų uždavinių sprendimui, bei įvardijo mokslines problemas, kurių sprendimui reikia kitų mokslinių grupių pagalbos. Seminaro metu susiformavo laikinos

jungtinės chemikų ir fizikų mokslinės grupės bendram projekto užduočių sprendimui. Jungtinės grupės veikė viso projekto metu, tik kito jų sudėtis ir dydis. Tokių grupių darbo efektyvumą iliustruoja didelis projekto publikacijų skaičius, publikacijų autorių mišrūs sąrašai bei tarptautinių mokslinių žurnalų, kuriuose jos atspausdintos aukšti citavimo indeksai (žr. priedą "Projekto publikacijos").

Projekte buvo išskirtos 55 mokslinės poveiklės: 22 poveiklės I projekto uždaviniui spręsti, 18 poveiklių II uždaviniui spręsti ir 15 poveiklių III uždaviniui spręsti. Projekte gauti moksliniai rezultatai yra aprobuoti dalyvaujant tarptautinėse mokslinėse konferencijose - dalyvauta 41 konferencijoje, kuriose skaityt 44 moksliniai pranešimai, šių rezultatų pagrindu paruošti ir atspausdinti 89 moksliniai straipsniai. Paminėtina, kad didžioji dalis konferencijų buvo pasaulinio lygio ir projekte gauti rezultatai jose buvo pristatomi, darant tiek žodinius tiek ir standinius pranešimus, 5 pranešimai buvo kviestiniai (žr. priedą "Projekto pranešimai konferencijose"). Taip pat projekto rezultatų pagrindu paruošta ir apginta daktaro disertacija: Sigita Višniakova "Pirazolo, 1,10-fenantrolino ir 1,8-naftiridino junginių, kondensuotų su bicikliniais fragmentais, sintezė ir fotofizikinių savybių tyrimas". Dar 5 doktorantai įgyjo mokslo laipsnį šiame projekte. Projekto vykdymo metu kiekvienoje poveiklėje atliktų darbų apimtis, gauti rezultatai, jų reikšmingumas ir inovatyvumas bei sklaida yra aprašyti lentelėje:

Poveiklės numeris ir pavadinimas	Poveiklėje gauti rezultatai
Projekto uždavinys Nr. 1 "Naujų organinių puslaidininkinių medžiagų, nanodarinių aukštosios technologijos kūrimas ir tyrimas"	
<p style="text-align: center;">1.1.1.1 (1.1.1.1)</p> <p>Kondensuotų aromatinių azaheterociklų pradinių junginių sintezė</p>	<p>Įgyvendindinant projekte iškeltus tikslus buvo reikalinga atlikti planuojamų sintetinti azoto heterociklų sintezės kelių ir schemų analizę, susintetinti pradinius junginius, kurie būtų tinkami galutinių produktų, pasižyminčių vertingomis fotofizikinėmis ir fotoelektrinėmis savybėmis, sintezei, sukurti efektyvius kai kurių azotinių heterociklų, turinčių išplėstą π-konjuguotą sistemą, sintezės būdus. Tam buvo pasirinkti du sintezės keliai. Vienas jų - tai heterociklų funkcionalizavimo įvairiomis aromatinėmis grupėmis kelias. Jo esmė yra pereinamaisiais metalais katalizuojamos kryžminio jungimo reakcijos, panaudojant boro, magnio organinius junginius. Derinant šias reakcijas buvo tikimasi regioselektyviai atlikti C- ir N-arilimo reakcijas ir pasekoje funkcionalizuoti azaheterociklus tinkamais (het)aril fluoro- ir elektroforais įvairiose azaheterociklų padėtyse, sukonstruojant nelinijinės struktūros oligoarilenines sistemas. Šio tipo reakcijų panaudojimas žymiai sutrumpina reakcijos kelią ir su tuo susijusias reagentų, tirpiklių, energetinių išteklių, darbo ir laiko sąnaudas. Dėl šių priežasčių šios reakcijos dažnai yra priskiriamos „žaliajai“ chemijai. Be to, šių reakcijų pagalba galima susintetinti medžiagas, kurių klasikiniai metodais gauti nepavyksta arba sintezės metodai yra neefektyvūs. Šis sintezės kelias buvo panaudotas sintetinti arilpakeistus pirimidino žiedą turinčių heterociklų (pirolo[2,3-d]pirimidino) darinius. Kito sintezės kelio esmė, pritaikyto azotinių heterociklų, kondensuotų su karkasiniais biciklo[3.3.x]alkanų fragmentais, sintezėje, yra heterociklizacijos reakcijos. Taigi, šiame projekte, panaudojant azaheterociklų reaktivity ypatumus, aril ir hetaril struktūrinių fragmentų sujungimui buvo siekiama sukurti naują 2,4,7-triarilpirolopirimidinų sintezės metodą, pasitelkiant ortogonalias</p>

	<p>Pd(0), Ni(0) ir Cu(I) homogeninės katalizės reakcijos. Pradiniu junginių sintezei pasirinktas 4-chlor-2-metiltiropirolo[2,3-d]pirimidinas. Jis buvo susintetintas keliomis viena po kitos sekančiomis reakcijomis iš komerciškai prieinamo 6-aminouracilo, ciklizuojant jį su chloracto aldehidu ir gautą 4-okso-2-metiltiropirolopirimidiną chlorinant fosforo oksichloridu. Nustatyta, kad tinkamiausia katalitine sistema reakcijai atlikti yra paladžio acetatas/2-bifenildicikloheksil-fosfinas/kalio fosfatas. Susintetinti pirmieji 4-aril-2-metiltiropirolo[2,3-d]pirimidinai. Pastarieji, optimizavus reakcijų sąlygas, priešingai nei 4-chlordarinys, reakcijoje su jodbenzenu, esant CuI/trans-1,2-diaminocikloheksano/K₃PO₄ katalitinei sistemai geromis išeigomis sudarė 4-aril-7-fenil-2-metiltiropirolo[2,3-d]pirimidinus.</p> <p>Pradiniais junginiais numatytų projekte kondensuotų su karkasiniais fragmentais heterociklų, galinčių pasižymėti elektrooptinėmis savybėmis, sintezei buvo susintetinti biciklo[3.3.0]oktano, biciklo[3.3.1]nonano ketonai ir diketonai. Diketonus veikiant aromatiniais aldehidais buvo susintetinti atitinkami 3,7-diarilidenbiciklo[3.3.1]nonan-2,6-dionai. Pastarųjų sintezei buvo sukurtas naujas efektyvus (ekologiškesnis ir ekonomiškesnis nei iki šiol naudojami) sintezės metodas, kurio esmė yra reakcija kietame būvyje, t.y. sutrinant ir tarpusavyje sumaišant karbonilinius junginius lygaus paviršiaus grūstuvėlyje be tirpiklio, esant katalitiniam natrio hidroksido kiekiui.</p> <p>Susintetinti karboniliniai junginiai buvo panaudoti naujų heterociklinių sistemų, turinčių 1,10-fenantrolino fragmentą, kuris yra dažnas struktūrinis fragmentas įvairiose medžiagose, pasižyminčiose fotoluminescencinėmis ir puslaidininkinėmis savybėmis, sintezei.</p> <p>Tokiu būdu, šiame projekto vykdymo etape buvo susintetinti reikalingi tolimesniems tyrimams pradiniai pirolo[2,3-d]pirimidino dariniai, ištirtos jų kryžminio jungimo C- ir N-arilinimo reakcijos. Nustatyta, kad kryžminio jungimo Pd(0)-katalizuojama Suzuki reakcija 4-chlorpirolopirimidine vyksta tik užblokavus N7 heterociklo padėtį, o N7-arilinimo reakcijos sėkmei didelės įtakos turi pakaitas 4-oje heterociklo padėtyje. 4-Arilpirolopirimidinai Cu(I) katalizuojamoje reakcijoje su jodbenzenu, esant trans-1,2-diaminocikloheksano, sudaro atitinkamus N-fenilpirolopirimidinus labai geromis išeigomis. Tyrimo išdavoje surastas sintezės kelias ir sukurtos efektyvus ir paprastos sintezės metodikos 4,7-diarilpirolo[2,3-d]pirimidinams gauti. Taip pat buvo susintetinti pradiniai biciklo[3.3.1]nonan-2,6-diono, biciklo[3.3.1]nonan-3-ono, biciklo[3.3.0]oktan-3,7-diono dariniai, sukurtas ekologiškas jų arilidendarinių sintezės būdas ir susintetinti nauji arilidendenbiciklo[3.3.1]nonano dariniai. Ištyrus pastarųjų junginių reakcijas su fenilhidrazinu, 8-aminochinolin-7-karbaldehidu susintetintos naujos heterociklinės sistemos, kuriose karkasinio angliavandenilio fragmentas yra kondensuotas su pirazolo ir 1,10-fenantrolino heterociklais. Detaliau apie šiuos atliktus</p>
--	--

	tyrimus ir susintetintų naujų junginių spektroskopinį charakterizavimą tyrimo duomenys pateikti straipsniuose[6, 56].
<p style="text-align: center;">1.1.1.2 (1.1.1.2) Naujų nelinijinės struktūros pirimidino heterociklų aromatinių junginių sintezė ir junginių tyrimas</p>	<p>Pirmame šios poveiklės etape buvo optimizuojamos pirololo[2,3-d]pirimidino 4-os ir 7-os padėčių arilinimo reakcijų sąlygos. Vėliau šis darbas buvo tęsiamas, siekiant išplėsti sukurtų metodų taikymo ribas ir fotofizikiniams tyrimams susintetinti naujus šio pirimidino žiedą turinčio heterociklo darinius. Be to, buvo numatyta surasti sintezės būdą, įgalinantį įvesti aromatinės sistemas ir 2-oje pirolopirimidino padėtyje. Tuo tikslu buvo nuspręsta pasitelkti Ni(0)-katalizuojamą Kumada kryžminio jungimo reakciją.</p> <p>Atliktų tyrimų rezultate buvo optimizuotos Suzuki reakcijos C-arilinimo reakcijos ir gautų 6-arilpirolopirimidinų N-arilinimo reakcijos sąlygos. Parodyta, kad naudojant CuI/trans-1,2-diaminocikloheksaną/K₃PO₄ katalitinę sistemą, N-arilinimo reakcijoje galima naudoti ne tik ariljodidus, bet ir mažiau reaktinius arilbromidus. Reakcija gerai vyksta su arilhalogenidais, turinčiais tiek elektronodonorus, tiek ir elektronoakceptorinius pakaitus. Susintetinti septyni nauji pirololo[2,3-d]pirimidinai su vienodomis ir skirtingomis arilgrupėmis 4-oje ir 7-oje heterociklo padėtyse. Siekiant sukurti 2,4,7-triarilpirolopirimidinų, turinčių išplėstą π-konjuguotą elektroninę sistemą, sintezės būdą, 4,7-difenilpirolopirimidino pavyzdžiu buvo ištirta Ni(0)-katalizuojama Kumada reakcija su įvairiais arilmagnio halogenidais. Atlikta katalizatoriaus ir jo kiekio įtakos vertinimas minėto junginio reakcijos su bifenilmagnio bromidu rezultatui. Nustatyta, kad geriausia produkto išeiga pasiekama, naudojant 2.5 mol% NiCl₂(dppe) katalizatoriaus ir Ni²⁺ redukcijai iki Ni(0) panaudojant atitinkamą Grinjaro reagentą. Taip pat buvo nustatyta, kad geriausi rezultatai gaunami, atliekant reakciją kambario temperatūroje, tirpikliu naudojant tetrahidrofuraną.</p> <p>Optimizuotomis reakcijos sąlygomis fotofizikiniams tyrimams buvo susintetinti 6 nauji nelinijinės struktūros pirolopirimidinai. Taigi, buvo pabaigti kurti nauji selektyvūs 4,7-diaril ir 2,4,7-triarilpirololo[2,3-d]pirimidinų sintezės metodai, pradiniu junginiu naudojant 4-chlor-2-metiltiopirololo[2,3-d]pirimidiną. Pirmą kartą parodyta, kad Ni(0)-katalizuojama kryžminio jungimo Kumada reakcija gali būti taikoma pirololo[2,3-d]pirimidino arildarinių sintezei. Pasiūlytas sintezės kelias susideda iš paeiliui atliekamų ortogonalų Pd(0), Cu(I) ir Ni(0)-katalizuojamas kryžminio jungimo reakcijų. Parodyta, kad sukurtas metodas sėkmingai gali būti naudojamas, įvedant skirtingas ir skirtingo konjugacijos laipsnio aromatinės grupes į pirolopirimidino 2-ą, 4-ą ir 7-ą padėtis, ir tinka funkcionalizuoti heterociklams, kuriuose kryžminio jungimo reakcijos nėra regioselektyvios.</p> <p>Nustatyta, kad susintetinti 4,7-diaril ir 2,4,7-triarilpirololo[2,3-d]pirimidinai yra stipriai mėlynai fluorescuojančios medžiagos. Naudojant sugerties ir fluorescencijos spektroskopiją, fluorescencijos kvantinio našumo bei fluorescencijos gesimo laikų matavimus, ištirtos jų fotoluminescencinės savybės chloroformo tirpaluose. Junginių fotofizikinės savybės buvo</p>

	<p>tiriamos bendradarbiaujant su prof. Juršėno vadovaujama grupe (VU, Taikomųjų mokslų institutas). Įvertinta struktūros įtaka fluorescencijos juostų padėčiai, fluorescencijos kvantiniam našumui ir spindulinės bei nespindulinės relaksacijos spartai. Nustatyta, kad didėjant 7-oje padėtyje esančio pakaito elektronodonoriškumui ir poliškumui stebimas bathochrominis fluorescencijos juostos poslinkis nuo 426 nm iki 562nm. Pakaito poliškumo įtaka fluorescencijos raudonajam poslinkiui didesnė yra stebima junginiams, turintiems 4-oje pirolpirimidino padėtyje fenilgrupę. Taip pat, nustatyta, kad 7-oje padėtyje esantis pakaitas stipriai įtakoja ir junginių fluorescencijos kvantinius našumus (Φ_f). Didėjant pakaito elektronodonoriškumui, didėja kvantinis našumas (nuo 14,7% iki 40%). Metiltiogrūpės pakeitimas fenilgrupe padidino Φ_f iki 50,6%. Taip pat pastebėta, kad junginiai, kuriuose 4-oje padėtyje bifenilgrupė yra pakeista į fenilgrupę, pasižymi didesniu fluorescencijos kvantiniu našumu (iki $\Phi_f = 48\%$ ir $58,6\%$). Tyrimo rezultatai pateikti straipsnyje [56].</p>
<p>1.1.1.3 (1.1.1.3) Naujų kondensuotų su karkasiniais fragmentais kondensuotų piridino bei pirazino heterociklų darinių sintezė ir junginių tyrimas</p>	<p>Naudojant sukurtą 2,4,7-triarilpirolpirimidinų sintezės metodą detalesniems fotofizikinių savybių tyrimams buvo susintetinti keletas naujų pirolpirimidino oligoarilenų ir ištirtos jų solvatochromizmas, naudojant įvairaus poliškumo organinius tirpiklius (dimetilsulfoksidas, acetonitrilas, tetrahidrofuranas, toluenas) bei fotofizikinės savybės polistireno matricoje. Matavimai polistireno matricoje buvo pasirinkti dėl tos priežasties, kad OLED ir kitų optoelektronikos prietaisų kūrimo labai svarbu žinoti, kokiomis savybėmis pasižymi medžiagos kietame būvyje ir plėvelėje.</p> <p>Didėjant tirpiklio poliškumui, yra stebimas fluorescencijos juostos bathochrominis poslinkis nuo 20 nm iki 70 nm. Tai byloja apie stipriai išreikštas vidujmolekulines krūvio pernašos būsenas sužadintose molekulėse.</p> <p>Nustatyta, kad didžiausias bathochrominis fluorescencijos poslinkis buvo stebimas junginiui su p-(difenilamino)fenilgrupe 7-oje heterociklo padėtyje ($\lambda_{em}=504$ nm toluene ir 574 nm THF). Mažiausias poslinkis – junginiui, turinčiam elektronoakceptorinę CN grupę. Pirolpirimidino darinių fluorescencijos kvantinis našumas įvairaus poliškumo tirpikliuose kito nuo 1,3% iki 76,3%. Daugelio junginių kvantinis našumas didėja, didėjant tirpiklio poliškumui. Taigi, pakaitų pirolpirimidino fenilgrupėse prigimtis turi didelę įtaką junginių fluorescencijos kvantinio našumo dydžiui. Didžiausias fluorescencijos kvantinis našumas ir didžiausias fluorescencijos gesimo laikas buvo stebimas junginiui 4,7-difenil-2-metiltiopirolpirimidinui ($\Phi_f=76.3\%$, $\tau=10.33$ ns). Polistireno matricoje junginių fluorescencijos maksimumai yra pasislinkę trumpesnių bangų pusėn, lyginant su juostų padėtimi poliniuose tirpikliuose. Tirtų junginių fluorescencijos juostų padėtis polistireno matricoje yra labia artima juostų maksimumams, išmatuotiame nepoliniame tirpiklyje toluene. Taip pat PS matricoje buvo stebimos ir mažesnės spindulinės ir nespindulinės relaksacijos gesimo spartos vertės. Iš to galima daryti išvadą, kad tirpaluose</p>

	<p>dominuoja tokia konformacija, kuri apsprendžia didesnę aromatinių grupių ir heterociklo konjugaciją. Tuo tarpu, sustabdžius grupių rotacijas viena kitos atžvilgiu, “užšaldant” molekules polistireno matricoje, sumažėja konjugacija tarp π-elektroninių sistemų, kas sumažina medžiagų fluorescencijos kvantinį našumą, spindulinės ir nespindulinės gesimo spartą.</p> <p>Taip pat šioje poveiklėje, siekiant sukurti naujas medžiagas, galinčias rasti taikymą optoelektronikos prietaisų kūrime, buvo susintetinti policikliniai piridino žiedą turintys heterociklai (chinolino, benzo- ir naftochinolinų dariniai). Pastarieji buvo panaudoti kondensacijai su anksčiau susintetintais bicikloalkanais. Nustatyta, kad biciklo[3.3.1]nonan-2,6-dionas dalyvauja ciklokondensacijos reakcijoje su atitinkamais 2-aminopiridinkarbaldehidais, esant bazės. Reakcijoje dalyvauja viena diketono karbonilgrupė ir susidaro atitinkami biciklo[3.3.1]nonano fragmentą turintys 1,8-naftiridiniai. Atliekant kondensaciją padidintame slėgyje, reakcijoje dalyvauja ir antroji karbonilgrupė bei karbonilinių junginių α-padėtis. Susidarant bis(1,8-naftiridino)biciklo[3.3.1]nonanams. Tokiu būdu, buvo susintetinti nauji poližiedžiai unikalios struktūros heterociklai, kurie dėl molekules sudarančių struktūrinių elementų yra perspektyvūs, kaip fotojautrios ir puslaidininkinėmis savybėmis pasižyminčios medžiagos.</p> <p>Bendradarbiaujant su VU Fizikos fakulteto mokslininkais buvo ištirtos susintetintų medžiagų fizikinės, fotofizikinės, elektrooptinės ir/ar puslaidininkinės savybės. Buvo detalai ištirtos 18-os susintetintų chinolino ir benzo- bei naftochinolinų fotofizikinės savybės tirpaluose ir kietame būvyje, naudojant fotoelektroninę spektroskopiją ore, sugerties ir liuminescencijos spektroskopiją. Įvertinta struktūros įtaka fotofizikinėms ir elektroninėms charakteristikoms. Išmatuotos molekulių HOMO ir LUMO lygmenų energijos, fluorescencijos kvantiniai našumai, įvertinta tirpiklio įtaka PL charakteristikoms. Nustatyta, kad optinis tarpas didėja keičiantis pakaitams tokia tvarka: aminos (mažiausias optinis tarpas), tetrazolas, iminofosforanas, chlorgrupė. Papildomas benzeno žiedas iššaukia tiek sugerties, tiek fluorescencijos spektruose batochrominį poslinkį. Sluoksnių, gautų terminio garinimo būdu, tyrimai parodė, kad fluorescencijos juostų maksimumai stebimi 477 nm – 596 nm intervale (nuo mėlynos iki oranžinės spalvos). Tuo tarpu, chloroformo tirpaluose buvo stebima fluorescencija nuo mėlynos iki žalios spalvos (nuo 471 nm iki 537 nm). Eksperimentai, atlikti OLED multisluosniuose parodė, kad kai kurie junginiai rodė žalios spalvos EL. Pirminiai elektroluminescencijos tyrimai leidžia daryti išvadą, kad tirtos medžiagos gali būti panaudotos organinėje elektronikoje, OLED kūrime. Detaliau apie junginių sintezę ir naujų susintetintų junginių savybes žiūrėti straipsnyje [57].</p>
<p>1.1.1.4 (1.1.2.1) Puslaidininkinėmis savybėmis pasižyminčių</p>	<p>Pasiūlytas naujas sintezės metodas ir technologija sintetinti puslaidininkinėmis savybėmis pasižyminčius polimerus. Susintetinti polipirolas ir poli-3-nitro anilinas, parinktos optimalios jų elektrocheminės sintezės sąlygos. Buvo susintetinti</p>

<p>polimerų elektrocheminės sintezės ir sąlygų parinkimas</p>	<p>teofilino ir kofeino molekuliniais įspaudais modifikuoto polipirolo sluoksniai ir tokie sluoksniai buvo pritaikyti teofilino molekulių nustatymui. Molekuliniais teofilino ir kofeino įspaudais modifikuoto polimero polipirolo sluoksniai buvo suformuoti panaudojant elektrocheminės polimerizacijos metodą. Pirmiausia buvo paruošiamo polimerizacijai reikalingi tirpalai, sudaryti iš 50 mM koncentracijos pirolo ir 5 mM kofeino ir teofilino ištirtintų fosfatiname buferiniame tirpale. Prieš pradėdant elektrocheminę polipirolo polimerizaciją, prie elektrocheminės grandinės buvo prijungtas kvarco kristalo mikrogravimetrijos lustas, kuris toliau buvo naudojamas kaip darbinis elektrodas. Šis lustas buvo paruošiamas sluoksnių polimerizacijai prieš tai atliekant jo nuvalymą. Nuvalymas buvo atliekamas 10 min. plaunant elektrocheminę celę, pastoviu 1 mL/min greičiu leidžiant fosfatinį buferinį tirpalą. Kitame valymo etape buferinio tirpalo srovė buvo stabdoma ir lustas buvo valomas pridėdant potencialą nuo -0,2 iki +1,5 V prieš Ag/AgCl prie 0,1 V/s. Atliekant šį ciklinės voltamperometrijos eksperimentą, buvo stebimos deguonies adsorbcijos ir desorbcijos kreivės o iš jų buvo įvertinamas lusto nuvalymo efektyvumas. Buvo nustatyta, kad pakanka atlikti 10 ciklų, norint gauti švarų lusto paviršių. Toliau, ant švaraus lusto paviršiaus buvo formuojami polipirolo sluoksniai. Celė buvo užpildoma pradiniu polimerizacijos tirpalu, tuomet buvo pridėdama potencialas: 1 s buvo naudojamas +1,0 V potencialas, o 10 s buvo naudojamas +0,1 V potencialas. Tokios sąlygos leido užtikrinti reikiamą pusiausvyrinę polipirolo monomerų koncentraciją prie elektrodo paviršiaus. Viso buvo panaudota 300 potencialo impulsų. Cheminė molekuliniais įspaudais modifikuoto ir nmodifikuoto elektrai laidaus polimero polipirolo sintezė buvo atliekama vandenyje. Taip pat į pradinį polimerizacijos mišinį buvo pridėdama etanolio, tokiu būdu buvo siekiama ištirti etanolio įtaką susiformavusiems sluoksniams. Šie sluoksniai buvo suformuoti ant boru legiruoto nano kristalinę struktūrą turinčio deimanto padėklo. Cheminė polipirolo su molekuliniais ir be įspaudų sintezė buvo atliekama kambario temperatūroje 72 valandas.</p> <p>Kito susintetinto polimero tyrimo tikslas buvo įvertinti keleto nanomedžiagų įtaką elektrocheminiui vario (Cu(II)) jonų nustatymui naudojant stikliškosios anglies (SA) elektrodą modifikuotą poli-3-nitroanilinu (poli-3NA). Šiam tikslui pirmiausia ant SA elektrodo paviršiaus nusodinamas grafito oksidas (GO), grafitas, magnetitas (Fe₃O₄), aukso-chitosanas (AuChts) ar daugiasluoksnio anglies nanovamzdėliai (DSANVs). Toliau elektrodas elektrochemiškai modifikuojamas poli-3NA ties 100 potencialo ciklų, intervale nuo +0,9 V iki +1,4 V prieš Ag/AgNO₃, kuomet potencialo skleidimo greitis – 100 mV/s. Elektrocheminė nitro grupių redukcija atliekama ant modifikuoto SA elektrodo paviršiaus 100 mM HCl tirpale, potencialo intervale nuo -0,1 V iki -0,8 V prieš Ag/AgCl/(KCl_{sat}), kai potencialo skleidimo greitis – 100 mV/s. Nanomedžiagomis ir poli-3NA modifikuoti elektrodai toliau</p>
---	---

	<p>pritaikomi Cu(II) jonų nustatymui naudojant diferencinę pulsinę voltamperometriją. Atlikus tyrimus buvo nustatyta, kad SA elektrodas pirmiausiai modifikuotas DSANVs, tada poli-3NA ir galiausiai elektrochemiškai redukuojant nitro grupes pasižymėjo didžiausiu jautrumu nustatant Cu(II) jonus, o nustatymo riba naudojant šį elektrodą yra $0,5 \times 10^{-9}$ M. Išsamesni rezultatai pateikti [58-60] straipsniuose.</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.5 (1.1.2.2) Susintetintų polimerų sluoksnių charakterizavimas optiniais metodais</p>	<p>Naujų mokslinų sukurtų technologijų pagrindu buvo gauti aktyvūs polipirolo sluoksniai. Sukurtų medžiagų, pasižyminčių elektroliuminescencija, tyrimai atlikti naudojant spektroskopinius analizės metodus. Elipsometriniiais ir elektrocheminio impedanso spektroskopijos metodais buvo charakterizuoti tiek molekuliniais įspaudais modifikuoto polipirolo tiek ir sluoksnių modifikavimui naudotų baltymų tarpusavio sąveika. Buvo panaudoti ir elektroliuminescencijos metodai tiriant medžiagų taikomų elektrochemiškai sintetinamų polimerų modifikavimui. Elektrocheminio impedanso spektroskopijos matavimai buvo atliekami unikalioje, daugiakanalėje celėje. Matavimai šiuo spektroskopiniu metodu buvo atliekami tuo pačiu metu molekuliniais įspaudais modifikuoto ir nemodifikuoto polipirolo sluoksniams. Matuojamų dažnių diapazonas buvo nuo 10 Hz iki 100 kHz. Darbinio elektrodo plotas buvo 28 mm². Elektrocheminio impedanso tyrimai, skirti nustatyti teofilino sąveikos su įspaudais modifikuoto ir nemodifikuoto polipirolo sluoksniais, buvo atliekami patalpinant elektrodą, padengtą polipirolo sluoksniu, į tirpalą, kuriame vienu atveju nebuvo teofilino molekulių, o kitu atveju tirpalą sudarė teofilino molekulės, paskirsčiusios buferiniame tirpale. Tuomet buvo registruojamas elektrocheminio impedanso spektras. Iš nustatytų spektrų buvo apskaičiuojama elektrinė sluoksnio talpa, kuri kito, priklausomai nuo skirtingų teofilino koncentracijų tirpale. Elektrinės talpos kinetiką buvo registruojama tol, kol buvo pasiektos pusiausvyros sąlygos. Iš šių duomenų toliau buvo nustatinėjamos įspaudais modifikuoto ir nemodifikuoto polipirolo sluoksnio savybės. Daugiasluoksnių struktūrų optinės savybės taip pat buvo nustatomos panaudojant spektrinės elipsometrijos ir atspindžio metodikas. Buvo gauta, kad elipsometrinių parametrų Δ ir Ψ priklausomybės nuo bangos ilgio, sluoksniams, suformuotiems panaudojant skirtingos koncentracijos etanolį skyrėsi smailių skaičiumi. Sistemoje, kur formavimui buvo naudojamas 1% etanolio buvo 4 smailės o sistemoje, kur buvo panaudota 10% etanolio - 3 smailės. Buvo atlikti sluoksnių difuzinės šviesos sklaidos matavimai spektrofotometru, matuojančiu plačiame dažnių ruože. Buvo gauta, kad esant didesniems bangos ilgiams atspindys nuo sluoksnių, kurių formavimui buvo panaudotos skirtingos etanolio koncentracijos skyrėsi. Sluoksnis, suformuotas naudojant 10% etanolio buvo "tankesnis", negu sluoksnis suformuotas naudojant 1% etanolio. Atspindžio intensyvumo ir spektrinės elipsometrijos metodikomis gauti rezultatai gerai sutapo. Sukurtos tyrimo naujos metodikos, kurios leis tiksliau ir selektyviau įvertinti</p>

	<p>suformuotų sluoksnių savybes ir struktūrą. Išsamesni tyrimo rezultatai pateikti straipsniuose [12, 61].</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.6 (1.1.2.3) Puslaidininkinėmis savybėmis pasižyminčių junginių sintezės optimizavimas ir tyrimas SEM ir kitais metodais</p>	<p>Nanodarinių aukštosios technologijos kūrimas ir jų taikymas yra aktualus visų mokslo sričių mokslininkų uždavinys. Šio projekto metu buvo atlikti tyrimai, kurių metu buvo įvertinta ir optimizuota polipirolo ir aukso nanodalelių sintezės schema. Buvo pasiūlyta nauja aukso nanodalelių padidinimo bei jų padengimo polipirolo sluoksniu metodika. Susidariusios aukso nanodalelės buvo tiriamos spektrofotometriškai, dinaminio šviesos sklaidos metodu bei skenuojančiu elektroniniu mikroskopu. Pradiniame tirpale aukso nanodalelių dydis buvo 10 nm. Į tirpalą su šiomis aukso nanodalelėmis pridėjus aukso rūgšties po 7 val. buvo stebimas jų padidėjimas iki 30 – 40 nm diametro. Aukso nanodalelių augimas tirpale esant aukso rūgšties bei pirolo buvo registruojamas spektrofotometriškai pagal aukso nanodalelės bei polipirolo būdingų smailių atsiradimą bei didėjimą. Skenuojančio elektroninio mikroskopo vaizduose matome, kad aukso nanodalelės padengtos polipirolo sluoksniu agreguoja ir sudaro vientisą nanokompozitinę struktūrą su maždaug tolygiai joje pasiskirsčiusiomis aukso nanodalelėmis. Tokių agregatų susidarymą įtakojo tai, kad sintezės tirpale nebuvo detergento. Taip pat papildomai buvo ištirtos sidabro nanodalelės ir jų savybės, tikintis vėliau jas pritaikyti sidabro nanodalelių/polipirolo kompozitų tyrimams. Buvo ištirtas krūviu stabilizuotų sidabro nanodalelių nusodinimas iš suspensijos, kurios sudėtyje yra tanino rūgšties, ant žėručio padengto poli(alilamino hidrochloridu) (PAH) sluoksniu. Pirmiausia dydžio pasiskirstymas, stabilumas ir elektrokinetinės sidabro nanodalelių savybės buvo nustatytos peršviečiamu elektroniniu mikroskopu, dinaminės šviesos sklaidos metodu ir mikroelektroforezės pagalba. Sidabro nanodalelių nusodinimo kinetika esant žinomam kiekiui tanino buvo išmatuota esant 10^{-2} M joninei jėgai. Rezultatų interpretavimui buvo panaudotas nuoseklios atsitiktinės adsorbcijos modelis. Tyrimų išsamesni rezultatai pateikti straipsniuose [60, 62].</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.7 (1.1.3.1) ZnO ir indžio legiruotų ZnO sluoksnių sintezės tyrimai PI-MOCVD, AS-MOCVD ir HW-CVD būdais</p>	<p>Naujų optoelektronikos ir elektronikos pramonei svarbių naujų technologijų ir medžiagų kūrimui skirtas išsamus tyrimas, kurio metu buvo gautos naujos medžiagos su reikalingomis optinėmis ir elektrinėmis savybėmis. Tyrimo metu buvo ištirti ir optimizuoti nusodinimo iš cheminių garų fazės sąlygas puslaidininkiniams ir elektrai bei šviesai laidiesiems (ZnO ir In legiruoto ZnO) sluoksniams gauti, ištirti sluoksnių struktūrą ir savybes, susintetinti naujus aukštos kokybės sluoksnius, perspektyvius taikymams optoelektronikoje. Tuo tikslu buvo suformuoti cinko oksido sluoksniai naudojant skirtingas cheminio nusodinimo iš garų fazės (CVD-Chemical Vapor deposition, arba MOCVD, kur MO-Metal-Organic) modifikacijas buvo ištirtos sluoksnių nusodinimo galimybės, keičiant sistemos $(\text{ZnO})_{1-x}(\text{InO}_{1.5})_x$ sudėtį visame sudėčių intervale $x=0-1$. Keičiant šios oksidinės sistemos sudėtį, galima keisti jos elektrines savybes. Kai $x=0$, turime puslaidininkį ZnO</p>

	<p>su dideliu draustinės energijos juostos pločiu ($E_g \sim 3.3$ eV), kuris pasižymi santykinai nedideliu n-tipo laidumu elektros srovei, nulemtu savitųjų nestechimetrinių donorinių defektų (daguonies vakansijos V_O arba Zn intarpai tarpmazgiuose Zn_i). Esant nedidelėms x reikšmėms ($\sim 0.01-0.1$), gaunamas In-legiruotas ZnO, kuris jau gali pasižymėti dideliu n-tipo laidumu elektros srovei, nulemtu didelės priemaišinių donorinių defektų (In cinko pozicijose, In_{Zn}) koncentracijos. Tokie sluoksniai, jei juose pasiekiamas pakankamai didelis laidumas, gali būti panaudoti kaip elektrai laidūs ir šviesai pralaidūs oksidiniai (TCO-transparent conducting oxide) elektrodai optoelektroninėje įrangoje. Kai x reikšmės artimos vienetui, gauname cinku legiruotus indžio oksido sluoksnius, kuriuose Zn atomai (In pozicijose) gali elgtis kaip akceptorinės priemaišos, todėl medžiagoje galime tikėtis tam tikro p-tipo laidumo. Tokie p-tipo oksidiniai puslaidininkiai būtų labai perspektyvūs oksidinėms p-n tipo sandūroms formuoti įvairiuose pritaikymuose. Tačiau tokius oksidinius sluoksnius, turinčius pakankamai didelį p-tipo laidumą yra labai sunku gauti, todėl iki šiol praktinės reikšmės sluoksnių dar negauta. Esant tarpinėms x reikšmėms, sistemoje gali susiformuoti įvairios fazės homologinėje serijoje $(In_2O_3)(ZnO)_m$, kurias legiruojant įvairiomis priemaišomis, galima tikėtis įdomių elektrinių savybių. Taigi, ši technologija yra perspektyvi gamybai naujų medžiagų su unikaliomis elektrinėmis savybėmis. Detalesnis tyrimo aprašymas pateiktas straipsnyje [63].</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.8 (1.1.3.2) ZnO ir indžiu legiruotų ZnO sluoksnių pavyzdžių optinių ir elektrinių savybių tyrimas</p>	<p>Neorganinis puslaidininkis ZnO nėra naujas puslaidininkis, jis tiriamas jau ilgą laiką. Tačiau susidomėjimas juo ne tik kad neslūgsta, bet pastaruoju metu vis auga dėl atrandamų jo naujų taikomųjų savybių ir dėl tobulėjančių technologinių galimybių gauti jo aukštos kokybės monokristalinius padėklus ir plonus sluoksnius.</p> <p>Naujai sluoksnių nusodinimui technologijai sukurti buvo panaudoti žemo slėgio PI-MOCVD (PI-pulsinis injekcinis), žemo slėgio HW-MOCVD (HW-Hot Wire) ir atmosferinio slėgio AS-MOCVD (AS-Aerosol Assisted) metodai. Visų trijų modifikacijų MOCVD reaktoriai, naudoti laboratorijoje šiam projektui vykdyti, buvo sukonstruoti ir pagaminti mūsų pačių. Nusodinimui naudoti metalų organiniai pirmtakai $Zn(thd)_2$ ir $In(thd)_3$, susintetinti ir išgryninti mūsų laboratorijoje (thd – 2,2,6,6-tetrametilheptan-3,5-dionatai), kurių tirpalams ruošti naudotas tirpiklis 1,2-dimetoksietanas. Sluoksniai sodinti ant įvairių padėklų.</p> <p>Sluoksniams charakterizuoti panaudoti įvairūs fizikiniai tyrimo metodai: Rentgeno difrakcija (XRD), optinė, elektroninė ir atominės jėgos mikroskopija, energetinės dispersijos rentgeno spektroskopija, elipsometrija, UV-Vis ir FT-IR spektroskopija, Ramano spektroskopija, elektrinių matavimų įranga (Holo efekto matavimai).</p> <p>Visais trimis metodais buvo nusodinti aukštos kristalinės kokybės indžiu legiruoti ZnO sluoksniai, pasižymintys dideliu šviesos pralaidumu ($\geq 90\%$) matomoje, artimoje UV ir artimoje</p>

	<p>IR spektro srityse. Pasiiekta savitoji sluoksnių varža $\sim 10^{-3} \Omega\text{cm}$ yra tarp geriausių rezultatų, gautų cheminiais nusodinimo metodais, tačiau ji dar yra gana toli nuo reikalingos ($\sim 10^{-4} \Omega\text{cm}$) praktiniams tokių sluoksnių pritaikymams kaip TCO elektrodai. Esant panašioms elektrinėms ir optinėms savybėms, pranašumą įgija mūsų naudotas atmosferinio slėgio AS-MOCVD metodas, nes jis yra žymiai paprastesnis, kadangi nereikia sudėtingos ir gana brangios vakuuminės įrangos. Todėl būtent šį metodą panaudojome tolesnėje projekto eigoje, tirdami sluoksnių nusodinimo galimybes visame sistemos ZnO-In₂O₃ sudėčių intervale, tikėdamiesi gauti cinku legiuotus indžio oksido sluoksnius su p-tipo laidumu. Būtent šiame tyrimų etape, bendradarbiaujant su prancūzų mokslininkais, buvo gauti įdomiausi rezultatai, kurių pagrindu paruoštas straipsnis pateiktas (2015 m) žurnalo „Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics“ redakcijai (straipsnis jau praėjo recenzavimo procesą ir yra priimtas spausdinimui). Nustatyta, kad In-Zn-O sluoksniai, turintys 30 at. % Zn, pasižymi tuo pačiu metu ir gana dideliu n-tipo laidumu elektros srovei (544 Scm^{-1}), ir dideliu šviesos pralaidumu vidurinėje IR spektro srityje ($\sim 80\%$, kai $\lambda=3 \mu\text{m}$), t.y., tokie sluoksniai jau yra perspektyvūs taikymui kaip elektrodai IR-optoelektroninėje įrangoje (pvz. IR-lazeriuose). Kitas labai įdomus rezultatas yra tai, kad nusodinti sluoksniai, turintys 18 at.% Zn, pasižymėjo santykinai dideliu p-tipo laidumu (60 Scm^{-1}), pirmą kartą gautu tokioje In-Zn-O sistemoje. Tokio p-tipo laidumo sluoksniai jau galėtų būti taikomi p-n sandūroms gaminti. Rezultatai pateikti straipsnyje [63].</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.9 (1.1.3.3) Li ir K niobatų bei tantalatų sluoksnių sintezės iš cheminių garų fazės optimizavimas, sluoksnių tyrimas</p>	<p>Naujos medžiagos su unikalėmis feroelektrinėmis savybėmis kaip Li niobatas bei tantalatas dėl savo gerų pjezoelektrinių, optoelektrinių, netiesinių optinių savybių plačiai taikomi optiniuose bangolaidžiuose, optiniuose modulatoriuose, paviršiaus akustinių bangų ir kt. įrangoje. Įranga, veikianti paviršiaus akustinių bangų (PAB) pagrindu, plačiai naudojama kaip telekomunikacijų sistemų elementai, pagrindiniai kaip siaurajuosčiai ar plačiąjuosčiai filtrai bei užlaikymo linijų rezonatoriai. PAB įrangos pagrindu gali būti sukurti nauji jutikliai temperatūrai, slėgiui, drėgmei. Pastaruoju metu feroelektrikų kaip naujų medžiagų platesnio pritaikymo optikoje ir PAB įrangoje galimybės pradėtos sieti su jų plonų sluoksnių sinteze, tikintis gauti sluoksnius, kurių feroelektrinės savybės būtų ne blogesnės už monokristalų. Tai leistų pasiekti didesnę miniatiūrizacijos laipsnį ir integruoti tokią įrangą silicio technologijose. Tačiau tokių sluoksnių užauginimas yra didelė problema, nes jų fizikinės savybės labai priklauso nuo kristalinės kokybės ir kitų įvairių faktorių. Užauginti ličio niobato ir tantalato sluoksniai, norint juos pritaikyti opto- ir akustoelektronikoje, turi būti grynafaziai ir su tiksliai kontroliuojama stechiometrija, epitaksiniais, turintys didelius plokštuminius kristalitus, be struktūrinio dvyninimosi, be įtrūkimų, lygaus paviršiaus. Todėl iki šiol tokių sluoksnių gaminimas vis dar optimizuojamas ir dar nepasiekė praktinio/pramoninio taikymo</p>

	<p>lygio.</p> <p>Vykdam projektą, buvo tiriamos Li ir K niobatų bei tantalatų sluoksnių nusodinimo galimybės, taikant technologiškai patrauklų paprastą atmosferinio slėgio AS-MOCVD metodą, kurio įranga buvo sukonstruota mūsų laboratorijoje. MO pirmtakais buvo panaudoti Li(thd), K(thd), Nb(thd)₄ ir Ta(OEt)₄(acac) (OEt - etoksidas, acac – acetilacetatas), ištirpinti 1,2-dimetoksietane. Pirmi du pirmtakai buvo sintetinti mūsų laboratorijoje, kiti du - komerciniai pavyzdžiai (Strem). Optimizuojant sąlygas pavyko nusodinti grynafazius epitaksinį sluoksnį ant safyro padėklų. Struktūriniai faktoriai, darantys didžiausią neigiamą įtaką optinėms ir akustinėms savybėms, yra nukrypimai nuo stochiometrijos, sluoksnių kristalinių dvyninimasis padėklo plokštumoje, sluoksnio įtrūkimai. Struktūrinėms savybėms didelę įtaką daro liekamieji įtempimai sluoksnyje, priklausantys nuo sluoksnio storio. Visi atliktų mokslinių tyrimų rezultatai pateikti straipsnyje [64].</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.10</i> <i>(1.1.3.4)</i> Optimizuotų plonasluoksnių pavyzdžių paruošimas taikomiesiems tyrimams optoelektronikoje</p>	<p>Šioje poveiklėje dėmesys buvo skirtas galimiems nukrypimams nuo Li stochiometrijos, liekamiesiems įtempimams, padėklo veikiamam terminiam plėtimuisi skirtingo skirtingo storio epitaksinuose ličio niobato sluoksniuose, nusodintuose AS-MOCVD būdu. Taip pat buvo tiriama atkaitinimo įtaka, siekiant tokiu būdu pašalinti struktūrinius sluoksnių defektus, nuo kurių priklauso sluoksnių fizikinių savybių degradavimas. Ištirta liekamųjų įtempimų relaksacija, Li₂O praradimas, neelastinės deformacijos ir elastinė histerezė sluoksnių atkaitinimo (iki 860 °C) ir aušinimo cikluose. Nustatyta, kad liekamieji įtempimai ir terminis plėtimasis labai priklauso nuo sluoksnio storio. Taip pat nustatyta (01-12) dvyninimosi įtaka įtempimų relaksacijai storuose LiNbO₃ sluoksniuose. Šie sudėtingi tyrimai buvo atlikti taikant du pagrindinius charakterizavimo metodus - Rentgeno difrakciją ir Ramano spektroskopiją, bendradarbiaujant su prancūzų ir anglų mokslininkais. Rezultatai paskelbti straipsnyje [4]. Gauti rezultatai bus labai naudingi toliau optimizuojant Li niobato sluoksnius, siekiant padidinti jų praktinio pritaikymo galimybes. Atliekant mūsų nusodintų Li tantalato sluoksnių dielektrinių savybių tyrimus, buvo bendradarbiauta su VU Fizikos fakulteto mokslinė grupe (J. Banys ir kt.), o tokio bendradarbiavimo rezultatai bus pristatyti (2015 m rugsėjo mėn.) stendinio pranešimo formoje tarptautinėje E-MRS konferencijoje Varšuvoje autoriai Sergejus Balciunas, Maksim Ivanov, Juras Banys, Valentina Plausinaitienė, Adulfas Abrutis, Dielectric properties of Lithium Tantalate-based thin films. Abstract submitted to the 2015 E-MRS Fall Meeting, Warsaw, 15-18 September, 2015.</p> <p>Išsamūs gautų naujų medžiagų - optimizuotų plonasluoksnių tyrimai pateikti straipsniuose [63, 64].</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.11</i> <i>(1.1.4.1)</i> Aukso ir platinos nanodalelių sintezės parametrų nustatymas ir</p>	<p>Pastarąjį dešimtmetį ypač sparčiai vystėsi nanodarinių sintezė ir jų taikymo galimybių paieška analizinėje chemijoje, medicinoje, jautriuose diagnostiniuose rinkiniuose, radioterapijoje, optoelektronikoje ir kitose technologijose.</p>

tyrimas	<p>Nanodalelių taikymo sritys bei galimybės priklauso nuo jų formos bei dydžio, paviršiaus savybių. Metalų (Au, Pt) nanodalelės pasižymi unikaliomis fizikinėmis ir cheminėmis savybėmis – optinėmis, puslaidininkinėmis, katalizinėmis ir kt. bei puikiu biosuderinamumu. Nanodalelės tokios kaip Au ir Pt yra aktualios optoelektronikoje, fotokatalizėje, kuriant nanokompozicines medžiagas, mikrogardelėse bei optiniuose, elektrocheminiuose, mikrogravimetriniuose biologiniuose jutikliuose.</p> <p>Projekto metu buvo sutelktos mokslininkų kolektyvas, kurio pastangos mokslinių tyrimų srityje buvo nukreiptos į skirtingų nanostruktūrų sintezę, hibridinių sistemų kūrimą bei taikymą praktiniams tikslams. Aukso nanodalelės (AuND) buvo sintetinės vandeninėje terpėje redukuojant tetrachloraukso rūgštį natrio citratu, kuris sintezės metu veikia ne tik kaip reduktorius, bet ir stabilizuoja koloidinį AuND tirpalą (J. Turkevich-G. Frens sintezės metodas). Atlikus TEM tyrimus nustatyta, kad buvo susintetintos sferinės, monodispersinės nanodalelės, kurių skersmuo iki 20 nm. Atlikus koloidinio AuND tirpalo dializę prieš vandenį nustatėme, kad pasikeitė AuND dydis ir jos tapo 50 nm dydžio. Šiuo metodu susintetintos nanodalelės yra labai jautrios terpės pokyčiams, t.y. AuND koloidinis tirpalas yra nestabilus keičiant tirpalo pH bei druskų koncentraciją. Dėl šios priežasties susintetintos AuND buvo tinkamesnės imobilizavimui ant paviršių nei pačių dalelių funkcionalizavimui bei modifikavimui. Taigi, gautos AuND buvo imobilizuotos ant aukso paviršiaus funkcionalizuoto poli-L-lizinu prieš atliekant funkcionalizavimą baltymais. Šie paviršiai buvo panaudoti pjezoelektrinio imuninio jutiklio kūrimo [65].</p> <p>Siekiant gauti stabilesnį AuND tirpalą, papildomai sintezės metu buvo panaudota tanino rūgštis (Mülpfordt sintezės metodas), kuri atliko reduktoriaus ir stabilizatoriaus vaidmenį. Keičiant tanino rūgšties koncentraciją, buvo gauti skirtingo dydžio (nuo 3,5 iki 13 nm) AuND koloidiniai tirpalai mažiau jautrūs terpės pokyčiams. Tokiu būdu susintetintos dalelės yra tinkamesnės modifikavimui baltymais tirpale.</p> <p>Panaudojant heksachlorplatinos rūgštį bei atliekant redukciją natrio citratu bei tanino rūgštimi, buvo susintetintos ir platinos nanodalelės (PtND). Dinaminės šviesos sklaidos metodu nustatyta, kad susintetintų PtND hidrodinaminis skersmuo yra 18,9 nm. Tačiau PtNP yra linkusios aglomeruoti ir sudaryti 83,8 nm skersmens daleles tirpale.</p> <p>Sidabro nanodalelės 15 ± 3 nm dydžio buvo susintetintos iš sidabro nitrato, reduktoriais naudojant natrio citratą bei natrio borhidridą. Buvo ištirtas krūviu stabilizuotų sidabro nanodalelių</p>
---------	--

	<p>nusodinimas iš suspensijos (monosluoksio sudarymas), kurios sudėtyje yra tanino rūgšties, ant žėručio padengto poli(alilamino hidrochloridu) sluoksniu. Išsamesni naujų medžiagų sintezės ir tyrimo rezultatai pateikti straipsnyje [62].</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.12 (1.1.4.2) Au nanodalelių monosluoksio formavimas ir tyrimas</p>	<p>Naujų technologijų, kuriose naudojami nanodariniai taikomi biomolekulių nustatymui ir charakterizavimui. Modifikavus aukso ar platinos nanodaleles biomolekulėmis gauname struktūrą, kuri apjungia biomolekulėms būdingas savybes su unikaliomis tik nanodalelėms būdingomis savybėmis. Vandeninėje terpėje skirtingais būdais susintetintos nanodalelės gali būti pritaikytos efektyvesniam biologiškai aktyvių medžiagų imobilizavimui ir/arba analizinio signalo sustiprinimui, siekiant sukurti jautresnes analizes sistemas.</p> <p>Projekto metu kvarco kristalo mikrogravimetrinių svarstyklių su disipacija (KKM-D) aukso elektrodas buvo nuplaunamas, nudžiovinamas azoto dujomis ir papildomai nuvalomas plazmoje (10 min.) bei įtvirtinamas pratekamoje KKM-D celėje. Užregistravus bazinę liniją tirpale, paviršius buvo funkcionalizuojamas poli-L-lizinu (PLL), siekiant gauti teigiamą krūvį turintį paviršių ant elektrodo. Vėliau ant paviršiaus buvo nusodinamos neigiamą krūvį turinčios aukso nanodalelės (AuND) iš vandeninio 10 mM NaCl tirpalo. Po kiekvieno komponento adsorbcijos, buvo atliekamas sistemos plovimas, siekiant tiksliai įvertinti elektrodo paviršiuje adsorbuotos medžiagos kiekį. Šiuo metodu vykdomas AuND monosluoksio elektrodo paviršiuje formavimas yra sunkiai kontroliuojamas, o vienodomis sąlygomis imobilizuojant AuND, gaunami paviršiai skiriasi AuND kiekiu bei išsidėstymu, o tai turi neigiamos įtakos tolimesnių eksperimentinių rezultatų atkartojamumui.</p> <p>Kitame etape buvo paruošti “pusės antikūno” fragmentai, lanksto srityje turintys susidariusių merkopto grupių, per kurias šie fragmentai buvo kryptingai imobilizaujami ant plokštuminių aukso ar 50 nm AuND modifikuotų KKM-D elektrodų. Taip modifikuoti paviršiai buvo pritaikyti galvijų leukemijos viruso antigeno gp51 nustatymui. KKM-D tyrimas parodė, kad imobilizuojant “pusės antikūno” fragmentus, gautus redukuojant polikloninius antikūnus prieš galvijų leukemijos viruso antigeną gp51 naudojant skirtingų pradinių koncentracijų antikūnų tirpalus, didesni fragmentų paviršiaus tankiai tiesiogiai priklausė nuo pradinės tirpalo koncentracijos ir buvo iki 49 % didesni ant aukso nanodalelėmis modifikuotų paviršių nei ant plokštuminių aukso paviršių. Didžiausi atsakai į 0,01 – 100 mg/ml galvijų leukemijos viruso antigeną gp51 buvo gauti, esant mažiausioms “pusės antikūno” fragmentų paviršiaus koncentracijoms ant abiejų</p>

	<p>paviršių tipų. Remiantis KKM-D $\Delta D/\Delta f$ grafikais buvo palygintos antigeno gp51 specifinė sąveika su antikūnų fragmentais ir nespecifinė sąveika su jaučio serumo albuminu imobilizuotais ant plokštuminių aukso ir AuND modifikuotų KKM-D elektrodų [65].</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.13</i> <i>(1.1.4.3)</i> Au nanodalelių taikymo jutikliams tyrimai</p>	<p>Projekto metu atlikti tyrimai, kurių metu buvo panaudotos magnetinės aukso nanodaleles (M-AuND) natyvių antikūnų kovalentiniam imobilizavimui ant karboksi grupėmis modifikuoto paviršiaus (atsitiktinė orientacija paviršiuje) bei “pusės antikūnų“ fragmentų imobilizavimui per lanksto srityje esančias merkopto grupes (kryptinga orientacija paviršiuje) bei palyginti sąveikos su galvijų leukemijos viruso antigenu gp51 efektyvumą panaudojant paviršiaus sustiprintą Ramano spektroskopiją. Geriausi rezultatai buvo gauti “pusės antikūnų“ fragmentų gavimui naudojant ditiotreitolį. Siekiant pagerinti imuninio jutiklio jautrumą, papildomai buvo panaudotos aukso nanolazdelės kovalentiškai modifikuotos antikūnais ir Ramano žymeniu. Sukurto netiesioginio imuninio jutiklio antigeno aptikimo ir nustatymo ribos atitinkamai yra 0,95mg/ml ir 3,14mg/ml. Šis imuninis jutiklis sėkmingai buvo pritaikytas antigeno gp51 nustatymui piene [1].</p> <p>Buvo optimizuotas ir validuotas kietazės ekstrakcijos metodas zaleplono ir zopiklono nustatymui žmogaus hemolizuotame kraujyje. Analitės išskirti iš biologinės terpės buvo nustatytos sparčiu dujų chromatografijos masių spektrometrijos su neigiamų jonų cheminės jonizacijos metodu. Eksperimentiniai rezultatai parodė, kad didelio paviršiaus ploto polimerinis sorbentas (Oasis HLB) turi daug privalumų, nustatant naujos kartos analites iš biologinių terpių, nes pasižymi geru rezultatų atsikartojamumu, selektyvumu ir ypatingu jautrumu, naudojant mažą mėginio kiekį. Parengta metodika buvo pritaikyta minėtų analičių nustatymui realiuose mėginiuose – žmogaus hemolizuotame kraujyje. Vidutinė ekstrakcijos išgava buvo didesnė nei 90,1 % zaleplonui ir 82,9 % zopiklonui. Metodo atsikartojamumas svyravo nuo 3,04 iki 10,58 % zaleplonui ir nuo 4,08 iki 9,52 % zopiklonui. Tuo tarpu metodo tikslumas buvo nuo -5,73 iki 6,00 % zaleplonui ir nuo -7,00 iki 6,32 % zopiklonui. Gauti tyrimų rezultatai parodė, kad naudojamas metodas yra tikslus, jautrus ir selektyvus. Tyrimų rezultatai pateikti straipsniuose [1, 12].</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.14</i> <i>(1.1.4.4)</i> Organinių junginių analizė dujų, skysčių chromatografijos ir kitais metodais, analizės metodikų kūrimas</p>	<p>Hidrofilinės sąveikos chromatografija su tandeminiu trigubo kvadrupolio masių spektrometriniu detektavimu pritaikyta alfa-aminorūgščių identifikavimui komercinėse trašose. Jonizacijos šaltinio ir masių analizatoriaus parametrai kiekvienai analitei buvo optimizuoti tiesioginio įleidimo būdu. Palyginus aminorūgščių atskyrimą trimis skirtingomis hidrofilinės</p>

	<p>sąveikos kolonėlėmis (Atlantis HILIC, BEH HILIC ir BEH Amide), nustatyta, kad BEH Amide kolonėlė pasižymi geriausiu bendru efektyvumu. Visos rūgštys visiškai atskiriamos per 15 min. naudojant gradientinę eliuciją vandens/acetanitrilo judria faze su 3 mmol/L amonio acetato, 3 mmol/L amonio formiato ir 20 mmol/L skruzdžių rūgšties priedu. Sukurtas metodas pritaikytas aminorūgščių identifikavimui keturių skirtingų gamintojų natūralios kilmės biologinėse trąšose [14].</p> <p>Ištirti baltymų amino rūgščių enantiomerų atskyrimo ypatumai skysčių chromatografijos-masių spektrometrijos metodu ant teikoplanino chiralinio sorbento. Įvertinta judrios fazės veiksniai (organinio modifikatoriaus prigimties ir koncentracijos bei pH) ir kolonėlės temperatūros įtaka enantioatrankumui. Optimizuotose sąlygose 15 iš 19-os D/L-amino rūgščių enantiomerų buvo efektyviai atskirti per 15 min. Metodas buvo panaudotas amino rūgščių enantiomerų nustatymui komercinėse trąšose [67].</p> <p>Sukurtas naujas hidrofilinės sąveikos chromatografijos-masių spektrometrijos metodas alkaloidams (anabazinui, nikotinui, kotininui ir nornikotinui) tabake nustatyti. Optimizuotos alkaloidų ekstrakcijos iš tabako, jų chromatografinio atskyrimo bei masių spektrometrinio detektavimo sąlygos. Įvertintos metodo analizinės charakteristikos. Alkaloidų išgavos iš cigarečių tabako mėginių siekia 94,8% -104,1%, o rezultatų glaudumas neviršija 5% [16]. Pagrindiniai tyrimų rezultatai pateikti straipsniuose [67-69].</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.15 (1.1.4.5) Nanodarinių ir kitų daugiafunkcinių medžiagų analizė dujų, skysčių chromatografijos ir kitais metodais, analizės metodikų kūrimas</p>	<p>Naujų medžiagų ir nanodarinių struktūros ir sandaros tyrimo ir analizės metodų paieška ir jų vystymas aktualus uždavinys ir sietinas ne tik su technologine instrumentine pažanga, bet ir naujų selektyvesnių metodų ir metodikų paieška. Projekto metu buvo susintetinti nanonodariniai ir tobulintos tyrimo metodikos: struktūros ir elementinės sudėties, spektroskopinių tyrimų metodikos.</p> <p>Zolių-gelių savaiminio užsiliepsnojimo metodu buvo susintetintos dvi junginių serijos – $\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Cr}^{3+}$ ir $\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce}^{3+},\text{Cr}^{3+}$, kuriose Ce^{3+} koncentracija buvo lygi 0,5 %, o Cr^{3+} koncentracija buvo intervale 0,1 % – 4 %. Gauti geliai buvo pirmiausiai kaitinami ore 1000 °C temperatūroje organinių junginių išdeginimui, o vėliau CO atmosferoje 1700 °C temperatūroje – cerio ir chromo redukcijai iki trivalenčių jonų. Atlikti Rentgeno spindulių difrakcijos matavimai parodė, kad susidaręs degimo produktas yra amorfinis, o junginiai kaitinti 1000 ir 1700 °C temperatūrose yra kristaliniai ($Ia\bar{3}d$ erdvinė grupė #230). Be to, didinant sintezės temperatūrą, buvo pastebėta, kad difrakcijos smailės siaurėja, kas rodo augantį kristalitų dydį. Šiuos rezultatus</p>

	<p>patvirtino ir junginių paviršiaus nuotraukos, padarytos skenuojančiu elektroniniu mikroskopu. Junginių formavimąsi patvirtino ir infraraudonųjų spindulių spektrai, kuriuose $400 - 800 \text{ cm}^{-1}$ srityje atsirado granato struktūros junginiams būdingos sugerties juostos.</p> <p>Užrašyti sužadavimo spektrai parodė, kad susintetintos medžiagos sugeria šviesą keliose regimojo spektro srityse: $300 - 370 \text{ nm}$ (Ce^{3+}), $380 - 510 \text{ nm}$ ($\text{Ce}^{3+}/\text{Cr}^{3+}$) ir $520 - 600 \text{ nm}$ (Cr^{3+}). Trivalenčio cerio sužadavimo šuolis yra leistinis ir geria persikloja su Cr^{3+} sugerties juosta, todėl buvo tikimasi efektyvios $\text{Ce}^{3+} \rightarrow \text{Cr}^{3+}$ energijos pernašos, kas turėtų suintensyvinti Cr^{3+} emisiją.</p> <p>Išmatavus emisijos spektrus paaiškėjo, kad didinant Cr^{3+} koncentraciją junginiuose Ce^{3+} emisija nuolat mažėja, o intensyviausia chromo emisija stebėta, kai Cr^{3+} koncentracija buvo 1 %. Toliau didinant chromo jonų koncentraciją, emisijos intensyvumas pradėjo mažėti. Iš emisijos spektrų buvo apskaičiuoti CIE 1931 spalvinės diagramos junginių spalvinės koordinatės. Kaip ir buvo tikėtasi, didėjant Cr^{3+} koncentracijai, spalviniai taškai iš žalios srities slinko į geltoną, dėl silpnėjančios Ce^{3+} emisijos ir stiprėjančios Cr^{3+} emisijos. Iš liuminescencijos matavimų duomenų apskaičiuoti junginių kvantiniai našumai parodė, kad, nepaisant didėjančio emisijos intensyvumo, bendras junginio našumas mažėja, didėjant Cr^{3+} koncentracijai: nuo 58 % ($0,1\% \text{ Cr}^{3+}$) iki 6 % ($4\% \text{ Cr}^{3+}$). Remiantis šiais duomenimis galima daryti išvadą, kad nors ir vyksta intensyvi $\text{Ce}^{3+} \rightarrow \text{Cr}^{3+}$ energijos pernaša, bet jos metu daug energijos taip pat yra prarandama dėl vykstančių gesinimo procesų [70].</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.16</i> <i>(1.1.4.6)</i> Neorganinių ir metaloorganinių junginių analizė dujų, skysčių chromatografijos ir kitais metodais</p>	<p>Metaloorganinių medžiagų, tinkamų taikymams šiuolaikinėse optoelektronikos technologijose reikalauja naudoti ypatingo grynumo ir žemo toksiškumo plačiam vartojimui bei atitikimo darbo saugos reikalavimus vykdomo technologinio proceso metu. Todėl naujų analizės metodų ir metodikų paieška ypatingai svarbi kuriant naujus technologinius procesus.</p> <p>Projekto metu buvo tirti metaloorganiniai junginiai ir jų aptikimo ore, skysčiuose ir gamybos produktuose. Organiniai alavo junginiai (OAJ) plačiai naudojami žemės ūkyje kaip fungicidai, herbicidai, pesticidai, o laivų dažyme kaip biocidai. Dėl neigiamo poveikio aplinkai organiniai alavo junginiai priskirti prioritetinėms pavojingoms medžiagoms ir jų kiekiai aplinkoje turi būti kontroliuojami. Siekiant identifikuoti mažas OAJ koncentracijas, tyrėme mikroekstrakcijos metodų galimybes greitai ir efektyviai OAJ ekstrakcijai.</p> <p>OAJ realiuose mėginiuose egzistuoja katijono forma, yra mažai</p>

	<p>lakūs ir poliniai, todėl prieš atliekant šių junginių nustatymą dujų chromatografijos metodu, jie derivatizuojami. Derivatizacijai naudotas natrio tetraetilboratas. Ištirtos OAJ derivatizavimo sąlygos, optimizuotos derivatizuotų OAJ dujų chromatografinio-masių spektrometrinio nustatymo sąlygos. Ištirtos trijų skysčių-skysčių mikroekstrakcijos metodų - dispersinės skysčių-skysčių mikroekstrakcijos, mikroekstrakcijos užšaldomu tirpiklio lašu ir dispersinės skysčių-skysčių mikroekstrakcijos panaudojant užšaldomą tirpiklio lašą – galimybės ekstrahuoti OAJ iš vandeninių tirpalų. Optimizavus tirtų ekstrakcijos metodų sąlygas, nustatytos pagrindinės analizinės charakteristikos. Nustatyta, kad tinkamiausia metodika realių mėginių analizei yra dispersinė skysčių-skysčių mikroekstrakcija. Šis metodas buvo pritaikytas upių vandens analizei. Nustatyta, kad šešių Lietuvos upių vandens mėginiuose organinių alavo junginių nėra arba jų koncentracijos mažesnės už aptikimo ribą. Naujų metodikų aptarimas ir tyrimo rezultatai pateikti straipsniuose [71-73].</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.17 (1.1.5.1) Šarminių žemių elementų stanatų, stroncio aluminatų, gadolinio galio granatų sintezė, zolių-gelių proceso tyrimas</p>	<p>Šiuolaikinėje optoelektronikos pramonėje liuminescencinės ir kitos optinės medžiagos randa vis platesnį pritaikymą, ypač labai sparčiai auga poreikis specifinėmis savybėmis pasižymintiems optiniams komponentams, pvz. Stroncio stanatai, itrio granatai ir kitos medžiagos legiruotos lantanoidų jonais. Šių medžiagų emituojamos šviesos diapazonas kontroliuojamas matricos chemine sudėtimi bei lantanoidų oksidacijos laipsniu ir prigimtimi.</p> <p>Projekto metu pasiūlytos ir sukurtos naujos technologijos sintetinti ir gauti vienfazės ypač grynas medžiagas pasižyminčias vertingomis ir unikaliomis optinėmis ir liuminescencinėmis kitomis savybėmis. Pasiūlyti naujos technologijos naudojant zolių gelių procesą, kuris tinkamas gauti norimų ir reikalingų savybių medžiagas stanatams, granatams ir molibdamatas. Šį metodą naudojant gauti vienfaziai grynai junginiai, šis metodas efektyvus, ekonomiškai nereikalaujantis brangios sintezės įrangos ir draugiškas aplinkai, t.y. reakcijos atliekamos vandeninėje terpėje, nereikalauja brangių organinių tirpiklių naudojimo. Šiuo metodu sėkmingai susintetinti vienfaziai itrio granatai, kurių sudėtis $Y_{3-x}Nd_xAl_5O_{12}$ (x – nuo 0,1 iki 1,5), nustatyta, kad kai yra x 2,0 iki 3,0 gauta NdAlO₃ fazė. Kontroliuodami sintezės parametrus galime gauti skirtingos fazinės sudėties medžiagas [4].</p> <p>Panaudojus vandeninį zolių-gelių sintezės metodą, buvo susintetinta stroncio aluminato fazė Sr₃Al₂O₆. Sintezės metodika buvo žinoma iš ankstesnių tyrimų, tačiau šiuo atveju fazės grynumu buvo įsitikinta rentgeno struktūrinės analizės (<i>angl.</i> X-ray diffraction, XRD) matavimo rezultatus apdorojus Rytveldo patikslinimo (<i>angl.</i> Rietveld refinement) metodu. Tuo tarpu kitos fazės – SrAl₁₂O₁₉ – sintezės sąlygos nebuvo žinomos, todėl visų pirma reikėjo optimizuoti šios fazės sintezės sąlygas. Rezultatai parodė, kad vienfaziui junginiui gauti reikalinga kaitinimo temperatūra yra 1500 °C. Fazinis grynumas patikrintas</p>

	<p>vėl panaudojus Rytveldo patikslinimo metodą. Toliau buvo paruoštos serijos stroncio aluminatų $Sr_3Al_2O_6$ ir $SrAl_{12}O_{19}$, kuriuose dalis stroncio jonų pakeista cerio jonais. Atlikus gautų junginių optinius tyrimus, nustatyta, kad $Sr_3Al_2O_6:Ce$ luminescencijos emisijos maksimumas yra ties 480 nm, o $SrAl_{12}O_{19}:Ce$ – ties 317 nm. Gauti rezultatai išspausdinti straipsniuose [11, 75].</p> <p>Ištirta pradinių medžiagų, legiruojančio priedo bei temperatūros įtaka šarminių žemių metalų ir lantano molibdatų, susintezuotų vandeniniu trartratinium zolių-gelių sintezės metodu, paviršiaus morfologijai, kristalinių fazių formavimuisi ir optinėms savybėms [11,75]. Apibendrinant Mg-Mo-O nitratinio-tartratinio gelio iškaitinto 500, 600, 700, 800, 900 ir 1000 °C temperatūrose XRD analizės rezultatus, galima daryti išvadą, jog 600 °C kaitinimo temperatūra yra pakankama $MgMoO_4$ kristalinės fazės formavimuisi. Šie duomenys gerai sutampa su terminės analizės rezultatais, kuomet aukščiau 550 °C temperatūros mėginio svoris išlieka pastovus, o DSC kreivėje stebima endoterminio šiluminio proceso tendencija, kuri tiesiogiai yra susijusi su mėginyje vykstančiais kristalizacijos procesais. Iš XRD rezultatų 500, 600, 700, 800, 900 ir 1000 °C temperatūrose susintezuotų junginių kristalinių fazių sudėtis visais atvejais atitinka $MgMoO_4$, $CaMoO_4$, $SrMoO_4$, ir $BaMoO_4$ sudėties junginius. Didinant kaitinimo temperatūrą charakteringosios smailės XRD difraktogramose siaurėja ir intensyvėja. Išsamūs naujų sintezės metodų taikymo rezultatai pateikti straipsniuose [14,76].</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.18 (1.1.5.2)</p> <p>Šarminių žemių elementų nanostanatų, legiruotų stroncio aluminatų, gadolinio galio granatų sintezė ir tyrimas</p>	<p>Pigesnių sintezės technologijų, reikiamų, kontroliuojamų savybių medžiagų ir aukštos kokybės medžiagų poreikis tik didėja. Zolių-gelių procesas tai vienas iš ekonomiškiausių ir sudėtingos įrangos nereikalaučių medžiagų sintezės metodų. Šio sintezės metodo fundamentiniai tyrimai ir taikymas naujų luminescencijos matricių, naujų luminescencinių ir kitų optinių medžiagų sintezei aktualus aukštųjų technologijų uždavinys.</p> <p>Zolių-gelių procesas buvo pritaikytas ir sukurtos naujos technologijos granato struktūros junginiams gauti. Pereinamųjų metalų ir žemės retųjų metalų granatai yra naudojami televizorių ekranuose, saulės baterijose, taip pat pasižymi magnetinėmis savybėmis, tačiau didžiausias susidomėjimas šia struktūra yra dėl optinių savybių. Granato struktūros medžiagos yra naudojamos kaip fosforai šviesos dioduose (angl. LED; Light - emitting diode). Zolių –gelių sintezės būdu buvo susintetinti gadolinio skandžio galio ($Gd_3Sc_2Ga_3O_{12}$; GSGG), gadolinio galio ($Gd_3Ga_5O_{12}$; GGG), itrio galio ($Y_3Ga_5O_{12}$; YGG) ir liutecio galio ($Lu_3Ga_5O_{12}$; LuGG) granatai. Bendroji granato kristalinės struktūros junginių cheminė formulė yra $A_3B_2D_3O_{12}$, o mūsų sintetintose medžiagose atitinka A – dodekaedrinėje padėtyje, retųjų žemės metalų katijonas (Gd, Y, Lu); B, D – atitinkamai oktaedrinėje ir tetraedrinėje padėtyse esantys pereinamųjų elementų katijonai (Ga, Sc); O – deguonies anijonai. 1/8 dalis YGG kristalinės gardelės pateikta pirmajame paveiksle. Šie junginiai buvo legiruoti Fe^{3+}, Ce^{3+}, Ce^{3+}/Cr^{3+} ir Cr^{3+} jonais skirtingomis molinėmis koncentracijomis, norint</p>

	<p>gauti gerą liuminescenciją (fosforo kvantinį našumą) ~730 nm bangos ilgių regione. Junginiai pasižymintys geriausiomis liuminescencijos savybėmis buvo tirti sintetinant juos ir aukštesnėje nei 1000 °C temperatūroje. Sintezės procesas buvo optimizuotas medžiagas analizuojant TG-DTA, XRD ir IR metodais, susintetintos medžiagos ištirtos XRD, SEM ir EDX analizės metodais. Visi gautieji junginiai yra vienfaziai granatai, kurie gauti gana didele išeiga. Susintetintų medžiagų tyrimai atlikti VU taikomųjų mokslų institute, projekto metu buvo dirbama kartu su ekspertais fizikais ir medžiagų tyrėjais. Tyrimo rezultatai pateikti [77]</p> <p>Projekto metu atliktas tyrimas ir pasiūlyta nauja technologija gauti lantano molibdata ($\text{La}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$) naudojant lantano nitrata ir molibdeno oksidą ar amonio molibdata, bei vyno rūgštį. Papildomai lantano molibdatai buvo legiruoti europio oksidu bei tirta gautų kristalinių fazių paviršiaus morfologija ir optinės savybės. Ultravioletinės regimosios šviesos spektroskopijos (UV-Vis) metodu buvo tirti La-Mo-O karbonatiniai-tartratiniai ir nitratiniai-tartratiniai geliai legiruoti skirtingu europio oksido kiekiu ir iškaitinti 600 °C temperatūroje. Tuo tarpu, La-Mo-O nitratinio-tartratinio gelio legiruoto europio oksidu ir iškaitinto 600 °C temperatūroje atveju stebimos priešingos tendencijos. Šviesos atspindys 250 – 400 nm bangos ilgio intervale visais legiravimo atvejais mažėja iki 5 %, esant maksimaliems legiravimo atvejams bendras šviesos atspindus neviršija 15 %. [14, 76, 78].</p> <p>Sukurtos naujos medžiagos, kurių sudėtyje yra molibdato jonų ir dvigubo Mg/Al sluoksniuoto dvigubo hidroksido (LDH), kurios gautos naudojant nusodinimo metodą. Ištirta ir įrodyta naujų medžiagų struktūra. Rentgeno difrakcinė analizė parodė, kad gautos medžiagos yra vienfazės grynos, suformuotas sluoksniuotos dvigubų hidroksidų struktūros yra be jokių priemaišų ir patvirtino šios gavimo technologijos perspektyvumą. Buvo nustatyta, kad Mg/Al santykis ir Mo suma LDH priklauso nuo sintezės parametrų ir sąlygų. Medžiagos gautos molibdato, kurio sudėtyje yra LDH buvo išbandytos kaip katalizatoriai 2-adamantiliden(fenil)amino sintezėje. Buvo parodyta, kad medžiaga turinti molibdato jonų su LDH žymiai pagerino produkto Šifo bazės išeigą. Išsamūs tyrimo rezultatai pateikti straipsnyje [79].</p>
<p>1.1.1.19 (1.1.5.3) Kalcio fosfato ir kitų kalcio junginių sintezės, zolių-gelių proceso ir produktų tyrimas</p>	<p>Porėto (mikroporio ir mezoporio) kalcio hidroksiapatito ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) pritaikymas labai platus tai ir biosensorių gamyboje, biomedicinoje kaip kaulo implantų gamyboje srityje ir vaistų nešėjas, kaip katalizatorius ar chromatografijoje kaip medžiagų atskirimo fazė. Zolių-gelių metodas buvo pritaikytas sintetinti tokias kompozitines medžiagas ar nanostruktūras ant įvairių padėklų.</p> <p>Nusodinimo metodu buvo susintetinti hidroksiapatito junginiai savo sudėtyje turintys karbonato jonų bei tiriama jų struktūros ir kirstališkumo priklausomybė nuo medžiagų iškaitinimo sąlygų. Susintetintų junginių sintezės temperatūra, kristalinė struktūra ir morfologinės savybės buvo tiriamos termogravimetrinės,</p>

	<p>Rentgeno spindulių difrakcinės, peršviečiamos elektroninės mikroskopijos, infraraudonosios spektroskopijos ir Ramano spektroskopijos analizės metodais. Karbonato ir kristalinės fazės dalis susintetintuose junginiuose buvo nustatoma papildomai atliekant IR ir Ramano spektrų smailių išskaidymo ir identifikavimo analizę. Gauti rezultatai parodė, kad naudojant skirtingą medžiagų kaitinimo režimą galima kontroliuoti kristalinės fazės laipsnį junginiuose. Projekto metu gauti rezultatai publikuoti straipsnyje [80].</p> <p>Nanodarinių kalcio junginių nano-oksido, nano-hidroksido ir nano-karbonato savybės skiriasi nuo mikro- ar makro-medžiagų. Jų didelis paviršiaus plotas ir reakingumas labai svarbus sąveikai su paviršiumi pvz. katalizatorių gamyboje, neutralizacijos procesuose gamybos procese ir medicinoje kaip vaistų nešikliai, optoelektronikos medžiagų gamyboje. Projekto metu pasiūlytas naujas sintezės metodas gauti kalcio junginių naodariniams. Naudojant skirtingus pirmtakus buvo susintetinti kalcio nano-hidroksidas, nano-karbonatas, nano-oksidas nusodinimo iš tirpalų, bei zolių-gelių sintezės metodais. Junginiai charakterizuoti rentgeno difrakcinės analizės, termogravimetrijos, skenuojančios elektroninės mikroskopijos ir dinaminės šviesos sklaidos tyrimo metodais. Įvairiais metodais gautos skirtingų dydžių kalcio junginių nanodalelės, naudotos celiuliozės pluošto šarminimui nepažeidė plaušo (skenuojanti elektroninė mikroskopijos analizė), padidino pH vertę iki 8,1-12,1, sudarė pakankamą šarminimo atsargą. Geriausi rezultatai gauti sintetinant kalcio oksido nanodaleles zolių-gelių būdu, naudojant citrinos rūgšties ir kalcio nitrato pirmtakus. Gauti vienfaziai milteliai (dalelių dydis 50-100) sonifikuoti 2-propanolyje ir gautas Kalcio hidroksidas naudotas tolesniems tyrimams. Medžiaga panaudota popieriaus apsaugai ir šarminimui Barow metodu. Kaip stabilizatorius naudota želatina. Palyginimui, popierius buvo šarminintas komerciniu kalcio hidroksidu naudojant tą patį Barow metoda, o taip pat komercinė šarminimo priemonė Bookkeeper. Gauti mėginiai buvo dirbtinai sendinti 90 °C temperatūroje 512 valandų ir ištirti. Nustatyta, kad naudojant zolių-gelių būdu gautas kalcio oksido daleles ir jas hidrolizuojant gauta suspensija geriausiai apsaugo popierių nuo senėjimo padarinių ją stabilizuojant želatina. pH reikšmės visų pavyzdžių yra panašios ir net po terminio sendinimo didesnės nei 7 pH. Pasiūlytas sintezės būdas tinkamas kalcio junginių nanodarinių sintezei, tyrimo rezultatai pateikti straipsnyje [81] ir konferencijose: YOCOCU (Youth in conservation of cultural heritage), kuri vyko, 2014 m. gegužės 28-30, Agsu, Azerbaidžane. Autoriai <u>O. Darčanova</u>, M.Tamutė, A. Beganskienė „Calcium compounds for paper treatment“ ir konferencijoje „Chemistry for Cultural Heritage“, 2014m. liepos 1-5 d. Vienoje. Autoriai: O. Darčanova, A. M. Bagočiūtė, <u>A.Beganskienė</u>, A. Kareiva, „Calcium hydroxide nanoparticles prepared by sol-gel method for paper deacidification“.</p>
<p>1.1.1.20 (1.1.5.4)</p>	<p>Pastaruoju metu titano oksido panaudojimas yra labai platus. titano oksidas gali būti naudojamas kaip katalizatorius, kuris</p>

<p>Plonų sluoksnių formavimas iš zolių tirpalų, apibūdinimas ir tyrimas</p>	<p>dalyvauja fotokatalitiniame vandens molekulių skaldymo metode, kuris naudojamas vandeniliui gaminti Taip pat įvairūs taikymai medicinoje (protezavimas, dantų implantai, kremai, vaistai ir kt.); savaime nusivalantys paviršiai; vandens valymas nuo įvairių organinių medžiagų, mikroorganizmų; taikymas baterijose.</p> <p>Projekto metu dirbta dvejuose mokslo kryptyse, t.y. puslaidininkinių skaidrių plonasluoksnių dangų sintezė ir tyrimas bei neorganinių biomedžiagų sintezė ir savybių tyrimas. Pirmame etape cheminio nusodinimo būdu ant F:SnO₂ dengtų stiklo padėklų buvo nusodintos homogeniškos, vientisos ir skaidrios TiO₂ dangos. Nustatyti dangų nusodinimo dėsningumai, ištirtos morfologinės ir struktūrinės savybės. Susintetintos medžiagos ir padengtos dangos buvo tiriamos skenuojamos elektroninės mikroskopijos, Rentgeno spindulių difrakcinės ir Ramano spektroskopijos analizės metodais. Taip pat, darbe buvo atlikti vandens kontaktinio kampo matavimai ir įvertintos nusodintų dangų hidrofilinės savybės. Pasiūlytas sintezės metodas, kurio dėka suformuotos titano oksido dangos, tinkamos naudoti fotokatalitinių medžiagų gamybai. Tyrimų duomenys pateikti straipsnyje [5].</p>
<p>1.1.1.21 (1.1.5.5) Puslaidininkinių ir silicio dioksido nanodalelių sintezė ir tyrimas</p>	<p>Puslaidininkinių nanodarinių ir hibridinių sistemų taikymo sritis tai naujų optinių ir optoelektroninių medžiagų kūrimas. Tradicines elektronikos technologijas tolydžio turės pakeisti fotonikos technologijos, kurios potencialiai yra pranašesnės tiek realiai pasiekiamą perduodamų signalų sparta, tiek, pagaliau, ir kaina. Vienos iš perspektyviausių medžiagų tai puslaidininkinių nanodarinių su aukso, sidabro ir kitų metalų nanodalelėmis kompozicinės medžiagos, pasižyminčios didelio optiniu netiesiškumo ir kitomis unikaliomis savybėmis.</p> <p>Projekto darbo metu buvo susintetintos koloidinės sidabro sistemos, ištirtos sidabro nanodalelės ir jų savybės, tikintis vėliau jas pritaikyti sidabro nanodalelių/polipirolų kompozitų tyrimams. Ištirtas krūviu stabilizuotų sidabro nanodalelių nusodinimas iš suspensijos, kurios sudėtyje yra tanino rūgšties, ant žėručio padengto poli(alilamino hidrochloridu) (PAH) sluoksniu. Pirmiausia dydžio pasiskirstymas, stabilumas ir elektrokinetinės sidabro nanodalelių savybės buvo nustatytos peršviečiamu elektroniniu mikroskopu, dinaminės šviesos sklaidos metodu ir mikroelektroforezės pagalba. Sidabro nanodalelių nusodinimo kinetika esant žinomam kiekiui tanino buvo išmatuota esant 10⁻² M joninei jėgai. Tyrimų išsamesni rezultatai pateikti straipsniuose [62].</p> <p>Taip pat projekto metu buvo susintetinti aukso dariniai optimizuoti sintezės parametrai, bei įvertinta optimizuota polipirolų ir aukso nanodalelių sintezės eiga ir parametru schema. Pasiūlyta nauja aukso nanodalelių padidavimo bei jų padengimo polipirolų sluoksniu metodika. Susidariusios aukso nanodalelės buvo tiriamos spektrofotometriškai, dinaminio šviesos sklaidos metodu bei skenuojančiu elektroniniu mikroskopu. Pradiniame tirpale aukso nanodalelių dydis buvo 10 nm. Į tirpalą su šiomis aukso nanodalelėmis pridėjus aukso</p>

	<p>rūgštis po 7 val. buvo stebimas jų padidėjimas iki 30 – 40 nm diametro. Tyrimų rezultatai pateikti straipsniuose [60, 62].</p> <p>Kompozicinių medžiagų sintezė ir tyrimas. Tyrimo metu pasiūlyta technologija gauti kalcio hidroksiapatito ir kalcio/magnio hidroksiapatito kompozitui, kuris gautas iš natūralių gamtinių medžiagų pieno miltelių. Ištirtas kaitinimo temperatūros režimas ir jo įtaka fazinei kompozitų sudėčiai. Kompozitų terminio skilimo (DCP) mechanizmas buvo tiriamas naudojant terminės gravimetrinės analizės metodu (TGA) kartu su diferencinės skenavimo kalorimetrija (TG-DSC). Fazinė sudėtis, struktūriniai ir morfologiniai ypatumai galutinių produktų buvo tiriamas Rentgeno difrakcijos analizė (Rentgenogramų), Furjė transformacija infraraudonųjų spindulių spektroskopija (FTIR) ir skenavimo elektroniniu mikroskopu (SEM). Detalesni tyrimo rezultatai pateikti straipsnyje [82].</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.22 (1.1.5.6) Silicio oksido, puslaidininkinių ar kompozitų sintezė ir tyrimas</p>	<p>Naujų ferroelektrinių medžiagų ir kompozicinių medžiagų naujų ir sintezės metodų ir technologijų kūrimas vienas iš projekto uždavinių. Retųjų žemių metalų geležies granatas ($R_3Fe_5O_{12}$) turi platų pritaikymą dėl savo unitalių magnetinių savybių plačiai taikomas kaip ferromagnetinė medžiaga įvairiuose magnetooptiniuose įrenginiuose, membranose ir filtruose. Projekto metu pasiūlytas ekonomišką ir pigų sintezės metodas gauti naujiems feromagnetiniams junginiams geležies granatams gauti. Naudojant kompleksodarius etandiolį ir glicerolį vandenėje terpėje zolių-gelių metodu susintetinti nauji junginiai $Y_3Fe_5O_{12}$;YIG) ir ($Tb_3Fe_5O_{12}$;TbIG). Termografimetrinė analizė buvo panaudota TbIG pradinių gelių tyrimui ir struktūros nustatymui. Sintezės parametrų įtakos kristalinei gardeliai ir struktūrai nustatyti naudota rentgeno spindulių difrakcinė analizė (XRD) ir skenuojanti mikroskopijos (SEM) metodai. Tyrimo rezultatai parodė, kad vienfazis junginys $Y_3Fe_5O_{12}$ gautas naudojant 1,2-etandiolį pradinį gelį iškaitinus $1000^\circ C$ temperatūroje. Tuo tarpu, $Tb_3Fe_5O_{12}$ vienfazį garnetą galime gauti žemesnėje temperatūroje priklausomai nuo naudojamo kompleksodario prigimties ir kiekio. Taip pat, nustatyta ir parodyta, kad sintezės parametrai turi įtakos šių kristalinių morfologijai ir dydžiui [33].</p> <p>Naujos kompozitinės medžiagos ir tyrimai atlikti ieškant naujų keramikos restauravimo metodų. Keramikai konservuoti naujas konservavimo metodas ir naujos kompozitinės polimerinės dangos buvo sukurtos naudojant Silres BS 16 pradinę medžiagą. Susintetinta nauja medžiaga ir nauja konservavimo metodika buvo pasiūlyta konservuojant keramiką iš vienuolyno “San Filippo di Fragalà” (Sicilija, Italija). Palyginimui buvo paruošta kompozitinė danga iš pradinės medžiagos Paraloid B-82, kuri šiuo metu plačiai naudojama konservavimo praktikoje. Tyrimo metu buvo atlikti abiem medžiagomis veiktų pavyzdžių tyrimai: SEM, TG, EDX, XRD metodais. Tyrimo rezultatai patvirtino, kad kompozitinė danga pilnai padengė ir apsaugojo istorinę keramiką nuo išorinio poveikio, parodyta, kad danga stabdo keramikos senėjimo procesus, tyrimo rezultatai paskelbti straipsnyje [84].</p>

Projekto uždavinys Nr. 2 "Pažangių ultrasparčiosios, nuostoviosios ir mikrobangės spektroskopijos metodų vystymas bei jų taikymo ribų plėtra"

<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.23</i> <i>(1.2.1.1)</i></p> <p>Pritaikyti ultrasparčiosios skirtuminės sugerties metodiką didelio pasikartojimo dažnio Yb:KGW lazerinei sistemai</p>	<p>Vykdamas poveiklę 1.1.1.23, buvo sukurtas femtosekundinis skirtuminės sugerties spektrometras, veikiantis su Yb:KGW lazeriais, kurių impulsų pasikartojimo dažnis siekia 1-300 kHz. UV/VIS/nIR sugerties registravimui moderniose spektroskopijos sistemose naudojama plataus spektro spinduliuotė, gaunama generuojant baltos šviesos superkontinuumą. Tokios spinduliuotės vidutinę galią riboja netiesiniai reiškiniai (stabilus vieno filamento kontinuumas gaunamas esant fiksuotai kiekvieno impulso energijai). Todėl daugelio kilohercų pasikartojimo dažnio sistemose zonduojanti spinduliuotė gaunama daug intensyvesnė nei tradicinėse 10Hz – 1 kHz sistemose, o tai leidžia registruoti daug mažesnius femtosekundinius sugerties pokyčius. Išplėtotą metodiką buvo komercializuota UAB „MGF Šviesos Konversija“, projektuojant ir įvedant į rinką prietaisą „Harpia“ (http://www.lightcon.com/products/product.php?ID=522, žiūrėta 2015.09.10). Bandomieji eksperimentai molekulinėse sistemose ir puslaidininkuose aprašyti [85] publikacijoje. Šiame darbe pademonstruota, kad InGaN/GaN kvantiniuose šuliniuose krūvininkų difuzijos koeficientas didėja, didėjant krūvininkų koncentracijai; šis reiškinys koreliuoja su krūvininkų rekombinacijos sparta. Parodyta, kad krūvininkams viršijus kritinę koncentraciją, difuzijos greitis išauga tiek, jog krūvininkai ima pasiekti naujus rekombinacijos centrus ir fotoluminescencijos efektyvumas sumažėja. Mūsų straipsnyje [86] aprašomas InAs/InGaAs kvantinių taškų pagrindu padaryto puslaidininkinio optinio stiprintuvo tyrimas. Skirtuminės pralaidumo kinetikos lyginamos trijų bangos ilgių kvantinių taškų stiprintuvuose, parodant, kad skirtuminės sugerties signalus tokiuose optiniuose stiprintuvuose galima registruoti dar platesniame spektriniame ruože negu fotoluminescencijos signalus.</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.24</i> <i>(1.2.1.2)</i></p> <p>Sukurti kinetinės fluorescencijos spektrometrą su laikine skyra ~300 fs ir registruojamomis trukmėmis iki 5 μs</p>	<p>Vykdamas poveiklę 1.1.1.24, sukurtas laiko fluorescencijos spektrometras laiko intervalui nuo 300 fs iki 5 μs. Laiko skyros fluorescencijos eksperimentinės metodikos reikšmingai papildė kinetinės sugerties tuo, jog čia signalai registruojami tik iš sužadintų būsenų, todėl jų lyginimas su sugerties signalais leidžia iš jų išskirti sužadintų elektroninių būsenų nulemtus aspektus, ir atskirti juos nuo pagrindinės būsenos pokyčių (pvz., fotoproduktų susiformavimo). Sukurta laikinės fluorescencinės spektroskopijos sistema veikia su didelio pasikartojimo dažnio Yb:KGW lazerinėmis sistemomis. Ji apjungia fluorescencijos dažnio sumavimo ir laike koreliuotų pavienių fotonų skaičiavimo metodikas. Tai leidžia apimti itin didelį dinaminį trukmių diapazoną. Sistema buvo komercializuota ir įvesta į rinką bendradarbiaujant su UAB „MGF Šviesos konversija“ (http://www.lightcon.com/products/product.php?ID=524, žiūrėta 2015.09.10)</p> <p>Su sukurtu fluorescencijos spektrometru atlikti fluorescencijos</p>

	<p>gyvavimo trukmių matavimai leido atlikti tyrimą, aprašytą [10] publikacijoje. Ištyrus kryptingai susintetintų polimetininių dažų serijų sužadintos būsenos dinamiką, pademonstruota, kad sužadintos būsenos sugerties spektro maksimumas reikšmingai priklauso nuo polimetinės grandinės ilgio, o sužadintos būsenos gyvavimo trukmę tokiose molekulėse galima keisti, keičiant polimetinės grandinės galines grupes. Atlikti eksperimentai buvo papildyti kvantinės chemijos skaičiavimais, pagilinant stebimų reiškinių teorinį supratimą.</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.25</i> <i>(1.2.1.3)</i> Atlikti mokslinius eksperimentus su molekulinėmis sistemomis (fotochrominiai junginiai), nanostruktūromis (kvantiniai taškai, šuliniai, vielos) bei puslaidininkiais</p>	<p>Atliekant ultrasparčiuosius tyrimus su molekuliniiais junginiais, nanostruktūromis ir puslaidininkiais buvo naudojami 1.1.1.23, 1.1.1.24, 1.1.1.31 poveiklėse sukurti eksperimentiniai metodai, todėl prie tų poveiklių nurodytos publikacijos [85, 86] aktualios ir šiai poveiklei. Jau išvardinti rezultatai nekartojami.</p> <p>[10] publikacijoje charakterizuojami naujai susintetinti indolo[2,1-<i>b</i>][1,3]benzoksazino tipo fotochrominiai junginiai. Parodyta, kad feniliniai pakaitalai prijungti prie indolo grupės bazinėje molekulėje (I-os grupės junginiai) stipriai išplečia fotoindukuotos būsenos spektrą į raudoną ir infraraudoną spektrinį diapazoną, esmingai nepakeičiant kinetinių molekulių savybių. Kita vertus, prijungus juos prie 4-ojo anglies atomo (II grupės junginiai), molekulių persijungimo greitis padidėja. Parodyta, kad pirmosios grupės junginiai yra fotostabilesni ir pasižymi didesniu fotochromizmo kvantiniu našumu, lyginant tiek su baziniu junginiu, tiek su II grupės junginiais.</p> <p>Publikacijoje [87] pristatyti struktūriškai modifikuotų fotochrominių indolo[2,1-<i>b</i>][1,3]benzoksazino tipo junginių ultrasparčiosios dinamikos tyrimo rezultatai. Spektroskopijos duomenims paaiškinti pasiūlytas kinetinis ultrasparčiosios evoliucijos modelis, kuriame susiformuoja trumpai gyvuojantis fotoproduktas, nedalyvaujantis galutinėje fotochromizmą lemiančioje reakcijoje. Galutinis fotoproduktas susiformuoja iš S1 sužadintos būsenos nespinduliniu būdu per maždaug 100 ps. Susidaręs fotoproduktas terminės aktyvacijos keliu grįžta į pagrindinę būseną per kelias dešimtis nanosekundžių.</p> <p>Indolo benzoksazinių fotochrominės reakcijos buvo tiriamos žadinimo-peržadinimo-zondavimo spektroskopijos metodika. Straipsnyje [88] parodyta, kad sužadinus fotoproduktą į aukštesnę sužadintą būseną, molekulės iš jos grįžta atgal į pagrindinę būseną ir dalis fotoproduktų gali būti priverstinai grąžinama atgal, nelaukiant dešimtis nanosekundžių trunkančios terminės aktyvacijos. Spektroskopiniams duomenims paaiškinti pasiūlytas fenomenologinis modelis, aprašantis sužadinimo dinamiką ir pakartotinio žadinimo įtaką jai.</p> <p>Nuo pat indolo benzoksazinių atradimo, šios molekulės buvo laikomos fotochromiškoms, jų trumpai gyvuojančius fotoproduktus priskiriant būsenai su nutraukta C-O molekuline jungtimi ir atviru oksazino žiedu. Šiame straipsnyje mes pademonstruojame, kad toks aprašymas nepakankamai pagrįstas spektrine informacija ir pateikiame eksperimentus, rodančius, jog stebimą fotodinamiką acetonitrilo tirpaluose gali lemti tripletinės sužadintos būsenos. Tai patvirtino fotoproduktų</p>

	<p>gyvavimo trukmių jautrumas deguonies koncentracijai tirpale. Todėl šios molekulės neturėtų būti laikomos fotochrominiais jungikliais. Kita vertus, alkoholio tirpaluose be tripletinių būsenų buvo stebima ir fotochromizmo dinamika, kurios spektriniai požymiai atitiko tuos, kurių buvo tikimas molekulėms su atviru oksazino žiedu. Šie rezultatai pateikti straipsnyje [89].</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.26 (1.2.2.1)</p> <p>Galingų šviesos impulsų ir skaidrių optinių medžiagų netiesinės sąveikos skaitmeninis modeliavimas</p>	<p>Teoriškai ištirtas skirtuminio dažnio generavimas, naudojant keturbangį maišymą kvantiniame trijų lygmenų sistemų ansamblyje, kai šalia draustino (dipoliniu artiniu) šuolio iš pagrindinės į aukščiausią būseną sistema turi optiškai aktyvų žemo dažnio šuolį. Pirmasis dažnis ω_L parenkamas matomame ar artimajame infraraudonųjų bangų ruože taip, kad būtų tenkinama dvifotonio rezonanso sąlyga, o antrasis ω_P – artimas šuoliui į žemesnę sužadintą būseną. Nustatyta ir paaiškinta resonansiškai stiprinamo skirtuminio dažnio generavimo priklausomybė nuo zonduojančio impulso vėlinimo (laikų skirtumo tarp žadinančio ir zonduojančio impulsų) ženklo. Pabrėžtas koherentinio stiprinimo, nesant užpildos apgrąžos kvantinėje sistemoje, vaidmuo (21st International Congress on Photonics in Europe, Munich ICM, Germany 12 - 16 May 2013. E. Gaižauskas „Selective probing of electronic and nuclear coherences using time-resolved off-resonant excitation of Raman-active vibration modes“). Nustatyti dėsniniai patvirtinti eksperimentiniais keturbangio maišymo natrio garuose tyrimais, išmatavus žymų parametrinio stiprinimo prieauglį vėlinant kaupinimą zonduojančio impulso atžvilgiu [3].</p> <p>Sistemoje, kur koherentiškai žadinama žemo dažnio būseną yra terahercų bangų ruože (žadinant pvz. fononą) teoriškai ištirta terahercų bangų generavimo dinamika. Surištoji koherentinė elektromagnetinio lauko ir fononų būseną (polaritoninė banga) sukurama kaupinant skirtingų dažnių ultratrumpaisiais lazeriniais impulsais. Pirmasis dažnis ω_L matomame ar artimajame infraraudonųjų bangų ruože parenkamas taip, kad būtų tenkinama dvifotonio rezonanso sąlyga, o antrasis ω_P – artimas dvigubam kaupinimo dažniui ($\omega_P \sim 2\omega_L$). Kaupinimo artiniu įvertinta terahercų bangos generavimo dinamika demonstruoja optinio lyginimo (<i>optical rectification</i>, angl.) metodo realizavimo galimybes terpėse su centrine simetrija. Praktiškai pasiūlytas metodas galėtų būti taikomas technologiškai patraukliose optinio stiklo su įterptomis puslaidininkių nanodalelėmis terpėse, kurioms būdingi optiniai šuoliai į eksitonines būsenas, pasižymintys dideliu osciliatorių stipriu, o sužadinti koherentiniai eksitonai – ilga gyvavimo trukme, palyginti su ultratrumpųjų kaupinančių impulsų trukmėmis [33].</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.27 (1.2.2.2)</p> <p>Aukštesnių eilių optinių netiesiškumų bei netiesinių procesų dujose ir lazeriu indukuotoje plazmoje teorinis</p>	<p>Daugelyje netiesinės spektroskopijos sistemų žadinanti ir zonduojanti spinduliuotė gaunamos, naudojant netiesinius optinius reiškinius, tokius, kaip antrosios ar trečiosios harmonikų generacija, dažnių maišymas ar parametrinė šviesos generacija. Visi šie reiškiniai pagrįsti antros ar trečios eilės optinių medžiagų netiesiškumu, bet naudojant didelės galios lazerio pluoštus, gali pasireikšti ir aukštesnių (penktos ir dar didesnių)</p>

<p>modeliavimas</p>	<p>eilių netiesiniai optiniai reiškiniai. Todėl, vykdant projekto uždavinius ir siekiant jo tikslo, buvo analizuojami aukštesnių eilių optiniai netiesiškumai, bei jų įtaka dažnių maišymui, trečios harmonikos generacijai bei kitiems žemesnės eilės procesams. Tam buvo atlikti penktosios eilės netiesinio optinio jautrio koeficientų skaičiavimai natrio garams [28], kurie yra atsakingi už trečiosios harmonikos generavimą, išsigimusį šešių bangų maišymą, bei penktosios eilės netiesinį Kero efektą. Netiesinio jautrio vertės buvo gautos, naudojant kvantinės mechanikos perturbacijų teoriją atomo banginei funkcijai bei naudojant 12 žemiausių energijos lygmenų vertes ir pateikiamos kaip bangos ilgio funkcijos plačiame spektriniame diapazone nuo jonizacijos bangos ilgio 241,3 nm iki 2400 nm. Gauti duomenys gali būti naudojami toliimesniam įvairių netiesinių optinių procesų teoriniam modeliavimui. Be to, buvo atliktas ir femtosekundinės trukmės lazerio impulsų sklidimo izotropinėse terpėse modeliavimas. Nustatyta, jog nekolinearaus femtosekundinių šviesos impulsų šešiabangio dažnių maišymo metu ore galima generuoti trečios optinės harmonikos spinduliuotę, kurios generacijos efektyvumas gerokai višija tiesioginį generacijos procesą (K. Steponkevičius, V. Jarutis, and V. Vaičaitis. Quintic Optical Nonlinearity in Frequency Tripling of Femtosecond Laser Pulses. Conference “Photon14”, Imperial College, London, September 1-4, 2014). Be to, buvo parodyta, jog naudojant nekolinearaus šešiabangio dažnių maišymo reiškinį, galima įvertinti penktos eilės oro netiesiškumo koeficientą [23] bei eliminuoti konkuruojančius procesus, tokius, kaip plazmos ar fazinės spektro moduliacijos, įtaką. Siekiant išsiaiškinti šių procesų įtaką generuojamos spinduliuotės spektrinėms ir energinėms charakteristikoms buvo sukurta skaitmeninio modeliavimo programa, modeliuojanti pirmosios, antrosios ir trečiosios harmonikų sklidimą bei sąveiką ore, aukštesnių eilių netiesinių procesų, plazmos generavimą bei šių procesų įtaką generuojamos spinduliuotės parametrams [31, 34].</p>
<p>1.1.1.28 (1.2.2.3) Plačiąjuosčių dažnio keitiklių tyrimas, modeliavimas ir projektavimas</p>	<p>Projekto įgyvendinimo metu buvo atlikti keli eksperimentiniai tyrimai. Pirmiausia surinktas ir ištirtas dviem pluoštais kaupinamo parametrinio šviesos stiprintuvo stendas. Tyrimas buvo atliekamas su pikosekundiniais impulsais, tačiau pats dviplouščio kaupinimo principas tinka ir plataus spektro impulsams stiprinti. Dviejų pluoštų suvedimas itin mažais kampais iki šiol dar nebuvo išbandytas ir tyrimo metu parodyta, kad šis būdas nors ir tinkamas tiek siaurajuosčio, tiek ir plačiąjuosčio signalo stiprinimui bei erdvinei moduliacijai, tačiau turi apribojimų praktiniu požiūriu dėl ne itin efektyvaus kaupinimo pluoštų suvedimo. Taip pat buvo atliekami itin plačių signalų parametrinio stiprinimo tyrimai infraraudonojoje srityje. Atlikta netiesinių kristalų, tinkamų minėto spektrinio diapazono dažnių keitikliams analizė. Su parinktais kristalus surinkta penkių pakopų plataus spektro čirpuotų impulsų parametriniam stiprinimui artimojoje bei viduriniojoje infraraudonojoje srityje skirta sistema. Pademonstruotas labai plataus spektro čirpuotų impulsų 2 μm</p>

	<p>srityje generavimo ir stiprinimo būdas, o suspaustus impulsus būtų galima panaudoti ultrasparčijai spektroskopijai infraraudonojoje spektro srityje.</p> <p>Be to, buvo vykdomi ir netiesinių dažnio keitiklių eksperimentai panaudojant radialinės poliarizacijos konverterius ir S-tipo fazines plokšteles.</p> <p>Šių darbų pagrindu buvo atspausdintos 4 mokslinės publikacijos [21, 27, 30, 42] bei pristatytas kviestinis pranešimas konferencijoje (R.Butkus, A.Piskarskas, „20 Years of Progress in OPCPA“, Frontiers in Optics (FiO) 2012/Laser Science (LS), Rochester, USA, spalio 14-18d., 2012).</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.29 (1.2.2.4)</p> <p>Trečiosios ir aukštesnių eilių optinių harmonikų dujose ir plazmoje tyrimas bei gautos spinduliuotės charakterizavimo eksperimentai</p>	<p>Pagrindinis poveiklės tikslas – koherentinės ekstremalaus ultravioleto spinduliuotės (XUV) šaltinio sukūrimas, leisiantis ateityje realizuoti < 1 fs laikinės skyros spektroskopiją ir mikrodarinių vaizdinimą su skyra, pakankama registruoti molekulių erdvinę struktūrą.</p> <p>Tyrimai buvo atliekami dvejose tamptai susijusiose kryptyse: a) . Tai didelės galios infraraudonosios spinduliuotės lazerinio šaltinio aukštųjų harmonikų žadinimui sukūrimas, b) lazerinės įrangos aukštųjų harmonikų žadinimui inertinių dujų čiurkšlėje ir XUV spinduliuotės registravimui sukūrimas. Projekto vykdymo metu buvo sukurta itin didelės smailinės galios impulsų šaltinis pasitelkiant čirpuotų impulsų parametrinio stiprinimo. Šioje lazerinėje sistemoje apjungtos femtosekundinės Yb:KGW lazerinės sistemos galimybes formuojant itin plataus >250nm spektro pločio užkrato šaltinį bei pikosekundinės Nd:YAG lazerinės sistemos galimybes pasiekti dideles impulsų energijas. To dėka plačiajuosčio signalo impulsai buvo sustiprinti iki 35 mJ energijos. Taip pat pademonstruotos impulsų spūdos iki <10fs galimybės. Sistema veikia 10 Hz pasikartojimo dažniu, o impulsu smailinė galia viršija 3,5 TW. Fokusuojant išvadinė spinduliuotę į 100 μm dydžio dėmę galima pasiekti intensyvumą viršijantį 10¹⁶ W/cm². Parametrinio stiprinimo sistemos parametrai detalčiai pristatyti [32] publikacijoje. Po to atlikti sistemos tobulinimo darbai įdiegiant papildomus sistemos komponentus užtikrinančius impulsų nešlio-gaubtinės fazės stabilizaciją, kurie pateikti [57] publikacijoje.</p> <p>Ultravioletinės spinduliuotės registracijos sistema sukurta XUV spektrometro McPherson 248/310G pagrindu.. Spinduliuotė , kurios fotono energijai siekia dešimtis ar šimtus elektrovoltų yra sugerama sklindant oru. Todėl buvo suprojektuota ir sukonstruota vakuuminė sistema, kuri patikimai sumažina dujų molekulių skaičių visame optiniame kelyje nuo kietos ar dujų terpės bandinio, kuriame vyksta harmonikų generacija, iki difrakcinės gardelės ir detektorių liniuotės spektrui užregistruoti. Buvo atlikti tyrimai šio spektrometro veikos parametrams optimizuoti panaudojant vienos atmosferos slėgio oro dujų terpėje sugeneruotą trečiosios ir penktosios harmonikos spinduliuotę žadinant sąlyginai mažo intensyvumo (5*10¹³ W/cm²) spinduliuote ties 1μm bangos ilgiu. Taip pat sukurta bandinio pozicijos optinio pluošto kelyje nuotolinio valdymo</p>

	<p>sistema.</p> <p>Artimiausiu metu planuojama pradėti atosekundinės trukmės impulsų generacijos tyrimus. Tokių impulsų panaudojimas ypatingai įdomus sudėtingų daugelio elektronų sistemų tyrimams, krūvio judėjimo sudėtingose molekulėse valdymui ir matavimui, taip pat tiriant elektronų koreliacijos mechanizmus.</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.30</i> <i>(1.2.3.1)</i></p> <p>Aukštesnių eilių optinių netiesiškumų dujose tyrimas. Trečios harmonikos generavimo dujose tyrimas ir daugiafotoninės spektroskopijos eksperimentai</p>	<p>Trečiosios optinės harmonikos generacija šiuo metu yra vienas patikimiausių netiesinės optikos metodų, leidžiančių kurti šviesos šaltinius, spektro diapazonuose, kur tiesioginė lazerinė generacija neefektyvi, ar iš viso negalima. Naudojant tokius šviesos šaltinius spektroskopinėse sistemose ypatingą svarbą įgauna generuojamos spinduliuotės kokybė (skėstis, spektriniai parametrai ir pan.), kurią paprastai didele dalimi lemia konkuruojantys netiesiniai optiniai procesai, įskaitant ir aukštesnių eilių optinius reiškinius. Todėl, siekiant projekto tikslų buvo eksperimentiškai ir teoriškai nagrinėjama trečios harmonikos generacija ore femtosekundinius lazerio impulsus (800 nm bangos ilgio) fokusuojant įvairaus ilgo židinio nuotolio lęšiais [29, 34]. Eksperimentiškai užfiksuoti dideli tiek pirmosios, tiek trečiosios harmonikų spektriniai poslinkiai. Pastebėta, kad, kai formuojama šviesos gija trūki, arba stebimas vadinamas refokusavimas, šie spektriniai poslinkiai tampa dideli – virš 10 nm. Kai refokusavimo nėra, spektriniai poslinkiai yra mažesni, kas leidžia gauti geresnės spektrinės kokybės spinduliuotę. Papildomai spektrinės ir erdvinės trečiosios harmonikos signalo, generuojamo naudojant nekolinearų šešių bangų maišymą ore, savybės buvo žymiai pagerintos, naudojant du susikertančius kaupinimo pluoštus [23, 35], kas leido registruoti šešiabangį dažnių maišymą (penktos eilės optiniu medžiagos netiesiškumu grįstą procesą). Keičiamo intensyvumo santykio žadinimo pluoštų naudojimas daugumą trečiosios harmonikos impulso energijos leido perkelti į vieną beveik idealų Gauso pluoštą, o bendras tokios trečiosios harmonikos generavimo efektyvumas padidėjo beveik 25%.</p> <p>Šis procesas leido pasiekti aukštą trečiosios optinės harmonikos generacijos efektyvumą, o tai rodo, aukštesnių eilių optinių netiesiškumų svarbą vykstant didelio intensyvumo šviesos impulsų ir netiesinių medžiagų sąveikai. Taip pat buvo atlikti ir daugiafotoninės spektroskopijos natrio garuose eksperimentai [3], kur nustatyta, kad rezonansinėse terpėse dvifotonio ir vienifotonio žadinimo atveju medžiagos poliarizacija išlieka daug ilgiau, nei ją sužadinę ultratrumpi zondojuojantis ar žadinantis impulsai. Tikimės, jog šiame tyrime gauti rezultatai leis supaprastinti lazerio spinduliuotės dažnių keitiklius, veikiančius keturbangio dažnių maišymo izotropinėse medžiagose principu.</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.31</i> <i>(1.2.3.2)</i></p> <p>Femtosekundinio žadinimo-zondavimo spektrometro IR sričiai (3500-1000 cm^{-1}) kūrimas</p>	<p>Vykdam šią poveiklę sukurtas femtosekundinės priverstinės Ramano sklaidos spektrometras, leidžiantis registruoti molekulių Ramano spektrų pokyčius 200-3500 cm^{-1} spektro srityje su femtosekundine laikine skyra. Šis unikalus metodas papildo standartinės elektroninės laikinės spektroskopijos metodikas tuo, kad suteikia informacijos apie struktūrinius pokyčius molekulėse, vykstančius per pirmąsias pikosekundes po</p>

	<p>sužadavimo. Spektrometras buvo pritaikytas tiriant sužadavimo dinamiką natūraliuose ir dirbtiniuose fotosintetiniuose molekulių kompleksuose. Buvo tiriami energijos pernašos vyksmai peridininio-chlorofilo baltyme iš <i>Amphidinium carterae</i> ir karotino-ftalocianino molekulinėje diadoje. Eksperimentais ir monte-carlo modeliavimu parodyta, kad sužadavimo pernašos sparta iš karotenoidų į cholorfilą ar ftaliocianiną nepriklauso nuo to, ar energijos akceptorius yra sužadintoje, ar pagrindinėje būsenoje. Rezultatai paskelbti publikacijoje [22.] Šiuo metu spaudai rengiamos dar kelios publikacijos.</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.32 (1.2.3.3)</p> <p>THz dažnio laikinės skyros spektroskopinės sistemos kūrimas. Medžiagų sugerties spektrų matavimas ir analizė THz dažnių ruože</p>	<p>Pagrindinė sudedamoji dalis THz dažnio laikinės skyros spektroskopinėse sistemose paprastai yra plačiajuostės THz dažnio spinduliuotės šaltinis. Todėl, vykdant projekto uždavinius ir siekiant jo tikslo, pirmiausia buvo analizuojami įvairūs tokios spinduliuotės generavimo metodai. Remiantis atlikta literatūros apžvalga buvo pasirinktas THz generavimo bichromatiniais lazerio impulsais (pirmoji bei antroji femtosekundinio Ti:safyro lazerio spinduliuotės harmonikos) kuriamoje oro plazoje metodas. Kadangi ne visi procesai, vykstantys tokios generacijos metu yra iki galo suprasti, buvo atliktas atitinkamas teorinis modeliavimas [31, 33]. Tam pirmiausia buvo analizuojama žadinimo parametrų (galios, intensyvumo, fazinių sąryšių) įtaka THz generacijos efektyvumui bei generuojamos spinduliuotės spektrui [31]. Terahercų generavimas buvo paašškintas kaip pirmosios (800 nm bangos ilgio) ir antrosios (400 nm) harmonikų sąveikos generuojamoje plazmoje rezultatas. Sukurtas supaprastintas teorinis modelis, aprašantis tiek fokusuojamų pluoštų antros harmonikos generaciją BBO kristale, tiek plazmos elektronų tankį bei srovės tankį veikiant žadinamosioms spinduliuotėms. Siekiant paspartinti skaičiavimus, teorinis modelis buvo supaprastintas, nes neišskaityta plazmos įtaka spinduliuotei, tačiau parodyta, kad eksperimentiškai gautos terahercų spinduliuotės energinės priklausomybės gerai atitinka suskaičiuotas teoriškai (K. Steponkevičius, V. Pyragaitė, V. Smilgevičius, and V. Vaičaitis. „Nonlinear phase shifts of bichromatic pump waves during terahertz wave generation in air“. Munich, 2013 Conference on Lasers and Electro-Optics Europe and International Quantum Electronics Conference (CLEO/EUROPE-IQEC2013). Munich ICM, International Congress Centre Munich, Germany, 12 - 16 May 2013).</p> <p>Be to, teoriškai buvo analizuojama ir keturių bangų skirtuminio dažnio generacija centrosimetrinėse medžiagose legiruotose trijų lygių kvantinėmis sistemomis [33]. Ypatingas dėmesys buvo atkreiptas į terahercinės spinduliuotės generaciją koherentinės sąveikos sąlygomis, kai optinių impulsų trukmė yra trumpesnė nei dviejų ar trijų fotonų rezonansinių šuolių indukuotos koherencijos relaksacijos trukmė. Parodyta, jog koherentinis keturių bangų dažnio maišymo režimas pagerina spinduliuotės generavimo efektyvumą THz dažnių diapazone (International Conference on Advanced Laser Technologies, 6 — 10 October 2014, Cassis, France, E. Gaižauskas, „THz Generation by</p>

	<p>Combined One- and Two-photon Resonant Excitations in an Ensemble of Three Level Quantum Systems“).</p> <p>Remiantis teorinio modeliavimo rezultatais buvo sukurta THz dažnio laikinės skyros spektroskopinė sistema, grindžiama lazeriu sukurtoje oro plazmoje generuojama plačiajuoste THz dažnio spinduliuote. Ši sistema leido registruoti įvairių medžiagų pralaidumo spektrus 0,1-4 THz spektro ruože (V. Pyragaitė, K. Steponkevičius, V. Smilgevičius, and V. Vaičaitis. Broadband terahertz wave generation from laser-induced air plasma. Conference “Photon14”, Imperial College, London, September 1-4, 2014).</p>
<p>1.1.1.33 (1.2.4.1) Neempirinių kvantinės chemijos ir molekulių dinamikos programų (molpro, molcas, vasp, amber, gaussian ...) optimizavimas Saulėtekio slėnio superkompiuteriui. Dirbtinių šviesą surenkančių ir fotodinaminių molekulių sistemų struktūrų ir spektrinių savybių kompiuterinis modeliavimas</p>	<p>Šios poveiklės mokslinius tyrimus atliko 2 doktorantai ir vienas mokslų daktaras, darbai susiję su Ramano spektrų modeliavimu buvo atlikti bendradarbiaujant su Sakle Biologijos ir technologijų institutu (Prancūzija), biojutiklių teorinio modeliavimo darbai kvantinės chemijos metodais – kartu su VU Lazerių centro mokslininkais. Darbui buvo naudojamas VU atviros prieigos centro „HPC Saulėtekis“ superkompiuteris.</p> <p>Buvo atlikti įvairių karotenoidų ir polieno grandinelių Ramano spektrų ir elektroninių sugerties spektrų teoriniai tyrimai [25]. Buvo nustatyta: <i>s-cis</i> izomerizacijos atveju karotenoidų turinčių galuose β-žiedus efektyvusis konjugacijos ilgis sumažėja, o polieno grandinelių padidėja; dėl metilo grupių prisijungusių prie polieno gramdinėlės suskyla ν_1 Ramano spektro juosta; efektyvusis konjugacijos ilgis <i>all-trans</i> polienuose ir atitinkamuose <i>all-trans</i> karotenoiduose su ν_1 Ramano spektro dažniu koreliuoja vienodai. Gauti rezultatai gerai sutampa su eksperimentiniais duomenimis. Ištyrus β-karoteno and 13,13'-diphenyl-β-karoteno Ramano spektrus buvo patvirtintas galimybė naudoti polieno grandinėlės valentinių virpesių Ramano spektrus nustatant karotenoidų savybių kitimą įvairiose aplinkose, pvz. karotenoidams esant biologinių makromolekulių apsuptyje[45].</p> <p>Ramano spektro ir biojutiklių elektroninių spektrų modeliavimo darbų rezultatai buvo pristatyti mokslinėse konferencijose (iš viso 3 pranešimai dvejose tarptautinėse konferencijose): Du pranešimai Durham'e, (UK) 15^a Tankio funkcionalo ir jo taikymų konferencijoje, 2013-09-09 – 2013-09-013, (A dft study of resonance raman and optical absorbtion spectra of carotenoids, M. Macernis, J. Sulskus, S. Malickaja, L. Valkunas, B. Robert bei Study of Artificial Light Harvesting Antennae by Quantum Chemical Methods, S. Malickaja, M. Macernis, J. Sulskus, L. Valkunas) bei Nantes (Prancūzija) Fotoaktyvių molekulių modeliavimo konferencijoje, 2015-04-20 - 2015-04-25 (Spectral properties of spiro[chromene-2,2'-indolo] based photochromic molecules, , J. Sulskus, S. Toliautas, S. Malickaja, M. Vengris, L. Valkunas).</p>
<p>1.1.1.34 (1.2.4.2) Naujų puslaidininkinių organinių medžiagų charakterizavimas ir</p>	<p>Ypatingą vietą šioje srityje užima kalcio fosfatai, iš kurių ypač išskirtinas kalcio hidroksiapatitas ((Ca₁₀(PO₄)₆(OH)₂, toliau - CaHA). Jis vis plačiau taikomas tiek moderniose technologijose, tiek ir inovativioje medicinoje. CaHA, savyje turintis amorfinio fosfato fazę (ACP-CaHA) ir nano- struktūrizuotasis CaHA, buvo</p>

<p>savybių tyrimas virpesinės ir BMR spektroskopijos metodais</p>	<p>pagaminti VU Chemijos fakultete taikant zolių ir gelių sintezės metodą. Struktūriniai abiejų junginių hidroksilo grupių organizavimosi savitumai buvo nustatyti ^1H ir ^{31}P MAS ('magiško kampo sukimo'), ^1H-^{31}P kryžminės poliarizacijos (CP MAS) BMR ir FTIR spektrometrijos metodais [45, 46]. Parodyta, kad nano-struktūrizuotajame CaHA, priešingai nei ACP-CaHA, struktūriškai junginio karkase pririštųjų-OH dalis yra žymiai didesnė už hidroksilo grupių iš adsorbuotojo vandens. Atlikta preciziška abiejų bandinių BMR signalų kontūrų formos analizė (> 4000 taškų kontūrai). Nustatyta, kad ^{31}P BMR spektrų, tiek plačiajuosčių, tiek MAS, signalų kontūrams yra būdinga Voigt'o forma. Tai reiškia, kad tiriamuosiuose junginiuose prateka keli dinaminiai vyksmai, kurių indėliai į spektrinius kontūrus aprašomi Lorentz'o ir Gauss'o funkcijomis, o tų vyksmų spartos gali būti labai skirtingos. ^1H ir ^{31}P sukinių ir gardelės bei sukinių relaksacijų trukmių (T_1 ir T_2) matavimai atskleidė ACP-CaHa junginyje labai sparčius sukinių judesius. Nustatytoji judesių kambario temperatūros artumoje (~ 300 K) koreliacijos trukmė yra $\tau \sim 7 \cdot 10^{-7}$ s eilės. Kintamo MAS dažnio poveikis ^{31}P signalo formai taip pat patvirtina, kad ACP-CaHa junginyje vykstančių judesių laiko mastelis patenka į mikro- ar netgi nanosekundžių skalės sritį [46]. Nano-struktūrizuotojo CaHA nevienalyčio anizotropinio signalo išplitimo mastas 1220 ± 20 Hz puikiai dera su 1185 Hz verte, atitinkančia ^1H-^{31}P sukinių sąveikos skirstinio maksimumą, kuris buvo nustatytas šiam bandiniui remiantis CP MAS kinetikos duomenimis [45]. Tam šiame darbe buvo sukurtas irpaskelbtas naujas dalinio (riboto) sukinių sąveikos suvidurkinimo metodas. ^1H-^{31}P sukinių sąveikos dinamika nano-struktūrizuotajame CaHA yra žymiai lėtesnė ($\tau \sim 3.3 \cdot 10^{-5}$ s) nei ACP-CaHA.</p> <p>Prie naujos kartos medžiagų, formuojančių nano- ir mezo struktūras priskirtini joniniai skysčiai (toliau - JS). Projekto vykdymo metu taikant BMR, FTIR ir Ramano spektrometrijos metodus buvo ištirti relaksacijų ir protonų su deuteronais apykaitos vyksmai serijoje joninių skysčių imidazolio pagrindu [18, 47]. Svarbiausiais pasiekimais čia laikytini:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Sukurtas naujas labai trumpų sukinių ir gardelės bei sukinių relaksacijos trukmių matavimo metodas, panaikinant akustinį skambesį [47]. Metodas buvo pademonstruotas matuojant anjonų (Cl^-, Br^-) relaksacijų trukmes ir parodyta jų įtaka gryno JS struktūrai. Kaip visai neseniai informavo žurnalo <i>Spectrochimica Acta</i> redakcija, šis straipsnis yra vienas labiausia persisiunčiamų (download). Todėl ateityje galima tikėtis ir gero jo citavimo rodiklio. . 2. BMR ir Ramano spektrometrijos metodais ištirta anjonų įtaka vienam iš aktualiausių elementariųjų molekulinėms vyksmų – protonų ir deuteronų apykaitai [18], o taip pat atlikti FTIR eksperimentai su modelinėmis sistemomis ir jų teoriniai skaičiavimai [16, 17, 48]. Įrodyta, kad protonų ir deuteronų apykaita nevyksta liotropinio jonogelio fazėje. Ji taip pat nesukelia konformacinių JS virsmų, kaip buvo teigiama ir argumentuojama. Mūsų atliktieji Ramano sklaidos tyrimai kartu
---	--

	<p>su kvantinės chemijos skaičiavimais leidžia teigti, kad stebimi pokyčiai Ramano spektruose yra stebimi ne dėl konformacinių virsmų, o dėl kai kurių virpesinių juostų poslinkio [18]. Šiame darbe buvo aptikta ir pirmą kartą paskelbta apie antrinį izotopinį efektą joniniuose skysčiuose. Išvystytas matematinis didelės amplitudės protono judesio aprašymo aparatas [16, 17, 48] bus toliau taikomas vandenilinio ryšio JS sistemose tyrimuose.</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.35 (1.2.4.3) Nanodarinių ir mezoskopinių struktūrų charakterizavimas ir savybių tyrimas virpesinės ir BMR spektroskopijos metodais</p>	<p>Vykdamas projekto uždavinius buvo tobulinamas infraraudonosios spektrometrijos metodas skirtas spinduliuotei nelaidžių bandinių tyrimui. Standartinis tokių bandinių tyrimo metodas registruoti nuo bandinio veidrodžiškai atsispindėjusią spinduliuotę ir pritaikius Kramers-Kroning vaizdavimą gauti bandinio infraraudonosios sugerties spektrus. Tačiau šis metodas tinka tik labai mažai klasei bandinių kurių paviršiaus nelygumai yra daug mažesni už zonduojančios spinduliuotės bangos ilgį. Realuose bandiniuose greta veidrodinio atspindžio, dėl paviršiaus nelygumų vyksta ir difuzinis atspindys, dėl kurio įtakos neįmanoma korektiškai pritaikyti Kramers-Kroning vaizdavimo. Tyrimų metu sukurta metodika kurią pritaikius pavyksta spektre matematiškai išskirti veidrodinio ir difuzinio atspindžio komponentus, ir rekonstruoti korektišką sugerties spektrą. Sukurto metodo efektyvumas buvo pavizuotas tiriant inkstų akmenų cheminę sudėtį bei morfologiją [15].</p> <p>Dar viena labai aktuali šiuolaikinių spektrinių tyrimų problematika labai maži tiriamosios medžiagos kiekiai. Norint gauti labai nedidelių medžiagų kiekių virpesinius spektrus dažnai naudojamos spektrinio signalo stiprinimo metodikos. Viena tokių paviršiumi sustiprinta Ramano sklaida (SERS). Projekto metu sukurta metodika kurios esmė parinkti tinkamus sidabro nanodalelių koloidus bei šių koloidų ir bandinio paruošimo būdus skirtingiems objektams tirti. Metodikos taikymas buvo pademonstruotas tiriant šlapimo nuosėdų cheminę sudėtį [38], šlapimo rūgšties priemaišas tirpaluose (M. Velicka, M. Pucetaite, J. Ceponkus and Valdas Sablinskas, "Application of various colloidal SERS approaches for detection of traces of uric acid", Global Biotechnology Congress-2015, 2015.07.22 – 25, Bostonas (JAV)) bei siekiant nustatyti cheminius skirtumus tarp sveikų ir navikinių audinių [39].</p> <p>Sėkmingas SERS metodikos taikymas pademonstruotas ir tiriant vienasienius anglies nanovamzdelius. Dėl rezonansinės sąveikos tiriant anglies nanovamzdelius Ramano sklaidos spektriniu metodu, stebimos tik paties anglies nanovamzdelio sąlygotos spektrinės juostos, tačiau dėl mažo intensyvumo neįmanoma aptikti priemaišų ar prie nanovamzdelių chemoškai prisijungusių funkcinių grupių. Projekto metu atlikti tyrimai parodė, kad tinkamai panaudojus sidabro nanodalelių koloidą, galima pasiekti SERS efektą prie nanovamzdelių prijungtoms cheminėms grupėms ir tokiu būdu tinkamai parinkus koloido koncentraciją vieno spektrinio matavimo metu gauti informaciją ir apie patį nanovamzdelį, ir apie prie jo prisijungusias chemines grupes. Rezultatai pristatyti konferencijose: V. Šablinskas, J. Ceponkus, I. Puodžiūtė, M. Pučetaitė, U. Akbaba. Raman studies</p>

	<p>of environmental influence on G and D spectral modes in single walled carbon nanotubes // International Conference on Diamond and Carbon Materials 2013, 2013.09.02 05, Riva del Garda, Italy ir J. Čeponkus, M. Velička, M. Pučetaité, V. Šablinskas. Study of SWCNT functionalization by means of SERS // International Conference "SPIE Optics and Photonics-2015", 2015.08.09-13, Sandiegas, JAV.</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.36</i> <i>(1.2.4.4)</i></p> <p>Liuminescencinių ir kitų optinių medžiagų struktūros savybių tyrimas virpesinės ir BMR spektroskopijos metodais</p>	<p>Tiriant medžiagų struktūros savybes virpesinės ir BMR spektroskopijos metodais pirmą kartą pritaikius ^1H BMR impulsinių gradientų metodą ištirta ilgagrاندžių joninių skysčių (JS) savoji difuzija [49]. Parodyta, kad temperatūrinės difuzijos koeficientų priklausomybės tokioms medžiagoms yra Arrhenijaus tipo, nors ilgai buvo manoma, kad daugumai JS turi galioti Vogel-Fulcher-Tammann (VFT) režimas. JS difuzijos koeficientų vandens tirpaluose tyrimai aiškiai parodė mezostruktūrų – micelių formavimosi pradžios tašką bei leido nustatyti charakteringus agregacijos parametrus.</p> <p>Be agregacijos, kitas svarbus faktorius, kuris labai įtakoja optines organinių medžiagų savybes yra molekulių konformacijos ir jų virsmai. Buvo ištirti pasirinktų organinių darnių konformaciniai virsmai [50, 51, 52], taikant žemadažnio Ramamo ir FTIR spektrometriją ir žemų temperatūrų matricinio izoliavimo eksperimentus. Skurtas originalus spektrinių kontūrų atskirimo metodas taikant vyriausiųjų komponentų analizę [50].</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.37</i> <i>(1.2.5.1)</i></p> <p>Aukštatemperatūrų superlaidininkų, feroelektrinių oksidų sluoksnių laidumo ir triukšmo charakteristikų tyrimai plačiame temperatūriniame intervale</p>	<p>Įgyvendinant šios poveiklės uždavinius buvo atlikti BaTiO₃-CoFe₂O₄ ir BaTiO₃-NiFe₂O₄ kompozitinių keramikų žemo dažnio triukšmo charakteristikų tyrimai temperatūros, artimos šiose medžiagose stebimų fazinių virsmų temperatūrai, srityse. Šiais tyrimais buvo siekiama nustatyti multiferoinėmis savybėmis pasižyminčių medžiagų būdingas žemadažnio triukšmo charakteristikas, atskleisti fizikinius vyksmus vykstančius fazinio virsmo metu.</p> <p>Medžiagos, turinčios ir feroelektrinių, ir feromagnetinių savybių bei pasižyminčios didele dielektrine skvarba, yra aktualios aukštos kokybės rezonatorių, kondensatorių, atminties ir kitų įtaisų gamybai. Įdiegiant naujas medžiagas yra svarbu jas visapusiškai ištirti. Žemo dažnio triukšmo charakteristikų matavimas yra itin jautrus metodas, atskleidžiantis fizikinių vyksmų, vykstančių įvairiose medžiagose, savybes.</p> <p>Nustatyta, kad fazinio virsmo srityje (temperatūros skalėje) yra būdingas atsitiktinis telegrafinis triukšmo signalas. Aštrūs 3-4 atsitiktinio telegrafinio signalo pikai kiekvienai medžiagai stebimi siauruose temperatūros intervaluose. Šios temperatūros vertės yra srityje, kur stebima ir dielektrinės skvarbos anomalija (rodanti, kad vyksta medžiagos persitvarkymas). Iš triukšmo charakteristikų nustatytos būdingosios vyksmų, lemiančių šį atsitiktinį telegrafinį triukšmo signalą, trukmės yra (0,1÷1) ms.</p> <p>Dielektrinės skvarbos maksimumas apima gan plačią temperatūros sritį. Triukšmo charakteristikų tyrimas leido išskirti kelis atskirus fazinio virsmo etapus siauruose temperatūros intervaluose.</p> <p>Nevykstant faziniam virsmui tirtosioms kompozitinėms</p>

	<p>keramikoms būdingas $1/f$ triukšmas yra nulemtas daugelio vyksmų, su plačiai pasiskirsčiusiomis relaksacijos trukmėmis, superpozicijos.</p> <p>Tyrimų rezultatai pristatyti 2 pranešimuose tarptautinėse konferencijose „EcoBalt“ ir „Triukšmų ir fliuktuacijų konferencija“ (J. Matukas, S. Pralgauskaitė, R. Grigalaitis, J. Banys, F. M. M. Alawneh, V. V. Shvartsman, D. C. Lupascu, M. M. Vijatović Petrović, J. D. Bobić, B. D. Stojanović, “Low frequency noise characteristics of BaTiO₃ composites at phase transition”, EcoBalt, Vilnius, 25-27 Oct. 2013; S. Pralgauskaitė, J. Matukas, R. Grigalaitis, J. Banys, I. Zamaraitė, M. M. Vitajovic Petrovic, J. D. Bobic, B. D. Stojanovic, “Low frequency noise characteristics of BaTiO₃-NiFe₂O₄ composites at phase transition”, 23rd Int. Conf. Noise and Fluctuations, Xi’an, China, 2-5 June 2015).</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.38 (1.2.5.2)</p> <p>Optoelektroninių darinių optinių ir elektrinių fliuktuacijų matavimai, spektrinė ir koreliacinė analizė</p>	<p>Plečiantis elektromagnetinės spinduliuotės šaltinių ir detektorių panaudojimo sritims (įvairūs jutikliai, vaizdų kūrimo prietaisai naudojami medicinoje, moksliniuose tyrimuose, saugumo sistemose), didėja ir įsisavinamas spinduliuotės bangos ilgio diapazonas. Tokiems, visus reikalavimus atitinkantiems: jautriems, mažų matmenų, ilgaamžiams, veikiantiems kambario temperatūroje ir kt., optoelektronikos įtaisams kurti naudojamos naujos medžiagos ir nauji dariniai (taip pat ir kvantiniai dariniai). Žemo dažnio (10 Hz – 20 kHz) triukšmo charakteristikų tyrimai pasitarnauja trejopai: atskleidžiant fizikinius vyksmus vykstančius įtaiso darinyje, nustatant užaugintų sluoksnių ir jų paviršių kokybę (kuri įtakoja įtaiso ilgaamžiškumą) ir įvertinant signalo ir triukšmo santykį (kuris yra svarbus detektorių parametras). Triukšmų tyrimų suteikta informacija įgalina tobulinti optoelektronikos įtaisų dizainą ir auginimo technologiją.</p> <p>Atlikti įvairios sandaros GaN, InGaN, AlInGaP skirtingo spinduliuotės bangos ilgio (taip pat ir baltos šviesos) šviesos diodų žemo dažnio triukšmo charakteristikų (optinių ir elektrinių fliuktuacijų bei koreliacijos koeficiento tarp optinio ir elektrinio triukšmų) tyrimai diodams senėjant [36]. Nustatyta, kad šviesos diodams senėjant dėl defektų daugėjimo didėja nuotėkio srovė – šie senėjimo procesai atsispindi elektrinių fliuktuacijų matavimuose ir voltamperinėje charakteristikoje mažos srovės srityje. Nuotėkio srovių įtaka šviesos diodo spinduliuotės charakteristikoje nepastebėta.</p> <p>Ištirtos InGaAs nesimetrinių „peteliškės“ formos diodų, naudojamų kaip spinduliuotės detektoriai terahercinių dažnių srityje, žemo dažnio triukšmo charakteristikos [40]. Nustatyta, kad triukšmų šaltinis šiuose dariniuose yra defektai InAs monosluoksnyje užaugintame InGaAs ir InP pagrindo tarpsluoksnyje, t. y. triukšmo intensyvumą lemia sluoksnių auginimo kokybė.</p> <p>Šratinis triukšmas, pasižymintis „baltu“ spektru, yra neatsiejamas diodinių darinių triukšmo šaltinis ypač svarbus spinduliuotės detektoriams, nes nulemia jų jautrį. Todėl analizuojant detektorių triukšmo charakteristikas yra svarbu</p>

	<p>nustatyti „balto“ triukšmo šaltinius: šiluminis ar šratinis triukšmas yra stebimas. Eksperimentiniai įvairių diodinių darinių triukšmo charakteristikų tyrimai parodė, kad Šotkio ir <i>pn</i> sandūros diodų „balta“ triukšmą galima aprašyti kaip šiluminės netiesinio elemento fliktuacijas. O tunelinių diodų atveju papildomai reikia įskaityti ir šratinį triukšmą [24,41].</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.39 (1.2.5.3)</p> <p>Mikrobangė nanostanatų dielektrinė spektroskopija bangolaidinėse linijose (8GHz-120GHz)</p>	<p>Šios poveiklės tikslas buvo nustatyti dielektrinės dispersijos ypatumus naujai susintetintuose BaSnO₃ ir Ba₂SnO₄ nanostruktūrinėse keramikose. Darbas buvo atliekamas kartu su Chemijos fakulteto Bendrosios ir Neorganinės Chemijos katedros mokslininkais. Pirmiausia buvo iširtos susintetintų keramikų žemadažnės dielektrinės savybės ir nustatyta, kad fazinių virsmų šiose medžiagose nestebima, todėl ir aukštadažniai dielektriniai tyrimai neturi prasmės. Detaliai minėtų medžiagų gamyba bei charakterizavimas aprašyti straipsnyje [20]. Iš ankstesnių tyrimų buvo žinoma, kad Sr₃Sn₂O₇ medžiagose būtų galima dipolinė tvarka, tačiau iki šiol jokių elektrinių tyrimų su jomis nebuvo atlikta. Buvo nuspręsta susintetinti A₃Sn₂O₇ (A = Ca, Sr, Ba) medžiagas ir iširti jų struktūrinės bei dielektrinės savybes. Bandinių milteliai buvo gaminami kietųjų fazių metodu ir sintetinami 1400 °C ir 1500 °C temperatūroje. Gautos keramikos buvo tiriamos pirmiausia žemadažne dielektrine spektroskopija. Paaikšėjo, kad viena iš anomalijų, stebima dielektriniuose Sr₃Sn₂O₇ spektruose veikiausiai susijusi su struktūriniu virsmu 390 K temperatūroje. Kadangi iš teorinių skaičiavimų, atliktų kitų grupių, išplaukia, jog šios medžiagos turėtų būti feroelektrinės, buvo pabandyta stebėti dipolinės poliarizacijos perjungimą. Deja, 120 kV/cm lauko tam neužteko (aukštesnio lauko bandiniai neatlaikė). Tai gali reikšti, jog medžiagos yra polinės, tačiau ne feroelektrinės, bet piroelektrinės. Tai paaikšintų mažą dielektrinės anomalijos vertę bei reikštų, jog mikrobangiai šios medžiagos tyrimai yra netikslingi.</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.40 (1.2.5.4)</p> <p>Nanostanatų dielektinių spektrų spektroskopija, pritaikant ar modifikuojant egzistuojančius teorinius modelius</p>	<p>Projekto vykdymo metu bendradarbiaujant su Chemijos fakulteto Bendrosios ir Neorganinės Chemijos katedros mokslininkais buvo susintetintos BaSnO₃ ir Ba₂SnO₄ nanostruktūrinės keramikos. BaSnO₃ yra plačiatarpis perovskito struktūros puslaidininkis. Yra žinoma, kad ASnO₃ (kur A = Ba, Ca, Sr, ...) gali būti naudojami, kaip įvairių dujų sensoriai, potencialūs elektrinės ir/arba cheminės energijos keitikliai ir pan., todėl buvo įdomu iširti jų elektrinio impedanso savybes, juolab, kad tokių tyrimų nanostruktūriniams BaSnO₃ iki šiol nebuvo atlikta. Ba₂SnO₄ yra tetragoninės struktūros kambario temperatūroje ir ilgai buvo laikomas antrine BaSnO₃ faze, tačiau, ieškant naujų medžiagų ir naujų taikymų, pvz. multiferoikams, imta ieškoti naujų, ne perovskito struktūrų su pagerintomis ar apštamai naujomis savybėmis.</p> <p>Nanometrinių zolių gelių metodu gauti BaSnO₃ ir Ba₂SnO₄ milteliai buvo supresuoti ir sukepinti 800 °C ir 1000°C temperatūroje. Jų elektrinės savybės buvo tirtos HP4284 impedanso matuokliu. Dielektrinių spektrų analizė parodė, kad nė vienoje iš tirtų medžiagų dielektrinių anomalijų nestebėta</p>

	<p>visame matuotame temperatūrų ruože. Abiejų tipų keramikos jautrios aplinkos drėgmei (potencialūs taikymai drėgmės jutikliams). $BaSnO_3$ stebimi du el. krūvio pernašos mechanizmai, o Ba_2SnO_4 – vienas. Buvo nustatyta, kad abiejose medžiagose nuolatinės srovės laidumas yra termiškai aktyvuotas ir apskaičiuotos atskirų procesų aktyvacijos energijos bei aptarta šių laidumo procesų prigimtis. Daugiau informacijos pateikta [20] straipsnyje.</p>
<p>Projekto uždavinys Nr. 3 "Pažangių puslaidininkinių technologijų vystymas bei jų taikymas opto- ir nanoelektronikos proveržio kryptyse"</p>	
<p><i>1.1.1.41</i> <i>(1.3.1.1)</i> GaN kristalinių sluoksnių augimo tyrimai ant Al_2O_3 pagrindo</p>	<p>Šiuo metu cheminio nusodinimo iš metalorganikos garų fazės (MOCVD) GaN auginimo technologija ant Al_2O_3 pagrindo yra komercializuojama pasauliniu mastu. Pagrindinė šios technologijos taikymo sritis yra naujos kartos didelio efektyvumo optoelektroniniai prietaisai. GaN kristalinių sluoksnių auginimo tyrimų poveiklėje buvo tiriami Vilniaus universiteto taikomųjų mokslų institute (VUTMI) stori iki $5\mu m$, MOCVD metodu užauginti kristaliniai sluoksniai. Lygiagrečiai tyrimo metu buvo optimizuojami auginimo parametrai. Galutiniame etape ant Al_2O_3 pagrindo buvo suformuota daugiasluoksnė struktūra, sudaranti optoelektroninį prietaisą šviesos diodą [44] (angl. Light emitting diode LED). Diodo emituojamas bangos ilgio maksimumas buvo mėlynoje srityje ties 424 nm. Tokios kompleksinės struktūros analizei buvo naudojamas skenuojantis elektroninis mikroskopas (SEM), kuriame yra galimybė registruoti elektronų pluoštelio sužadintą srovę (EBIC). Tyrimo metu buvo keičiama elektronų pluoštelio energija nuo 5 iki 20 keV bei jo išsiskverbimo gylio į bandinį. Tokiu būdu buvo registruojami tūriniai defektai, esantys skirtingame bandinio storyje. Gyliu esantys defektai buvo heksagoninės formos, tarpusavyje atskirti terasomis. Buvo nustatyta, kad terasos susidarė formuojant aktyvų šviesos diodo sluoksnį. Esant 5 keV elektronų pluoštelio energijai informacija buvo gauta iš bandinio paviršiaus, kuriame matėsi paviršiaus netolygumai bei dislokacijos. Straipsnyje [44] publikuotas metodas leido neardančios kontrolės metodu tirti daugiasluoksnę optoelektroninio prietaiso ant Al_2O_3 pagrindo struktūrą.</p>
<p><i>1.1.1.42</i> <i>(1.3.1.2)</i> GaN kristalinių sluoksnių augimo tyrimai ant Si pagrindo</p>	<p>Daugumos šiuolaikinių mikroprietaisų pagrindą sudaro silicis. Jis yra pigesnis už tūrinį GaN bei safyrą, todėl GaN technologijos integravimas gaminant silicio mikroschemas sulaukia vis didesnio mokslo visuomenės susidomėjimo. Epitaksinis GaN dangų auginimas ant silicio yra komplikuotas dėl kelių priežasčių: kristalinės gardelės nesutapimo, terminio plėtimosi koeficientų skirtumo bei cheminės reakcijos tarp galio bei silicio. Dėl šių priežasčių atliekant GaN auginimą ant silicio reikalingas tarp sluoksnis. Šioje poveiklėje GaN auginimams ant silicio MOCVD metodu Vilniaus universiteto taikomųjų mokslų institute buvo naudojami amerikiečių kompanijos Translucent Inc. molekulinės epitaksijos būdu suformuoti AlN bei retųjų žemės metalų tarp sluoksniai, tokie kaip Gd_2O_3, Er_2O_3. Atlikus charakterizavimą buvo nustatyta, kad tiek AlN, tiek retųjų žemės metalų tarp sluoksniai gali būti taikomi auginant galio nitridą</p>

	<p>MOCVD metodu [26]. Vėliau panaudojant retuosius žemės metalus buvo suformuotas optinis elementas Bragg veidrodis, kurio maksimalus atspindys yra mėlynoje regimosios šviesos srityje. Ant silicio pagrindo suformuotose šviesos dioduose šis optinis elementas padidintų emituojamos šviesos kiekį, kadangi silicio kryptimi sklindanti šviesa būtų ne sugerta, o atspindėta. Projekto metu gautuose bei publikuotose rezultatuose [37] buvo lyginamos dviejų tipų Bragg veidrodžių struktūros ant silicio. Ant šių struktūrų MOCVD metodu buvo suformuotos GaN dangos. Auginimas buvo atliekamas keliais etapais keičiant temperatūrą. Taikant kompleksinius tyrimų metodus: spektroskopijos, skenuojančios bei prašviečiančios elektroninės mikroskopijos buvo nustatyta, kad Bragg veidrodis, sudarytas iš Er_2O_3 yra stabilus, tačiau veidrodis sudarytas iš Gd_2O_3 degraduoja viršijus 950°C temperatūrą.</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.43</i> <i>(1.3.1.3)</i></p> <p>Kompleksiniai GaN sluoksnių tyrimai siekiant įvertinti jų elektrinę kokybę ir nepusiausvirųjų krūvininkų dinamika</p>	<p>Krūvininkų gyvavimo trukmė yra labai svarbus prietaisuose naudojamų puslaidininkinių medžiagų parametras, kuris nulemia jų kertinius parametrus: pavyzdžiui, veikimo spartą, galią, elektrinį ar optinį efektyvumą. Puslaidininkinių medžiagų augintojams ir prietaisų gamintojams yra itin svarbu nustatyti, kurie technologiniai parametrai nulemia krūvininkų gyvavimo trukmę. Dažnai krūvininkų gyvavimo trukmė gali būti naudojama kaip tiesioginis puslaidininkinių medžiagų defektiškumo rodiklis. Glaudus technologų ir tyrėjų bendradarbiavimas yra raktas į sėkmę kiekvienai besivystančiai puslaidininkinei technologijai.</p> <p>Tiek puslaidininkinių medžiagų augintojams, tiek prietaisų gamintojams yra aktuali informacija apie krūvininkų gyvavimo trukmę visame puslaidininkinės plokštelės plote. Gyvavimo trukmei nustatyti naudojami standartiniai fotoluminescencijos su laikine skyra, laisvakrūvės sugerties ar mikrobangų atsako tyrimų metodai suteikia itin gerą laikinę skyrą (~1 ns) ir erdvinę skiriamąją gebą (~10 μm). Tačiau norint išmatuoti krūvininkų gyvavimo trukmes 2 colių diametro puslaidininkinėje plokštelėje reikėtų skenuoti tašką po taško ir tai užtruktų pakankamai ilgą laiko tarpą. Mes pasiūlėme naujovišką krūvininkų gyvavimo trukmės skenavimo metodą, kai vienu matavimu yra išmatuojamos krūvininkų gyvavimo trukmės dideliame plote (~1×1 cm) su pakankamai gera erdvine skyra (~5 μm) [7]. Naujame metode zonduojantis pluoštelis optinio teleskopo pagalba išplečiamas, o laisvakrūvės sugerties relaksacija registruojama ne standartiniu taškiniu detektoriumi, tačiau panaudojama CCD kamera su elektriškai vėlinamu (100 ps tikslumu) nuskaitymu. Gauti rezultatai leido įvertinti HVPE būdu užauginto GaN sluoksniu kristalinę kokybę, bei pasiūlyti nespindulinės rekombinacijos mechanizmą [7].</p> <p>Taip pat pažangūs optiniai, kontaktų nereikalaujantys ir neardantys tyrimų metodai, tokie kaip dinaminiai difrakcinių gardelių, buvo panaudoti sintetinių deimantų tyrimams [8].</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.44</i> <i>(1.3.1.4)</i></p> <p>Ištirti MOCVD būdu</p>	<p>Vykdamt poveiklę buvo ištirti skirtingo storio (2.4-25.5 μm) MOCVD būdu išauginto GaN bandiniai siekiant nustatyti sluoksnių kristalitinės struktūros kitimus ir dislokacijų tinklo</p>

<p>auginamų GaN sluoksnių kristalitinę struktūrą varijuojant auginimo režimus, siekiant įvertinti pixel-detektoriams tinkamų kristalinių sričių geometrinius matmenis bei foto-elektrines charakteristikas</p>	<p>formavimąsi varijuojant auginimo režimus. Buvo ištirti krūvininkų efektinės gyvavimo trukmės kitimai per nespindulinės rekombinacijos centrus. Aptikta, kad kinetikų forma atspindi medžiagos netvarkumą dėl augimo defektų tinklų susidarymo. Buvo parodyta [19], kad didinant MOCVD epi-GaN sluoksnių storį, medžiagos netvarkumo faktorius mažėja. Taip pat atskleista, kad dėl rekombinacijos ant siūlinių dislokacijų paviršiaus, krūvininkų rekombinacijos trukmės GaN sluoksnyje gali sutrumpėti iki pikosekundinių verčių. Tai darytų GaN medžiagą netinkama pixel-detektorių formavimui. Parodyta, kad suformavus MOCVD epi-GaN sluoksniu, kurių storis yra didesnis už 10 μm, dėl kristalinės struktūros tvarkumo išaugimo, rekombinacijos trukmės pailgėja iki sub-mikrosekundinių verčių, ir tai visiškai priimtina dreifinių detektorių formavimui plonasluoksniuose GaN dariniuose. Taip pat ištirtos spektre išskirtosios fotoluminescencijos kinetikos šiuose GaN dariniuose [19], ir parodyta, kad spindulinės rekombinacijos trukmės ilgėja mažinant sužadinimo intensyvumą. Tai atskleidė galimybę formuoti dvigubos paskirties detektorius, - scintiliatorius bei krūvio surinkimo prietaisus dalelių pixel-detektorių formavimui. Kaip supaprastinta ir pigesnė alternatyva GaN sluoksniams, buvo ištirti CdS-Cu₂S hetero-sandūriniai dariniai [9], kuriuose neiškyla problemos, būdingos GaN elektrodų ir sandūrų formavimui. Parodyta, kad CdS-Cu₂S hetero-sandūrų charakteristikos yra panašios į tokias, išmatuotas MOCVD epi-GaN sluoksniuose, - būdingas polikristalinės struktūros netvarkumas, yra tinkamas elektrinis laidumas ir gana didelis luminescencijos efektyvumas. Šie CdS-Cu₂S hetero-sandūriniai dariniai gali būti suformuoti pigia, santykinai žematemperatūrine (<280 C) cheminio nusodinimo technologija. Atskleista [19], kad CdS-Cu₂S hetero-sandūrinių darinių charakteristikos ženkliai priklauso nuo sluoksnių storio ir kristalinių dimensijų. Išskirtos trijų tipų struktūros, kurių parametrai prognozuojamai kinta, varijuojant technologinį režimą (temperatūrą 220- 260 C intervale, ekspoziciją). Ištirtas vyraujančių defektų spektras [9]. Ištirta MOCVD epi-GaN ir CdS-Cu₂S hetero-sandūrinių darinių esminių elektrinių ir fotoluminescencijos charakteristikų evoliucijos koreliacija apšvitos protonais (in situ) metu [PK1 T.Ceponis, E.Gaubas, J.Pavlov, and A.Tekorius, <i>In situ variations of the scintillation characteristics in GaN and CdS layers under irradiation by 1.6 MeV protons</i>. Material presented at 19th International Conference on Ion Beam Modification of Materials (IBMM), Leuven, Belgium, September 14-19, 2014; Book of IBMM abstracts, PA82, ISBN: 9789082271805-910]. Parodyta [PK1], kad fotoluminescencijos ir elektrinių charakteristikų (laidumo, krūvininkų rekombinacijos parametru) degradacija, didėjant apšvitos skvarbiaisiais (ištirtam sluoksnių storio intervalui) protonais įtėkiui, koreliuoja. Atskleista, kad visgi, GaN medžiagos netvarkumas didėja, augant apšvitos įtėkiui, kai CdS-Cu₂S hetero-sandūrinių darinių tvarkumas didėja. Tai pagrįsta fraktalinės dimensijos kitimais, kai pradžioje itin netvarkus CdS-</p>
--	---

	<p>Cu₂S darinys homogenizuojasi, sukūrus radiacinius defektus, kurie tampa vyraujančiais kanalais spindulinės ir nespindulinės rekombinacijos procesų parametrizavime. MOCVD epi-GaN sluoksniai turi kristalinę struktūrą, kur netvarkumą nulemia tik augimo dislokacijų tinklai. Didinant apšvitos įtekį, augantis radiacinių defektų tankis GaN, veikia sinergiškai didindamas medžiagos netvarkumą. Išnagrinėjus radiacinių defektų in situ evoliuciją buvo įvertinta [PK1] ir defektų susidarymo sparta šiose GaN bei CdS-Cu₂S medžiagose bei krūvininkų porų (kurios ir nulemia pixel-detektorių signalų formavimą) sudarymo hadronais efektyvumas.</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.45 (1.3.1.5)</p> <p>Paruošti elektrodų bei p/n sluoksnių formavimo technologiją sub-mikroninės topologijos detektorių grandynams projektuoti. Išnagrinėti įvairių konfigūracijų (pin, kondensatorinių) Ramo srovės detektavimo įrenginių GaN pagrindu efektyvumą</p>	<p>Buvo iširta barjerinės talpos sandūriniuose CdS–Cu₂S dariniuose kaita [2] varijuojant medžiagos formavimo technologinius režimus, nes kaip parodyta [PK1 T.Ceponis, E.Gaubas, J.Pavlov, and A.Tekorius, <i>In situ variations of the scintillation characteristics in GaN and CdS layers under irradiation by 1.6 MeV protons</i>. Material presented at 19th International Conference on Ion Beam Modification of Materials (IBMM), Leuven, Belgium, September 14-19, 2014; Book of IBMM abstracts, PA82, ISBN: 9789082271805-910], dalelių detektorių degradacijos charakteristikos MOCVD GaN bei CdS–Cu₂S koreliuoja. Buvo parodyta [2], kad barjerinės talpos parametrai ženkliai priklauso nuo technologinių defektų struktūroje. Dėl technologinių apribojimų GaN dariniuose buvo suformuoti kondensatoriniai ir Šotki sandūros detektoriai. Šotki sandūros buvo suformuotos 5 ir 20 μm storio GaN epitaksiniuose sluoksniuose, sudarant terasines struktūras. Buvo iširti Ramo srovių impulsiniai signalai CVD GaN kondensatoriniuose dariniuose ir aptikta ženkli poliarizacinių efektų įtaka. MOCVD GaN epitaksinių sluoksnių Šotki sandūrose aptikta ženkli nuosekliosios varžos įtaka, kuri pasireiškia dėl sluoksnio nevienalytiškumo gylyje. Atskleisti Šotki, pin bei kondensatorinių detektorių charakteristikų ypatumai bei jų degradacija apšvitų metu [PK1] iškėlė uždavinį didinti krūvio surinkimo efektyvumą tokiuose detektoriuose, siekiant projektuoti sub-mikroninės topologijos detektorių grandynus. Tuo tikslu buvo išnagrinėtos vidinio stiprinimo, pasitelkiant smūginės jonizacijos inicijuotus lavininius procesus, galimybes. Buvo sumodeliuotos detektorių su vidiniu stiprinimu impulsinės atsako charakteristikos difuzijos-dreifo ir dinaminio Ramo srovių modelio artiniuose [PK2 E.Gaubas, T.Ceponis, J.Pavlov, and J.Vysniauskas, <i>Operation characteristics and radiation damage of particle detectors based on GaN</i>. Material presented at 19th International Conference on Ion Beam Modification of Materials (IBMM), Leuven, Belgium, September 14-19, 2014; Book of IBMM abstracts, PA83, ISBN: 9789082271805-910]. Parodyta [PK2], kad vidinį stiprinimą detektoriuose galima valdyti plačiame intervale, keičiant pridėtą įtampą ir varijuojant sluoksnių storį. Efektyvus vidinis stiprinimas galimas [PK2] sub-mikroninės (<300 nm) topologijos sluoksniniuose sandūriniuose dariniuose. Vystomi tokių sluoksnių formavimo technologiniai būdai, gauti</p>

<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.46</i> <i>(1.3.2.1)</i></p> <p style="text-align: center;">Rekombinacijos mechanizmų tyrimas ZnSe kristaluose, legiruotuose telūru ir deguonimi siekiant susieti kristaluose vykstančius rekombinacijos procesus su svarbiausiomis scintiliacinių detektorių savybėmis: liuminescencijos našumu, gesimo trukme ir pošvyčio lygiu</p>	<p>preliminarūs pozityvūs rezultatai.</p> <p>ZnSe scintiliaciniai kristalai, izoelektriškai legiruoti telūru [ZnSe(Te)], panaudojami beta dalelių ir vidutinių energijų gama spinduliuotės detektoriuose, Rentgeno spindulių introskopijoje, tomografijoje. Siekiant detaliau iširti izoelektriškai legiruoto ZnSe savybės buvo užauginti kristalai, legiruoti deguonimi ir aliuminiu [ZnSe(O,Al)] ir jų savybės palygintos su ZnSe(Te) kristalų savybėmis. Bandinių liuminescencija žadinta lazerine ir Rentgeno spinduliuote. Buvo pademonstruota, kad į lydalą įterpus Al₂O₃ susiformuoja su deguonimi susijusios donorų ir akseptorių poros (DAP), kurios veikia kaip spindulinės rekombinacijos centrai, o jų tankis net viršija su telūru susijusių DAP tankį ZnSe(Te) kristale, esant tokiam pačiam legiravimo lygiui.</p> <p>ZnSe(O,Al) fotoluminescencijos intensyvumas, esant tomis pačiomis žadinimo sąlygomis, buvo didesnis nei ZnSe(Te) kristale, tačiau žadinant Rentgeno spinduliais ZnSe(O,Al) liuminescencijos intensyvumas buvo mažesnis nei ZnSe(Te). Tai paaiškinta šviesos sugerties skirtumais šiuose kristaluose ir sužadintų krūvininkų persiskirstymu tarp rekombinacijos procesų. Nustatyta, kad ZnSe(O,Al) kristalo kvantinė išeiga yra mažesnė nei ZnSe(Te). Kadangi Al₂O₃ įterpimas į lydalą suformuoja didelį spindulinės rekombinacijos DAP tankį, mažą kvantinę išeigą sukuria stipri nespindulinė rekombinacija. Šie rezultatai yra naudingi optimizuojant auginimo ir iškaitinimo metodus, siekiant sumažinti nespindulinių rekombinacijos centrų tankį kristaluose. Rezultatai apibendrinti straipsnyje [52].</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.47</i> <i>(1.3.2.2)</i></p> <p style="text-align: center;">Priemaišinės liuminescencijos juostos savybių tyrimai scinti- liaciniuose ZnSe bandiniuose, papildomai legiruotuose retųjų žemių elementais, siekiant išsiaiškinti galimybę keisti ZnSe kristalų liuminescencijos gesimo spartą ir pošvyčio lygį papildomai įvedant retųjų žemių elementus</p>	<p>Šioje poveiklėje tirti ZnSe kristalai, legiruoti deguonimi ir aliuminiu [ZnSe(O,Al)], ir jų optinės savybės palygintos su kristalų, legiruotų telūru, [ZnSe(Te)] savybėmis. Bandinių liuminescencija žadinta nuostovios veikos ir impulsine lazerine spinduliuote temperatūrų intervale tarp 8 ir 300 K. Žemose temperatūrose pastebėta, kad ZnSe(O,Al) ir ZnSe(Te) kristalų priemaišinę fotoluminescencijos (FL) juostą sudaro dvi pajuostės. Stebėtas didelis žemų energijų pajuostės intensyvumo sustiprėjimas keliant temperatūrą. Eksperimentiškai matuotų FL intensyvumo gesimo kinetikų tapatinimas su apskaičiuotomis donorų ir akseptorių porų rekombinacijos kinetikomis parodė padidėjusį rekombinacijos centrų tankį, kuris atsakingas už žemų energijų pajuostės intensyvumo sustiprėjimą. Šios pajuostės intensyvumo temperatūrinis sustiprinimas paaiškintas krūvininkų išlaisvinimu iš pagavos centrų, kurių yra gausu ZnSe(O,Al) kristale dėl didelės aliuminio priemaišų koncentracijos. Šis tyrimas parodė, kad iškaitinti ZnSe(O,Al) monokristalai kambario temperatūroje yra efektyvūs ir spartūs scintiliatoriai. Rezultatai pristatyti tarptautinėje konferencijoje (D. Ševčenko. Study of defect-related luminescence in ZnSe scintillation crystals co-doped with oxygen and aluminium // 16th International Workshop on Radiation Imaging Detectors, 2014.06.22-27, Triestas, Italija). Rezultatai apibendrinti straipsnyje [51].</p>
<p style="text-align: center;"><i>1.1.1.48</i></p>	<p>Šioje poveiklėje tirti perspektyvūs liuminoforai, naudojami</p>

<p>(1.3.2.3) Naujų liuminoforų charakterizavimas</p>	<p>jonizuojančios spinduliuotės detektoriuose [Ce legiruoti Lu_2SiO (LSO:Ce), Ce legiruoti $\text{Lu}_{2x}\text{Gd}_{2-x}\text{SiO}$ (LGSO:Ce), PbWO_4 (PWO)] ir šviestukuose [$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (InGaN)].</p> <p>Panaudojant konfokalinę spektroskopiją buvo ištirti LSO:Ce ir LGSO:Ce kristalų fotoluminescencijos (FL) parametrų erdviniai pasiskirstymai. LGSO:Ce kristaluose aptikti 1-3 μm diametro erdviniai netolygumai, kuriuose FL juostos padėtis pakitusi. Spektrinė analizė parodė, kad šį pokytį lemia pajuostės ties 500-700 nm persiskirstymas, kuris siejamas su Ce^{3+} katijonų erdvinio pasiskirstymu gardelėje. Šie rezultatai parodo, kad kristale egzistuoja Lu/Gd santykio svyravimai, kurie gali paveikti krūvininkų rekombinaciją ir todėl į tai turėtų būti atsižvelgta gaminant šiuos scintiliatorius. Rezultatai pristatyti tarptautinėje konferencijoje (D. Dobrovolskas, G. Tamulaitis, V.V. Kononets, N. Starzhinskiy, O. Ts. Sidletskiy, K. Lebbou. Spatial inhomogeneity of luminescence in LGSO:Ce scintillator crystals // International Conference on Optical, Optoelectronic and Photonic Materials and Applications, 2014.07.27 – 2014.08.01, Lydsas, Didžioji Britanija). Rezultatai apibendrinti straipsniuose [53, 56].</p> <p>Tęsiant LGSO:Ce tyrimus, iš šios medžiagos buvo užauginti skaiduliniai kristalai mikroštempimo iš lydinio budu (angl. <i>micro-pulling down technique</i>, μ-PD). Nustatyta, kad Gd ir Ce pasiskirstymo koeficientai yra 0,61–0,68 ir 0,35–0,41, atitinkamai. Iš serijos tirtų bandinių nustatyta, kad didžiausia šviesos išeiga ir mažiausias pošvytis yra 1% Ce^{3+} koncentracijos bandiniuose. μ-PD budu užaugintų bandinių pošvytis buvo 4 kartus geresnis nei bandinių, užaugintų tradiciniu Čiochralskio metodu. Konfokalinės spektroskopijos matavimai parodė, kad Gd^{3+} ir Ce^{3+} kaupiasi inkliuzijose, kurios išsidėstę skaidulų pakraščiuose. Šios inkliuzijos formuoja iškraipytas plokštumas, kurios daugiausiai nukreiptos išilgai kristalo augimo krypties. Parodyta, kad padidėjusi Gd^{3+} ir Ce^{3+} koncentracija gali sukelti kristalo įtrūkimus. Rezultatai apibendrinti straipsnyje [55].</p> <p>Siekiant surasti itin sparčių reiškinų, greitesnių nei 10 ps, kurie galėtų būti pritaikomi jonizuojančios spinduliuotės detektoriuose, ištirta dvifotonė sugertis PWO kristaluose, panaudojant žadinimo ir zondavimo metodiką. Pademonstruota, kad žadinimo spindulio sukelta sugertis laiko skalėje turi sparčias pradinę ir galinę dalis. Stebėta tiesinė zondo sugerties priklausomybė nuo žadinimo impulso energijos tankio patvirtino, kad indukuota sugertis yra dvifotonė. Rezultatai pristatyti tarptautinėje konferencijoje (G. Tamulaitis, S. Nargelas, A. Vaitkevičius, E. Auffrey, M. Korjik, O. Baganov, A. Fedorov, S. Tikhomirov, O. Sidletskiy. Two Photon Absorption in Scintillating Crystals as a Prospective Process for Timing Measurements in Ultrafast Ionizing Radiation Detectors // 13th International Conference on Inorganic Scintillators and their Applications (SCINT 2015), 2015.06.07-12, Berklis, JAV).</p> <p>InGaN/GaN kvantinių duobių (KD) tyrimas parodė, kad FL juosta pasislenka į aukštesnių energijų pusę ir FL intensyvumas</p>
--	--

	<p>padidėja srityse, apsuptose kilpinių defektų (angl. <i>trench defects</i>). Stebėti FL savybių pokyčiai priskirti konkurencijai tarp gardelės įtempimo relaksacijos sukeltų efektų ir KD pločio padidėjimo viduje kilpinio defekto. Parodyta, kad pagrindinis faktorius nulemiantis, kuris efektas dominuos, yra KD plotis. Rezultatai apibendrinti straipsnyje [54].</p>
<p>1.1.1.49 (1.3.3.1) Plėtoti organinių šviestukų (OLED) technologijas liejimo inertinėje atmosferoje bei garinimo būdais</p>	<p>Parodyta, kad naudojant kombinuotą plonų organinių sluoksnių garinimo vakuume ir organinių sluoksnių liejimo sukant (<i>spin-coating</i>) būdus, galima suformuoti daugiasluoksnius organinių šviesos diodų (OLED) darinius. Pagaminta keletas ITO/TPD/Ir(Fppy)3/RQD/AIQ3/LiF/Al/Ag darinių, kuriuose buvo įterpti skirtingos koncentracijos (20 mg/mL, 10 mg/mL, 5 mg/mL) CdS_xSe_{1-x}/ZnS kvantinių taškų pasluoksniai (B. Lenkevičiūtė, M. Vitkus, K. Arlauskas, K. Genevičius. Investigation of electroluminescence features of vacuum deposited organic materials TPD, Ir(Fppy)3, AIQ3 and spin-coated CdS_xSe_{1-x}/ZnS quantum dots layers // Nanotechnology: research and development: conference book, 2014.05.15 16, Vilnius, Lietuva.). Eksperimentiniai šių OLED spektrų tyrimai parodė, kad elektroluminescencijos (EL) spektras ir intensyvumas priklauso nuo kvantinių taškų koncentracijos. Gauta, kad EL intensyvumas yra didžiausias, kai kvantinių taškų koncentracija liejant jų sluoksnį buvo 5 mg/mL. OLED su 5 mg/mL kvantinių taškų koncentracija EL slenkstis buvo žemiausias (4,8 V). Taip pat parodyta, kad toks OLED spinduliuoja 420 – 750 nm srityje, t.y. OLED EL spektras yra artimas baltos šviesos spektrui.</p>
<p>1.1.1.50 (1.3.3.2) OLED struktūrų charakterizavimas ir optimizavimas</p>	<p>Susintetinta serija benzo- ir naftoquinolinų medžiagų su skirtingomis papildomomis grupėmis (chloriniais, tetrazolais, iminofosforanais ir aminais). Naudojant fotoelektronų emisijos ore spektrų, šviesos sugerties bei fotoluminescencijos tyrimų metodus ištirta šių spektrų pokyčiai keičiant šių medžiagų cheminę formulę. Išmatuotos HOMO, LUMO bei optinės sugerties energijos vertės, ir parodyta, kad HOMO lygmens energija kito (-5,9) – (-5,5) eV ribose, LUMO – (-3,6) – (-3,0 eV), optinės sugerties energija kito 2 – 2,8 eV ribose. Daugelis tirtų medžiagų demonstravo didelį fotoluminescencijos efektyvumą, kuris siekė 49 %. Parodyta, kad sluoksnių, pagamintų terminio garinimo vakuume būdu, fluorescencijos maksimumai kito 477 – 596 nm ribose, kai tuo tarpu sluoksnių pagamintų liejant šių medžiagų chloroformo tirpalus fluorescencijos maksimumų vertės kito siauresnėje srityje (471 – 537 nm). Taip pat pagamintos organinių šviesos diodų (OLED) sandaros ir parodyta, kad šios medžiagos leidžia pagaminti efektyviai elektroluminescuojančius OLED, kurių spinduliuojamos šviesos spektrą galima valdyti plačiame šviesos bangų ilgių intervale (J. Diršytė, S. Višniakova, I. Urbanavičiūtė, B. Lenkevičiūtė, K. Arlauskas, A. Žilinskas. Synthesis of 1,8-naphthyridine compounds fused with bicyclic moieties //</p>

	<p>Balticum organicum syntheticum (BOS 2014): 8th biennial international conference on organic synthesis, 2014.07.06-09, Vilnius, Lietuva, I. Urbanavičiūtė, B. Lenkevičiūtė, K. Arlauskas, J. Dirsytė, S. Višniakova, A. Žilinskas. Luminescent 2-aminoquinolin-3-carbaldehydes: synthesis and investigation of electric, photoelectric and optical properties // Homeric Fall School at Bordeaux, 2014.10.10-14, Bordo, Prancūzija.).</p>
<p><i>1.1.1.51</i> <i>(1.3.4.1)</i> Organinių sluoksnių bei amorfinio silicio darinių gamybos technologijos tobulinimas</p>	<p>Naudojant trijų elektrodų cheminio garų nusodinimo rusenančiame išlydyje įrenginį (CVD) paruošta silicio nitrido (SiN_x) sluoksnių auginimo technologija. Parodyta, kad keičiant dujų N_2/SiH_4 santykį darbinėje CVD, galima keisti SiN_x optinės sugerties tarpą 1,85 – 5,15 eV ribose.</p>
<p><i>1.1.1.52</i> <i>(1.3.4.2)</i> Gautų darinių optinių savybių ir krūvininkų pernašos bei rekombinacijos ypatumų tyrimas</p>	<p>Be to parodyta, kad sluoksnių formavimo greitis įtakoja sluoksnių paviršiaus lygumą bei pramušimo įtampą (T. Grigaitis, K. Arlauskas. Optical, electrical and morphological properties of Silicon nitride ($\text{SiN}_x\text{:H}$) grown on different surfaces // EMRS Spring meeting, 2013.05.27-31, Strasburgh France.). Naudojant šį CVD įrenginį suformuota 7,5 periodo nanometrinių storių a-Si:H/SiN_x supergardelė. Parodyta, kad suformuota sandara, prijungus išorinį elektrinį lauką, elektroluminescuoja (EL). Elektroluminescencijos spektrą sudaro dvi smailės, iš kurių 700 nm smailė atitinka krūvininkų spindulinę rekombinaciją a-Si:H subsluoksnyje (storis 1, 2, 3 nm), o EL smailė ties 560 nm atsiranda dėl krūvininkų rekombinacijos per defektus a-Si:H/SiN_x tarpsluoksniuose.</p>
<p><i>1.1.1.53</i> <i>(1.3.5.1)</i> ZnO nanostruktūrizuotų sluoksnių žematemperatūrio auginimo technologijos plėtojimas</p>	<p>Cinko oksido (ZnO) nanovamzdelių auginimas iš tirpalo žemoje temperatūroje yra pigus, paprastas ir efektyvumas metodas gauti didelio paviršiaus ploto nanostruktūruotus sluoksnius auginant ant beveik betkokio padėklo. Metodo privalumas yra tame, jog auginama ant padėklo, ant kurio jau yra ZnO užuomazgų, tad ZnO nanovamzdeliai auga kryptingai, formuodami tolygius nanovamzdelių sluoksnius. Nanovamzdelių aukštis ir storis kontroliuojami keičiant reagentų koncentraciją ir auginimo laiką. Buvo atlikti nuoseklūs ZnO nanovamzdelių struktūrinių parametrų priklausomybės bei optinių savybių nuo auginimo sąlygų tyrimai. Buvo nustatyta, jog vidutinis nanovamzdelių skersmuo didėja nuo maždaug 60 nm auginant 3h iki maždaug 100 nm auginus 7h, nors nanovamzdeliai nustoja storėti jau po maždaug 5 valandų auginimo. Reagentų koncentracijos pokyčiai kiek stipriau keičia ZnO nanovamzdelių vidutinį storį – koncentracijai padidėjus nuo 0.05 M/l iki 0,175 M/l vidutinis skersmuo išaugo nuo 50 nm iki 300 nm. Vidutinis nanovamzdelių aukštis kiek mažiau priklausė nuo auginimo sąlygų ir siekė maždaug 2-2,5 μm. Šių ZnO nanovamzdelių draustinių energijų tarpas siekė apie 3,27 eV ir mažai kito keičiantis auginimo sąlygoms. Liuminescencijos spektre stebėtos dvi juostos – laisvųjų eksitonų rekombinacijos (ties 3,18 eV) bei žalioji defektinių būsenų ties 2,33 eV. Šių liuminescencijos juostų padėtys spektre beveik nekito keičiantis auginimo sąlygoms, tačiau intensyvumas gerokai kito. Didėjant nanovamzdelių skersmeniui, mažėja paviršinių būsenų, kurios</p>

	<p>veikia kaip defektai, įtaka, tad laisvų eksitonų liuminescencijos intensyvumas auga sparčiau, nei defektų liuminescencijos. Tačiau pakartojus matavimus aukštų sužadinių sąlygomis, kuomet defektų būsenos užpildytos fotogeneruotais krūvininkais, matoma, jog didžiausias krašto liuminescencijos intensyvumas yra esant 100 – 150 nm vidutiniam nanovamzdelių storiui. Nanovamzdelių storiui didėjant jie pradeda suaugti formuodami vientisus sluoksnius, dėl ko, tikėtina, formuojasi papildomos defektų būsenos. Šie nanovamzdeliai tarnavo kaip aktyvus padėklas fotojautriems organiniams ir biologiniams sluoksniams.</p> <p>Rezultatai pristatyti konferencijose: S. Juršėnas, L. Skardziute, J. Bucevicius, J. Dodonova, J. Jovaisaitė, K. Kazlauskas, S. Tumkevicius. Tuning of Optical properties of Pyrrolo Pyrimidine D-pi-A-pi-D derivatives // 13th European Conference on Molecular Electronics ECME 2015, 2015.08.31–2015.09.06, Starsburas, Prancūzija ir A. Miasojedovas, L. Skardziute, J. Jovaisaitė, T. Buciunas, J. Dodonova, S. Tumkevicius, S. Jursenas. Tuning of the photophysical properties of pyrimidine and pyrrolo[2,3-D]pyrimidine core based derivatives and their applications for fluorescence sensing // The 4th International Conference on the Physics of Optical Materials and Devices (ICOM2015), 2015.08.31–2015.09.04, Budva, Montenegro.</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.54 (1.3.5.2) Hibridinių orhaninių- neorganinių darinių technologijų plėtojimas. Hibridinių darinių morfologinių ir fotofizikinių savybių tyrimai</p>	<p>Nanostruktūruotieji cinko oksido (ZnO) sluoksniai yra aktyviai naudojami maisto ir aplinkos saugos priemonėse kaip antibakteriniai šviesa aktyvuotieji paviršiai. Antibakterinių ZnO savybių tyrimams mes pritaikėme žematemperatūrinį ZnO auginimo būdą auginant iš tirpalo ant lanksčių plastiko paviršių bei kontroliuojant nanovamzdelių skersmenį. Buvo pasirinktos <i>Enterococcus faecalis</i>, <i>Listeria monocytogenes</i> bei <i>Escherichia coli</i> bakterijos. Panaudojus 1.1.1.54 poveiklės rezultatus, buvo pasirinktos optimalios nanovamzdelių auginimo sąlygos – 5 valandos 70 °C temperatūros tirpale esant 0,1 M/l reagentų koncentracijai. Išaugę nanovamzdeliai yra maždaug 100 nm skersmens. Optinių savybių analizė parodė, jog nanovamzdelių draustinių energijų tarpas yra maždaug 3,25 eV, o liuminescencijos juostos maksimumas stebimas ties 3,28 eV. Paviršių antibakterinės savybės buvo tirtos naudojant violetinės spalvos (405 nm) šviestukus. Violetinės spalvos šviesos kvantų energija mažesnė, nei ZnO draustinių energijų tarpas, tačiau ZnO turi seklių nespindulinių defektų lygmenų, kurie gali būti sužadinami 405 nm bangos ilgio šviesa. Šie defektuose fotogeneruoti ZnO eksitonai vėliau dalyvauja fotokatalitinėse reakcijose, generuojančiose reaktyviuosius deguonies darinius, pažeidžiančius bakterijų sienelės ir efektyviai jas naikinančius. Tyrimai parodė, jog antibakteriniai nanostruktūruotieji ZnO sluoksniai yra ypatingai efektyvūs. <i>Enterococcus faecalis</i> bakterijų, užaugintų ant antibakterinio paviršiaus, kiekis, apšvietus 405 nm violetine šviesa, sumažėjo dviem eilėmis, o <i>Listeria monocytogenes</i> ir <i>Escherichia coli</i> – net keturiomis eilėmis. Tamsoje jokių bakterijų skaičiaus pokyčių nepastebėta.</p>

	<p>Minėti ZnO nanopaviršiai galėtų būti sėkmingai taikomi pigioms bei greitoms vandens valymo technologijos. Publikacija baigiama ruošti.</p> <p>Taip pat buvo atlikti organinių sistemų fotofizikinių savybių tyrimai, siekiant surasti tinkamas sistemas šviečiančioms hibridinėms struktūroms su cinko oksidu. Tokie hibridiniai dariniai yra perspektyvus baltų šviestukų taikymams, kuomet panaudojama tamsiai mėlyna ZnO bei žalia organinio spinduolio fluorescencija. Tam tikslui buvo iširtos kelios serijos antraceno ir pirimidino junginių, siekiant parinkti tinkamus pakaitus, išplečiančius konjugaciją. Buvo parodyta, kaip nespindulinės rekombinacijos sparta antraceno dariniuose priklauso nuo skirtingų pakaitų 9 bei 10-tose padėtyse. Parodyta, jos masyvių fragmentų įvedimas išplečia konjugaciją, tačiau kartu paspartina ir interkombinacinę konversiją, kas lemia sumažėjusį fluorescencijos kvantinį našumą. Polinių pirimidino darinių fluorescencija buvo stebėta žaliajame spektro ruože su aukštu fluorescencijos kvantiniu našumu (iki 75%). Pirimidino ir ZnO hibridinės sistemos parodė labiau išplėsto spektro spinduliuotę, kuri nors ir mažesnio našumo yra perspektyvi baltos šviesos hibridiniams šviestukams.</p> <p>Tyrimų rezultatai pristatyti konferencijose: T. Serevičius, R. Komskis, P. Adomėnas, O. Adomėnienė, R. Rimkus, V. Jankauskas, A. Gruodis, K. Kazlauskas, A. Miasojedovas, S. Juršėnas, V. Jankus, A. Monkman. 2, 9, 10 substituted anthracene derivatives as blue fluorescent emitters // "Optical Probes 2013", 2013.07.13-19, Durham, Didžioji Britanija ir L. Skardžiūtė, J. Jovaišaitė, J. Bucevičius, J. Dodonova, S. Tumkevičius, S. Juršėnas. Impact of polar substituents on the photophysical properties of novel pyrimidine based compounds // Electronic Processes in Organic Materials, 2014.05.04-09, Barga, Italija.</p>
<p style="text-align: center;">1.1.1.55 (1.3.5.3) Organinių- neorganinių funkcinių darinių technologijų plėtra, jutiklių formavimas ir tyrimai</p>	<p>Organinės elektroaktyvios molekulės, turinčios donoro ir akceptoriaus pakaitus, tampa vis svarbesnės optoelektronikos prietaisų taikymuose, pavyzdžiui, organiniuose šviesos dioduose, saulės elementuose ar jutikliuose. Susintetinti nauji naftalimidų dariniai su trifenilamino pakaitais, atlikus preliminarinius liuminescencijos tyrimus, pademonstravo fluorescencijos spektro slinkimąsi į raudonąją pusę, didinant molekulių koncentraciją polistireno plėvelėse. Ryškus spektro poslinkis (apie 90 nm) leido panaudoti šiuos junginius temperatūros jutiklio formavimui. 24 val. 200°C temperatūroje atkaitinta plėvelė pademonstravo spektro mėlynąjį poslinkį per 35 nm. Šie rezultatai taip pat atveria multispalvio šviestuko formavimo galimybes išnaudojant kietojo kūno solvatacijos reiškinius. Gauti rezultatai buvo pristatyti konferencijose (A. Miasojedovas, S. Juršėnas, D. Gudeika, A. Michalevičiūtė, R. Lygaitis, S. Grigalevičius, J. V. Gražulevičius. Fluorescence properties and sensing ability of naphthalimide derivatives // International Meeting on Molecular Electronics (ElecMol12), 2012.12.03-07, Grenoblis, Prancūzija; S. Jursenas, A. Miasojedovas, K. Kazlauskas, A. Gruodis, M. Jakucionis, R.</p>

Skaisgiris, D. Gudeika, J. V. Grazulevicius, „Tuning the Optical Properties of Dipolar Derivatives of 1,8-Naphthalimide: Effects of the Substituents and the Environment”, HongKong, 14-19 June, 2015).

Bendradarbiaujant su VU Chemijos fakulteto Organinės chemijos katedra susintetintas naujas akceptorinį pirimidino kamieną ir donorinį dimetilamino pakaitą turintis junginys, tinkantis fluorescenciniam metalų jonų atpažinimui. Šis atrinktas iš daugelio panašių donor-akceptorinių sistemų junginys tiko fluorescencinių jutiklių kūrimui. Šio junginio praskiestųjų tirpalų be metalų jonų fluorescencijos našumas prastas ($\Phi_F = 4\%$), o gyvsidabrio jonų aplinkoje pastebimas stiprus fluorescencijos spektro mėlynasis poslinkis ir intensyvumo augimas (iki 145 kartų). Paprastai junginiams su fenil-dimetilamino fragmentais yra būdinga dviguboji fluorescencija, sąlygojama vidumolekulinės sąsukos indukuotos krūvio pernašos reakcijos (TICT). Gyvsidabrio jonai riboja vidumolekulinę sąsuką, todėl pastebimai auga plokščiai molekulės konfigūracijai būdinga lokalaus sužadavimo fluorescencijos juostos intensyvumas. Panašus efektas pastebėtas ir geležies jonams, tačiau fluorescencijos intensyvumas auga pastebimai mažiau (iki 50 kartų). Atlikti fluorescencijos pokyčių tyrimai su įvairiais kitų metalų jonais parodė, kad pirimidino darinio su dimetilamino fragmentu fluorescencinis jutimas selektyvus tik gyvsidabrio ir geležies jonams. Fluorescencijos spalvos pokytis yra lengvai pastebimas akimi, taigi toks efektas yra itin palankus junginio taikymui fluorescenciniuose metalų jutikliuose. Gauti rezultatai buvo pristatyti konferencijoje (A. Miasojedovas, L. Skardziute, J. Jovaisaitė, T. Buciusas, J. Dodonova, S. Tumkevicius, S. Jursenas. Tuning of the photophysical properties of pyrimidine and pyrrolo[2,3-D]pyrimidine core based derivatives and their applications for fluorescence sensing // The 4th International Conference on the Physics of Optical Materials and Devices (ICOM2015), 2015.08.31–2015.09.04, Budva, Montenegro).

Bendradarbiaujant TMI MOCVD auginimo grupei, kartu su Fotoelektrinių tyrimų grupe ir Liuminiscencijos tyrimų grupe, buvo kuriamas puslaidininkinis sunkiųjų dalelių detektorius. GaN yra intensyviai plėtojamas optoelektronikoje ir didelės galios prietaisuose. GaN yra perspektyvi medžiaga sunkiųjų dalelių detektavimui greitintuvuose. MOCVD metodu užauginti skirtingo storio GaN epitaksiniai sluoksniai buvo ištirti, norint paaiškinti paviršinės rekombinacijos vaidmenį, atskiriant spindulinės ir nespindulinės rekombinacijos įtaką bei netvarkos faktorius. Žadinant ultravioletiniu lazeriu (354 nm, 500 ps), vienu metu buvo nuskaitomi fotolaidumas, zondojuojant mikrobangomis, (MW-PC) bei fotoluminescencijos kinetikos skirtingose spektro vietose. Nustatyta, kad ultravioletinė (UV-PL) juosta auga didinant žadinimo tankį, kol mėlynosios (B-PL) juostos intensyvumas išlieka nepakitęs. Tačiau geltonosios (Y-PL) juostos intensyvumas didėja mažėjant sužadavimo tankiui. MW-PC duomenų analizė leido atskirti krūvininkų gesimo

	komponentus susijusius su krūvininkų gesimu mikrokristaluose ir netvarkiose struktūrose. Tyrimo rezultatai publikuoti darbe [19].
--	---

5. MTEP (MTTP) projekto veiklos įgyvendinimo fiziniai rodikliai

Eil. Nr.	Rodiklio pavadinimas	Numatyta pasiekti, vnt.	Pasiekta, vnt.			
			2012 metais	2013 metais	2014 metais	2015 metais
1.	Moksliniai straipsniai	37	1	25	39	24
2.	Pranešimai konferencijose	38	2	12	21	9
3.	Projekta vykdyžiusios grupės dydis	73	65	76	75	71

Lentelėje nurodomi visi MTEP (MTTP) projekto veiklos įgyvendinimo fiziniai rodikliai, numatyti projekto finansavimo ir administravimo sutartyje, bei kiti galimi rodikliai (pažymėjus, kad tai papildomi rodikliai).

6. Priedai

1. Mokslinių publikacijų sąrašas, 7 lapai;
2. Pranešimų konferencijose sąrašas, 4 lapai;
3. Mokslinės publikacijos su pasiekto produkto kortelėmis, 89 publikacijos.

(Projekto vykdytojo arba jo įgalioto atstovo pareigų pavadinimas)

(Parašas)

(Vardas ir pavardė)
