

## APLINKĄ TAUSOJANTI ENERGETIKA IR APLINKOSAUGOS TECHNOLOGIJOS

**1. Programos vykdytojas** – Valstybinis mokslinių tyrimų instituto Fizinių ir technologijos mokslų centras (toliau – FTMC).

Norminiai etatai skirti programai – 60.

### **2. Programos tikslai:**

2.1. Vystyti naujas technologijas branduolinės energetikos saugumo gerinimo bei radioaktyviųjų atliekų tvarkymo kryptyse.

2.2. Ugdyti mokslinę kompetenciją aplinkos fizikos ir chemijos, naujų medžiagų technologijų, aplinkos užterštumo bei klimato kaitos tyrimų srityse.

2.3. Tirti pramonės, transporto ir energetikos sektorių įtaką tvariai aplinkai, plėtoti aplinkos kokybės vertinimo principus, priemones ir technologijas. Kurti inovatyvias, aplinkos pokyčius detektuojančių prietaisų technologijas bei prototipus, diegti juos Lietuvos aukštųjų technologijų įmonėse.

### **3. Programos uždaviniai:**

3.1. Aplinkos taršos mažinimas, pavojingų ir radioaktyviųjų atliekų tvarkymo technologijų, nuo charakterizavimo iki galutinio sutvarkymo, mokslinių pagrindų sukūrimas bei technologijų plėtra, ypatingą dėmesį skiriant Ignalinos AE eksploatavimo nutraukimo problemų sprendimui.

3.2. Radioaktyviųjų atliekų perdirbimo technologijų mokslinis pagrindimas siekiant sumažinti atliekų pavojingumą ir tūrį (atliekų homogenizavimas ir pavojingiausių radionuklidų pašalinimas);

3.3. Pavojingų ir radioaktyviųjų atliekų pakuočių ir atliekynų inžinerinių barjerų degradavimo teorinis ir eksperimentinis tyrimas;

3.4. Plėtoti naujas technologijas, skirtas mikrobangų detekcijai ir priemonėms, eliminuojančioms jų poveikį, ir šių tyrimų pagrindų kurti modernius prietaisus bei praktinio pritaikymo metodus ir priemones, kuriančias prielaidas tvariai aplinkai;

3.5. Kurti integruotas autonominio veikimo lankų komponentų detekcijos priemones, tirti ir tobulinti jų veikimo principus bei metodus, pritaikyti jas aplinkos poveikį detektuojančioms sistemoms bei integruoti į saugios aplinkos pokyčius stebinčius prietaisus arba jų modulius;

3.6. Vystyti aplinkos būklės kaitos dėl energetikos, įskaitant biomasės ir atliekų naudojimą, sektoriaus veiklų vertinimo metodus ir diegti aerozolio technologijas, kuriant ir tobulinant patalpų mikroklimato kokybės vertinimo prietaisus bei vystant aplinką tausojančią energetiką;

3.7. Plėtoti branduolinės spektroskopijos metodus bei diegti plonasluoksnes ir didelių energijų jonų pluoštelių technologijas pramonėje ir aplinkotyroje;

3.8. Plėtoti masių spektrometrijos metodus medžiagotyroje, biologijoje ir aplinkotyroje. Atmosferos mikropriemaišų cheminės ir izotopinės sudėties tyrimų taikymas bei naujų technologijų ir metodikų kūrimas, tiriant fizikinius ir cheminius vyksmus atmosferoje, veikiančius klimato kaitą ir žmogui artimą aplinką.

### **4. Metodologinis tyrimų pagrindimas:**

Programą vykdys kvalifikuoti mokslininkai kompetentingi branduolio fizikos, spektroskopijos, medžiagų analizės ir modifikavimo, aplinkotyros, aplinkosaugos bei aplinką tausojančios energetikos srityse. Įgyvendinant programą, bus pasitelkiami laboratorijose įvaldyti medžiagų analizės (AMS, RBS, PIXE), branduolio ir masių spektroskopijos metodai, radiocheminiai izotopų analizės metodai, taip pat naujai sukurti (proporcingumo daugiklio metodas, LIETDOS ) ar adaptuoti programų paketai (MCNP6, MCNPX, SCALE6.1, GEANT4, THYROID). Naudojama aparatūra: greitintuvinis masių spektrometras, didelės skiriamosios gebos induktyvios plazmos masių spektrometras ELEMENT 2 (Thermo Fischer Scientific), izotopų masių spektrometrai (Delta plus Advantage ir Delta V Advantage), mėginių įvedimo įrenginiai: chromatografas Trace GC Ultra, elementinis analizatorius Flash EA1112, dujų padavimo sistema Gas Bench II; mikrobanginė aukšto slėgio bandinių mineralizavimo krosnis Multiwave 3000 (Anton Paar); jonų greitintuvas „Tandatron 4110A“, didelės energinės skyros gama spektrometrai, rentgeno spindulių spektrometrai, alfa

dalelių spektrometras „Octete“, Mesbauerio spektrometras (Wissenschaftliche elektronik GMBH), aerozolio cheminės sudėties matuoklis ACSM (Aerodyne Research), skenuojantis dalelių judrio spektrometras TSI 3936 (SMPS), mažų aerozolio dalelių spektrometras (SMPS), aerodinaminis aerozolio spektrometras (APS) TSI 3321, elektropurkštuvinis aerozolio generatorius, TSI 3480 aerozolio generatorius TSI 3076, miltelių generatorius VAG2, kondensacinis dalelių skaitiklis CPC UF-02, aetalometras (Magee Scientific) EA31 7, integruojantis nefelometras TSI 3563, nešiojamas pramoninio degimo ir išmetamųjų dujų analizatorius Eurotron GreenLine 8000, oro srauto kalibratorius Gilibrator-2, oro srauto matuoklis TSI 4040, spektrofotometras SPECORD 210 PLUS, jonų chromatografas DIONEX 2010i, ozono analizatorius O341M ir kt. pagalbinė įranga užtikrinanti sklandų aparatūros veikimą.

## **5. Tyrimų etapai ir jų charakteristika, detalus įgyvendinimo planas**

5.1. Aplinkos taršos mažinimas, pavojingų ir radioaktyviųjų atliekų technologijų, nuo charakterizavimo iki galutinio sutvarkymo, mokslinių pagrindų sukūrimas bei technologijų plėtra, ypatingą dėmesį skiriant Ignalinos AE išskylančių eksploatavimo nutraukimo problemų sprendimui. Bus išvystyti eksperimentiniais matavimais pagrįsti metodai leidžiantys optimizuoti, grupuoti ir perskirstyti pavojingas ir radioaktyvias atliekas (toliau - RA) sprendžiant Ignalinos AE eksploatavimo nutraukimo problemas bei kuriant naujas, mokslškai pagrįstas, tausojančias aplinką bei rentabilias atliekų tvarkymo technologijas. Šie darbai bus vykdomi keturiais etapais:

5.1.1. Ignalinos atominės elektrinės (toliau - IAE) I bloko reaktoriaus ir biologinės apsaugos radioaktyviosios taršos charakterizavimo metodikos parengimas.

5.1.2. Saugyklų ir atliekynų radiacinės saugos eksperimentinių vertinimų metodologijos parengimas.

5.1.3. Bus sukurtas daugelio parametrų nuklidinio vektoriaus modelis, pilnai apibūdinantis RA nuklidinę sudėtį pagal optimaliai parinktų gama spindulių aktyvumus, pasinaudojant nuklidų susidarymo reaktoriaus neutronų sraute skaitinio modeliavimo rezultatais ir nuklidų sklaidos bei kaupimosi IAE terpėse dėsnų tyrimais.

5.1.4. Vieno ar daugelio parametrų nuklidinio vektoriaus tikslumo eksperimentinis įvertinimas ir vertinimo konservatyvumo kriterijų analizė. Bus pasiūlytos eksperimentinės priemonės ir teorinės prielaidos proporcingumo daugiklių (nuklidinio vektoriaus) vertinimo konservatyvumo mažinimui. Uždavinių konkrečių darbų sąsaja su norminiais etatais:

IAE reaktoriaus ir biologinės apsaugos radioaktyviosios taršos charakterizavimo metodikos parengimas (2 norminiai etatai), saugyklų ir atliekynų radiacinės saugos eksperimentinių vertinimų metodologijos parengimas (1 norminis etatas), daugiaparametrinio nuklidinio vektoriaus modelio kūrimas (1 norminis etatas), radioaktyviųjų atliekų konservatyvumo mažinimas (2 norminiai etatai). Viso uždaviniui vykdyti: 6 norminiai etatai.

5.2. Radioaktyviųjų atliekų perdirbimo technologijų mokslinis pagrindimas siekiant sumažinti atliekų pavojingumą ir tūrį (atliekų homogenizavimas ir pavojingiausių radionuklidų pašalinimas).

Bus atliktas konkrečių radioaktyviųjų atliekų perdirbimo bei tvarkymo technologijų mokslinis pagrindimas, suformuotos rekomendacijos IAE, RATA, Energetikos ministerijai bei kitoms komercinėms įmonėms dirbančioms šioje srityje Lietuvoje. Šiuos darbus apima keturi darbų etapai:

5.2.1. Radioaktyviųjų serpentinito atliekų tvarkymas nuo charakterizavimo iki galutinio sutvarkymo. Neutronų aktyvacijos serpentinito atliekose eksperimentiniai tyrimai bei nuklidinio vektoriaus sudarymas atsižvelgiant į nehomogeninį radionuklidų išsidėstymą tūryje. Sprendimų siekiant sumažinti atliekų pavojingumą ir tūrį paieška bei mokslinis įvertinimas.

5.2.2. Reaktoriaus grafito atliekų tvarkymas nuo charakterizavimo iki galutinio sutvarkymo. Apšvitinto grafito analizė. Skirtingų grafito komponentų priemaišų sudėties, jų aktyvacijos neutronų sraute bei  $^{14}\text{C}$  pasiskirstymo grafito paviršiuje ir grafito matricoje įvertinimas naudojant branduolinius ir masių spektrometrijos metodus. Dvimačio nuklidinio vektoriaus pagrindimas pagal  $^{14}\text{C}$  ir  $^{137}\text{Co}$  eksperimentinius rezultatus. Anglies izotopų santykių RBMK-1500 reaktoriaus grafite analizė bei priemaišų aktyvavimo neutronų sraute modelio validavimas. Grafito atliekų tvarkymo optimizavimas pasiremiant atliktais tyrimais bei kitų šalių patirtimi: kokia technologija labiausiai tinkama RBMK-1500 grafitui. Inovatyvių grafito tvarkymo technologijų įdiegimo studijos (grafito deginimas, plazminis nugarinimas, cheminis ar biologinis valymas).

5.2.3. Aktyvacijos bei paviršinės taršos komponentų nustatymas radioaktyviosiose atliekose visoms atominės elektrinės technologinio proceso grandims.

5.2.4. Aplinkai nekenkiančių dezaktyvavimo metodų kūrimas, šalinamų atliekų tūrio mažinimo bei antrinio panaudojimo metodų plėtra. Įvertinti sorbcinių technologijų atliekų tūrio mažinimo potencialą šalinant radionuklidus iš skystųjų terpių.

Uždavinio konkrečių darbų sąsaja su norminiais etatais:

Serpentinio atliekų tvarkymas (1 norminis etatas), reaktoriaus grafito atliekų tvarkymas (2 norminiai etatai), aktyvacijos bei paviršinės taršos komponentų nustatymas (1 norminis etatas), aplinkai nekenkiančių dezaktyvavimo metodų kūrimas (2 norminiai etatai). Viso uždaviniui vykdyti: 6 norminiai etatai.

5.3. Pavojingų ir radioaktyviųjų atliekų pakuočių ir atliekynų inžinerinių barjerų degradavimo teorinis ir eksperimentinis tyrimas. Uždavinyje vykdomi moksliniai tyrimai suskirstyti į keturis etapus:

5.3.1. Sukurti dinaminį daugiakomponentį matematinį modelį ir kompiuterinę programą, skirtą vertinti radiacinės saugos požįūriu svarbių radionuklidų sklaidą iš atliekų pirminės pakuotės ir per atliekyno inžinerinius barjerus į artimąją aplinką, įskaitantį terpių mechaninių (hidraulinio laidumo, porėtumo ir t.t.) bei cheminių ( $K_d$ , sorbcijos mechanizmų, pH...) savybių pokyčius.

5.3.2. Panaudojant radionuklidus (aktinoidus,  $^{99}\text{Tc}$ ,  $^{36}\text{Cl}$ ,  $^{14}\text{C}$ ,  $^{137}\text{Cs}$  ir kt.) kaip žymeklius eksperimentiškai ištirti perspektyvių gamtinės kilmės medžiagų (cemento, anhidritų, natūralių biosorbentų ir t.t.) sorbcinių savybių kaitą veikiant aplinkos veiksniams (aplinkos cheminiam veiksniams, bakterijoms ir t.t.), jeigu jos būtų naudojamos kaip izoliaciniai ir inžineriniai barjerai atliekų pakuotėse ir atliekynuose.

5.3.3. Cemento, naudojamo mažo ir vidutinio aktyvumo atliekų kietinimui, organinių priedų (polimerų su sulfonato ir karboksilatų funkcinėmis grupėmis) cheminio, terminio, radiacinio atsparumo/degradavimo tyrimas korozinėje ( $\text{CO}_2$ )/bedeguoninėje aplinkoje, kai terpės pH (13-10). Polimerų-radionuklidų kompleksinių junginių susidarymo šarminėje aplinkoje tyrimas, jų stabilumo konstantos nustatymas. Kompleksinių junginių tirpumas ir įtaka radionuklidų išsiplovimui iš inžinerinės sistemos.

5.3.4. Kompleksinių junginių biologinio degradavimo tyrimas naudojant organinius kompleksinius junginius žymėtus  $^{14}\text{C}$ , jų biodegradavimo kinetikos ir laipsnio nustatymas.

Uždavinio konkrečių darbų sąsaja su norminiais etatais:

Dinaminio daugiakomponentinio matematinio sklaidos modelio kūrimas (1 norminis etatas), eksperimentinis gamtinės kilmės medžiagų sorbcinių savybių kaitos tyrimas (2 norminiai etatai), atliekų kietinimui skirtų organinių priedų tyrimai (2 norminiai etatai), kompleksinių junginių biologinio degradavimo tyrimas (1 norminis etatas). Viso uždaviniui vykdyti: 6 norminiai etatai.

5.4. Plėtoti naujas technologijas mikrobangų dažnių ruože, skirtas mikrobangų aptikimui, komunikacijai ir didelės galios mikrobangų impulsų poveikiui bei priemonėms apsaugančioms nuo jo, ir šių tyrimų pagrindu kurti modernius prietaisus bei praktinio pritaikymo metodus ir priemones, kuriančias prielaidas tvariai aplinkai realizuoti. Uždaviniui įgyvendinti vykdomi moksliniai tyrimai suskirstyti į tris etapus:

5.4.1. Mikrobangų aptikimo srityje numatome vystyti rezistorinių jutiklių technologiją, kuriant išmanų integruotą su plačiajuoste antena mikrobangų impulsų jutiklį su išėjimo signalo temperatūrine kompensacija, bei ieškoti ir taikyti kitokias technologijas, skirtas mikrobangų impulsams registruoti.

5.4.2. Komunikacijų srityje numatome įsisavinti RFID (radijo dažnio atpažinimo) technologiją ir pritaikyti ją kuriant nuotolinius jutiklius.

5.4.3. Mikrobangų poveikio ir apsisaugojimo srityse numatome Mikrobangų lab. beaidėje kameroje tirti didelės galios mikrobangų impulsų poveikį įvairiems objektams ir atlikti mikrobangų slopinimo įvairiose medžiagose bei kompozituose tyrimus.

Uždavinio konkrečių darbų sąsaja su norminiais etatais:

Mikrobangų aptikimo, jų poveikio ir apsisaugojimo tyrimams bei komunikacijoms skirtų radijo dažnių technologijų išvystymui pagal uždavinio įvykdymui reikalingas veiktas yra suformuota inovatyvios prietaisų ir matavimų inžinerijos tyrimų mokslininkų grupė. Viso uždaviniui vykdyti: 4 norminiai etatai.

5.5. Kurti integruotas autonominio veikimo lakiųjų komponentų detekcijos priemones, tirti ir tobulinti jų veikimo principus bei metodus, pritaikyti jas aplinkos poveikį detektuojančioms sistemoms bei integruoti į saugios aplinkos pokyčius stebinčius prietaisus arba jų modulius.

Vykdamą programą bus kuriami bei vystomi miniatiūriniai, autonominiai, energiją tausojantys išorės veiksmų poveikį detektuojantys prietaisai, jų moduliai ir grupės, tinkami įjungti į intelektualias aplinkos stebėjimo, kokybinių atitikties charakteristikų tikrinimo ir procesų valdymo sistemas, pritaikomas individualizuotam naudojimui arba dideliame plote išskleistam „daiktų interneto“ tinklui. Programos uždavinys skaidomas į keletą susijusių užduočių, vykdomų ženkliai persiklojančiais etapais. Tokių užduočių-etapų planuojama trys:

5.5.1. bus panaudoti moderniausi medžiagų inžinerijos pasiekimai – dvimatės medžiagos, ultraplonieji sluoksniai, daugiakomponenčiai junginiai ir pan., – tikslingai formuojant jų savybių jautrį fiziniam ir cheminiam išorės poveikiui, tokiam kaip, pvz., elektromagnetinė spinduliuotė, temperatūra, slėgis, lakiosios cheminės komponentės ir pan.; bus išanalizuotos galimybės panaudoti tas savybes integruotiems ir kombinuotiems prietaisams kurti,

5.5.2. bus sukurti laboratorinių prietaisų modeliai, formuojant sluoksniuotus ir daugiakomponenčius darinius iš dvimačių medžiagų, puslaidininkinių elementų, kietakūnių konstrukcijų ir organinių objektų; bus ištirti tokių laboratorinių modelių veikimo principai ir pagrindinės charakteristikos bei jų tikslinio keitimo mechanizmai

5.5.3. bus sukurti praktiniams taikymams adaptuoti demonstraciniai prietaisų prototipai ir ištirtos jų funkcinės savybės, veikimo sąlygos bei išanalizuotos galimybės komerciškai patraukliams ir inovatyviems aplinkos faktorių poveikio detektavimo metodams bei technologijoms vystyti.

Uždavinio konkrečių darbų sąsaja su norminiais etatais:

Išvystyti inovatyvias sluoksniuotų ir dvimačių medžiagų technologijas ir pritaikyti jas aplinkos poveikį detektuojantiems prietaisų modeliams kurti yra sutelkta modernių bazinių technologijų vystymo grupė (8 norminių etatų). Modeliams sukurti ir pademonstruoti prietaisų funkcionalumo pagerinimo galimybės, suderinamumą su intelektualiomis sistemomis, veikiančiomis kaip individualus autonominis modulis arba išplėto „daiktų interneto“ tinklo dalis yra suformuota matavimų-testavimo grupė (3 norminiai etatai). Viso uždaviniui vykdyti: 11 norminių etatų.

5.6. Vystyti aplinkos būklės kaitos dėl energetikos, įskaitant biomasės ir atliekų naudojimą, sektoriaus veiklų vertinimo metodus ir diegti aerolio technologijas, kuriant ir tobulinant patalpų mikroklimato kokybės vertinimo prietaisus bei vystant aplinką tausojančią energetiką.

Šis ilgalaikės programos uždavinys orientuotas į inovatyvių ir modernių metodų kūrimą ir įgyvendinimą charakterizuojant energetikos sektoriuje naudojamų biomasės ir atliekų poveikį aplinkos būklei ir klimato kaitai. Bus tiriami organinių junginių sudėtyje turinčios aerolio dalelės, atmosferinių aerolio dalelių sudėties ir koncentracijų sąryšiai su jų pagrindiniais šaltiniais ir dinamiką kontroliuojančiais vyksmais. Bus įvertintas bendras organinės anglies turinčių aerolio dalelių kiekis ir ištirta santykinė vietinių ir regioninių pirminių ir antrinių dalelių šaltinių svarba taikant perspektyvius matavimo metodus ir integruojant molekulinį žymenų metodais pagrįstą analizę. Tai pagerins efektyvių oro taršos kontrolės strategijų kūrimą ir leis integruoti Lietuvos oro kokybės naujas pažangias žinias į globalinį mokslinių tyrimų tinklą ir projektus. Ypatingas dėmesys bus skiriamas aerolio technologijų taikymui ir diegimui patalpų mikroklimato kokybės vertinimo ir kontrolės sistemose. Šis ilgalaikės programos uždavinys bus įgyvendinamas tokiais etapais:

5.6.1. Identifikuoti ir įvertinti vyksmus ir šaltinius lemiančius erdvinę ir laikinę aerolio dalelių koncentracijas, fizines-chemines savybes ir išmetimų mechanizmus (pirminių ir antrinių), šaltinių kilmę (vietinę, regiono ir tarptautinę) ir klasę (gamtinės ar antropogeninės ir iškastinio kuro ar modernios kilmės). Atlikti organinės kilmės junginių sudėtyje turinčių aerolio dalelių ir su jais susijusių molekulinį žymenų tyrimus dalelių šaltinių pasiskirstymo nustatymui ir integravimui su būsimomis oro kokybės modeliavimo veiklomis.

5.6.2. Vystyti aerolio dalelių jutiklius, gerinant jų veikimo charakteristikas ir taikant juos patalpų mikroklimato kokybės vertinimui.

5.6.3. Tobulinti aerolio nanodalelių generavimo technologijas ir diegti jas į aplinką tausojančią energetiką.

5.6.4. Nustatyti biomasės deginimo molekulinis markerius ir charakterizuoti energetikos sektoriaus poveikį miesto aplinkos būklei.

Uždavinio konkrečių darbų sąsaja su norminiais etatais:

Aerolio dalelių vyksmų ir šaltinių identifikavimas, charakterizavimas ir su jais susijusių molekulinį žymenų tyrimas (2 norminiai etatai). Aerolio dalelių jutiklių vystymas, jų charakteristikų gerinimas ir taikymas patalpų mikroklimato kokybės vertinimui

(2 norminiai etatai). Aerosolio nanodalelių generavimo technologijų tobulinimas ir diegimas (2 norminiai etatai). Biomasės deginimo molekulinį markerių nustatymas ir energetikos sektoriaus poveikio miesto aplinkos būklei charakterizavimas (1 norminiai etatai). Viso uždaviniui vykdyti: 7 norminiai etatai.

5.7. Plėtoti branduolinės spektroskopijos metodus bei diegti plonasluoksnes ir didelių energijų jonų pluoštelių technologijas pramonėje ir aplinkotyroje.

Naujų medžiagų kūrimo bei struktūrų savybių (optinių, elektrinių bei magnetinių) valdymo panaudojant didelių energijų jonų pluoštelių plėtra bei branduolinių spektroskopijos metodų plėtra medžiagotyroje. Naujų (išmanių) medžiagų ir sudėtingų struktūrų panaudojimas, kuriant naujas spinduliuotės detektavimo sistemas su iš anksto numatytomis savybėmis. Numatomi keturi uždavinio etapai:

5.7.1. Aukšto liuminescencijos kvantinio našumo organinių junginių spinduliuotės kinetikos tyrimai, žadinant didelės energijos dalelėmis (neutronais, protonais) ir fotonais. Naujų mažo fono dalelių detekcijos sistemų kūrimas. Sukurtų sistemų veikimo procesų skaitinis modeliavimas.

5.7.2. Spektroskopijos metodų (PIXE, RBS, liuminescencijos ir kitos nesąlytinės matavimo technikos, pvz., fotolaidumo, fotojonizacijos spektroskopijos (MW-PCS)) plėtra ir jų pritaikymas kompleksiniam naujų medžiagų ir struktūrų savybių charakterizavimui ir optimizavimui panaudojant didelių energijų jonų pluoštelių sąveikos su įvairiomis medžiagomis ypatybes.

5.7.3. Jonų implantavimo optimizavimas atsižvelgiant į tolimesnio post-implantavimo apdorojimo ypatybes, susijusias su naujų medžiagų ir jų kompleksinių struktūrų modifikavimo technologijų kūrimu ir jų diegimu Lietuvos aukštųjų technologijų įmonėse.

5.7.4. Nanomedžiagų ir naujų medžiagų kuro elementams tyrimai Mesbauerio spektroskopijos metodu.

Uždavinio konkrečių darbų sąsaja su norminiais etatais:

Mažo fono dalelių detekcijos sistemų kūrimas (1 norminis etatas), spektrometrijos metodų panaudojimas naujų medžiagų ir struktūrų savybių charakterizavimui (1 norminis etatas), naujų medžiagų ir jų kompleksinių struktūrų modifikavimo technologijų kūrimas (1 norminis etatas), Mesbauerio metodų plėtra ir taikymas (3 norminiai etatai). Viso uždaviniui vykdyti: 6 norminiai etatai.

5.8. Plėtoti masių spektrometrijos metodus medžiagotyroje, biologijoje ir aplinkotyroje. Atmosferos mikropriemaišų cheminės ir izotopinės sudėties tyrimų taikymas bei naujų technologijų ir metodikų kūrimas, tiriant fizikinius ir cheminius vyksmus atmosferoje, veikiančius klimato kaitą ir žmogui artimą aplinką.

Uždavinys orientuotas į naujų metodų, paremtų kompleksiniais metodais apjungiančiais medžiagų cheminės sudėties bei masių spektrometrinius tyrimus, aplinkos sanduose bei biologiniuose objektuose plėtrą. Uždavinys aprėpia penkis darbo etapus:

5.8.1. Aerosolio dalelių tankio pasiskirstymo pagal dydį ir cheminę sudėtį tyrimai (gamtinėje ir urbanizuotoje aplinkoje) masių spektrometrijos bei kitais aerosolio dalelių (SMPS, DMA, CPC ir t.t.) spektrometrijos metodais. Žinių apie dalelių formavimosi mechanizmus apibendrinimas.

5.8.2. Kompleksinis masių spektrometrijos ir chromatografijos metodų taikymas fizikinių ir cheminių vyksmų aplinkoje tyrimui, esamos aplinkos sandų būklės įvertinimui bei jos evoliucijos prognozavimui. Bus įvertintas įvairių stresorių poveikis mikroorganizmams (bio-nano sistemoms).

5.8.3. Anglies, azoto ir sieros gamtinių ciklų tyrimas taikant stabilųjų ir radioanglies izotopų santykių metodus. Bus įvertinti veiksniai lemiantys aplinkos kokybines charakteristikas uždaroje erdvėje (gyvenamųjų ir pramoninių patalpų viršerdvėje).

5.8.4. Mikropriemaišų atmosferoje (sunkieji metalai, gyvsidabrio cheminės formos ir t.t.) tyrimas. Gyvsidabrio halogenidų analizatoriaus konstravimo darbai.

5.8.5. Datavimas sudėtingose cheminėse formose ir sudėtingose matricose. Bus skurtos naujos sudėtingų matricų bandinių paruošimo cheminės metodikos.

Uždavinio konkrečių darbų sąsaja su norminiais etatais:

Aplinkotyros darbo etapus sprendžiančių mokslininkų grupė (8 norminiai etatai). Stabilųjų izotopų santykių tyrimų mokslininkų grupė (3 norminiai etatai). Greitintuvinio masių spektrometro mokslininkų grupė (3 norminiai etatai). Viso uždaviniui vykdyti: 14 norminių etatų.

**6. Numatomi rezultatai:**

6.1. 135 straipsniai tarptautiniuose mokslo žurnaluose, turinčiuose aukštą citavimo indeksą; 5 išradimai (Lietuvos ir ES).

6.2. išvystyti eksperimentiniais matavimais pagrįsti metodai leidžiantys optimizuoti, grupuoti ir perskirstyti pavojingas ir radioaktyvias atliekas (RA) sprendžiant Ignalinos AE eksploatavimo nutraukimo problemas bei kuriant naujas, moksliskai pagrįstas, tausojančias aplinką bei rentabilias atliekų tvarkymo technologijas;

6.3. atliktas konkrečių radioaktyviųjų atliekų perdirbimo bei tvarkymo technologijų mokslinis pagrindimas, suformuotos rekomendacijos IAE, RATA, Energetikos ministerijai bei kitoms komercinėms įmonėms dirbančioms šioje srityje Lietuvoje;

6.4. įvertintas bendras organinės anglies turinčių aerozolio dalelių kiekis ir ištirta santykinė vietinių ir regioninių pirminių ir antrinių dalelių šaltinių svarba taikant perspektyvius matavimo metodus ir integruojant molekulinį žymenų metodais pagrįstą analizę. Tai pagerins efektyvių oro taršos kontrolės strategijų kūrimą ir leis integruoti Lietuvos oro kokybės naujas pažangias žinias į globalinį mokslinių tyrimų tinklą ir projektus.

**7. Rezultatų sklaidos priemonės:**

60 pranešimų tarptautinėse mokslo konferencijose. Mokslo populiarinimo paskaitos, straipsniai, televizijos bei radio laidos ir kt.

**8. Preliminarus programos lėšų paskirstymas (tūkst. Eur):**

| Eil. Nr. | Išlaidų pavadinimas                                                                                                | 2017 metais | 2018 metais | 2019 metais | 2020 metais | 2021 metais | Visai programai (suma) |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|------------------------|
| 1.       | Programai skirti norminiai etatai, lėšos                                                                           | 60<br>575   | 60<br>575   | 60<br>575   | 60<br>575   | 60<br>575   | 2875                   |
| 2.       | Kitos lėšos planuojamos programai vykdyti (iš kitų, institutui skirtų valstybės biudžeto bazinio finansavimo lėšų) | 575         | 575         | 575         | 575         | 575         | 2875                   |
|          | Iš viso                                                                                                            | 1150        | 1150        | 1150        | 1150        | 1150        | 5750                   |

**9. Programos trukmė:** 2017–2021 metai**10. Programos vadovas:**

Prof. dr. Vidmantas Remeikis, vyriausiasis m. d., tel.: 869844473; vidmantas.remeikis@ftmc.lt

PATVIRTINTA

Lietuvos Respublikos švietimo ir mokslo  
ministro 2017 m. balandžio 24 d.

įsakymu Nr. V-273

## FUNKCINĖS MEDŽIAGOS IR TECHNOLOGIJOS

**1. Programos vykdytojas** – Valstybinis mokslinių tyrimų instituto Fizinių ir technologijos mokslų centras (toliau – FTMC).

Norminiai etatai skirti programai – 43.

### **2. Programos tikslai:**

2.1. Funkcinių medžiagų gamybos technologijų, taikant elektrocheminius, katalizinius, sorbcinius, tribologinius ir fizikinius metodus kūrimas.

2.2. Cheminių atliekų nukenksminimo ir teršalų šalinimo iš pramoninių nutekamųjų vandenių technologijų kūrimas.

### **3. Programos uždaviniai:**

3.1. Naujos medžiagos energetikai tyrimai:

3.1.1. Efektyvios elektrocheminės sistemos šviesos energijos konversijai. Fotovoltinių bei fotoelektrocheminių sistemų ir jų kombinacijų tyrimai, nebrangių bei našių elektrodų vandens oksidacijos ir redukcijos reakcijoms paieška.

3.1.2. Plonasluoksnių saulės elementų formavimas ir tyrimas. Kesteritinių saulės elementų našumo didinimo, naujų efektyvių medžiagų: apatinio kontakto, absorberio bei barjerinio sluoksnių ir viršutinio kontakto paieška.

3.1.3. Metalų klasteriai ir erdvinės struktūros. Naujos medžiagos nanomediciniai.

3.1.4. Medžiagos kuro elementams. Katalizinių procesų, vykstančių kuro elementuose, tyrimai, naujų kuro elementų prototipų kūrimas ir testavimas.

3.1.5. Modifikuoti polikristalinio ir monokristalinio Si paviršiai. Cu, Ag, Au dalelėmis modifikuoto Si paviršiaus fotoelektrocheminių savybių tyrimai.

3.2. Naujos medžiagos mikroelektronikai:

3.2.1. Pereinamųjų ir tauriųjų metalų bei jų lydinių funkcinės dangos. Autokatalizinių metalų jonų redukcijos vandeniniuose ir nevandeniniuose tirpaluose procesų tyrimai bei technologijų kūrimas.

3.2.2. Plastikų bechrominės metalizavimo technologijos. ABS, PC/ABS ir PEEK plastikų ėsdinimo mechanizmo tyrimai bei technologijų kūrimas.

3.3. Antikorozinės dangos:

3.3.1. Naujo tipo Mg lydiniai. Magnetroninio dulkinimo metodu suformuotų lydinių paviršiaus modifikavimo sunkiųjų metalų (Nb, Hf, Zr) oksidais tyrimai.

3.3.2. Sumaniosios, aktyvios korozinės apsaugos dangos. Daugiakomponenčių, savaiminio užgijimo gebėjimu pasižyminčių, konversinių dangų Zn paviršiuje formavimo tyrimai.

3.3.3. Kompozicinių trivalenčio chromo dangų elektrocheminis nusodinimas ir jų fizikinių-mechaninių savybių tyrimas.

3.4. Tribologinių procesų daugiafunkcinėse technologijose tyrimai:

3.4.1. Nanodalelių bei cheminės aplinkos poveikio trinties procesams tyrimai ir rezultatų taikymas kuriant daugiafunkcines technologijas, skirtas elastomerų perdirbimui, dangų dilimo slopinimui ir tepamųjų medžiagų tobulinimui.

3.5. Ekologinės chemijos technologijų kūrimas ir tyrimai:

3.5.1. Vandens ir nuotekų valymo procesai. Valymo technologijų, taikant vakuuminės distiliacijos, atvirkštinės osmozės, ozonavimo bei naudojant sorbentus (aktyvuota anglis, geležis, sintetinius bei natūralius chitozano darinius), kūrimas.

3.5.2. Lietuvos archeologinių radinių tyrimai. Lietuvos archeometalurginių radinių ir archeologinio grunto cheminės sudėties ir struktūros tyrimai.

### **4. Metodologinis tyrimų pagrindimas:**

Naujų funkcinių medžiagų formavimui bus taikomi elektrocheminiai, sorbciniai, kataliziniai, hidroterminiai, solvoterminiai, terminio skaldymo bei kiti fizikiniai metodai, įskaitant magnetroninį

plazminį dulkinimą, atominio sluoksnio storio nusodinimą, aukštatemperatūrinį įsierinimą/įseleninimą, mikrobangų sintezę ir kt.

Naujų medžiagų charakterizavimui bei elektrocheminių charakteristikų nustatymui bus taikoma ciklinė voltamperometrija, chronoamperometrija, chronopotenciometrija, elektrocheminio impedanso ir triukšmo spektroskopijos. Taip pat bus atliekami susintetintų katalizatorių stabilumo testai.

Medžiagų struktūra, paviršiaus morfologija ir cheminė/fazinė sudėtis bus tiriama taikant FESEM, XRD, XPS, SERS, EDX, XRF, FTIR, fotoluminescencijos, difuzinio atspindžio, Mosbauerio ir Ramano spektroskopijos, metodus. Tirpalų cheminė sudėtis bus nustatoma taikant ICP-OES, emisinės optinės spektroskopijos ir spektrinės chromatografijos metodus (GC-MS ir/ar LC-MS-DAD). Saulės elemento fotoelektrinės charakteristikos bus vertinamos fotovoltamperometriniais matavimais naudojant saulės imitatorių. Bendrieji tirpalų kenksmingumo parametrai bus nustatomi matuojant cheminį (ChDS) ir biologinį (BDS<sub>7</sub>) deguonies suvartojimą.

Tyrimai bus vykdomi, naudojant FTMC turimą įrangą: magnetroninio dulkinimo įrenginį UNIVEX 350 (Leybold, Vokietija), atominių sluoksnių nusodinimo (ALD) įrenginį Fiji 200 (Cambridge NanoTech, JAV); sudėties, morfologijos ir struktūros charakterizavimui – Rentgeno fotoelektronų ir Ože elektronų spektrometras ESCALAB MK II (VG Scientific, JK), skenuojantį elektroninį mikroskopą Helios NanoLab 650 (FEI, Olandija), peršvietimo elektroninį mikroskopą Tecna G2 F20 X-TWIN (FEI, Olandija), Rentgeno spindulių difraktometrą Smart Lab (Rigaku, Japonija), Rentgeno spindulių difraktometrą D8Advance (Bruker AXS, Vokietija); RC2 (J.A. Woolam Co, JAV) elipsometras; elektrocheminiams – koroziniams matavimams – elektrocheminės matavimo sistemos Solartron 1280Z (Ametek, JK), Zennium/Zahner Xpot (Zahner Elektrik, Vokietija), PARSTAT 2273 su EKKM bloku (Princeton Applied Research Instruments, JAV); technologinių pavyzdžių testavimui standartizuoti ekspres-metodai, naudojant drėgmės kamerą HCP 108 (Mettler, Vokietija) ir druskos rūko kamerą Q-Fog (Q-Panel Lab Products, JAV). Gaunamų funkcinių medžiagų ir paviršių atsparumas trinčiai bei dilimui bus tiriamas naudojant tribometrą „CSM Pin-on-Disc“, Tyrimams, taip pat bus naudojamas tribometras „Ducom MicroPoD T-20 M63“, Funkcinių medžiagų atsparumas oksidacijai bei korozijai bus tiriamas naudojant jau turimas ventiliuojančias krosneles SNOL ir Mettler bei korozijos kameras Q-Lab bei HCP-108. Žematemperatūrinis atsparumas bus tiriamas, naudojant ultrašaldiklį Sanyo bei skystą azotą. Reologiniai matavimai bus atliekami, naudojant Cannon-Fenske klampomačius.

Antimikrobinės nanodarinių savybės bus tiriamos Gyvybės mokslų centro laboratorijose; klasterių ir magnetinių nanodalelių citologiniai ir *in vivo* tyrimai bus atliekami Nacionaliniame vėžio institute.

### **5. Tyrimų etapai ir jų charakteristika; detalus įgyvendinimo planas:**

Vykdant 3.1 papunktyje nurodytą uždavinį numatoma derinant cheminius, elektrocheminius bei atominio sluoksnio nusodinimo metodus, formuoti mišrius metalų oksidų sluoksnius ir/ar jų heterosandūras ant elektrai laidaus pagrindo; tirti jų mikro/nanostruktūrizavimo galimybes, taip pat jų fotoelektrochemines bei elektrokatalizines savybes vandens oksidacijos ir redukcijos reakcijose; tirti šių kompozitų pagrindu suformuotų anodų selektyvumą deguonies skyrimosi reakcijai vandeniniuose tirpaluose, kuriuose chlorido jonų koncentracija yra  $\geq 3.5$  %. Planuojama vykdyti molibdeno apatinio kontakto modifikavimo, naudojant magnetroninį dulkinimą bei siekiant pagerinti jo sankabumą su ant jo elektrochemiškai nusodinamo metalo sluoksniu, tyrimus. Būtina parinkti elektrocheminio nusodinimo technologijas, kurias naudojant būtų nusodintas geriausios kokybės (tolygaus storio, ištisinis, lygaus paviršiaus) vario-alavo-cinko sluoksnis/sluoksniai bei įsierinimo/įseleninimo procedūros, kurią naudojant susiformuotų grynas, ištisinis, gerai sukibęs su Mo apatiniu kontaktu kesterito absorberio sluoksnis, optimalius parametrus. Planuojama vykdyti barjerinio sluoksnio cheminio nusodinimo technologijos paiešką, kurios tikslas pakeisti CdS sluoksnį Zn ar Zn-In sulfidiniais ar oksi-sulfidiniais sluoksniais.

Planuojama kurti ir tirti naujas metalų sulfidų (MoS<sub>2</sub>), oksidų (TiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) ir selenidų (TiSe<sub>2</sub>) nanostruktūrizuotas plėveles ir jų heterostruktūras su grafeno oksidu bei plazmonionėmis metalų nanodalelėmis, pasižyminčias itin aukštu elektro- ar fotokataliziu aktyvumu vandens skaldymo reakcijai. Toliau (2017-2018) bus tęsiami MoS<sub>2</sub> lakštelinių struktūrų, dekoruotų elektrochemiškai Pt ir Pd kvantiniais taškais ir nanodalelėmis, TiO<sub>2</sub> nanovamzdelinių plėvelių dekoravimo puslaidininkinėmis nanodalelėmis (Cu<sub>2</sub>O, CuO, MoS<sub>2</sub>, Cu<sub>x</sub>Se<sub>y</sub>) bei Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> su anglies ir grafeno oksido tarpais bei jų heterostruktūrų tyrimai. Planuojama sukurti ir ištirti intensyviai raudona šviesa liuminescuojančius Au



klasterius, stabilizuojant juos baltimų fragmentais, amino rūgštimis bei gamtinių polimerų apvalkalais. Nustačius, kad itin mažų dimensijų metalų oksidų nanodalelės ir klasteriai dažnai demonstruoja ypatingą agresyvumą daugeliui mikrobu, planuojama atlikti kompleksą tyrimų su įvairiausiais mikroorganizmais ir laboratorijoje susintetintais ultra-smulkios struktūros metalų oksidais. 2017-2019 metais planuojama ieškoti ir tobulinti naujų raudonai liuminescuojančių Au klasterių sintezės ir jų stabilizavimo kelių, naudojant pigesnius bioreduktorius. Planuojama tyrinėti ultra smulkių ir klasterinio tipo magnetinių nanodalelių hidroterinę ir solvoterminę sintezę bei šių nanodarinių antimikrobines savybes.

Vykdam 3.1.4 papunktyje nurodytą uždavinį, Katalizinių procesų, vykstančių kuro elementuose, tyrimai bus vykdomi, kuriant įvairius metalas/grafenas nanokompozitus ( $M=Pt, Au, Co, Ni, Cu, Ru, Mo, W$ ), metalų ( $Co, Ni$ ), turinčių pluoštelinę struktūrą, ir dekoruotų  $Pt$  ar  $Au$  nanodalelėmis, pasižyminčius elektrokataliziniu aktyvumu naudojamo kuro (natrio borhidrido, metanolio, etanolio, hidrazino, formaldehido, skruzdžių rūgšties, gliukozės) oksidacijos reakcijoms bei deguonies ir  $CO_2$  redukcijos reakcijoms. Taip pat bus kuriamos netauriųjų metalų ar jų lydinių kompozicijos, pasižyminčios kataliziniu aktyvumu natrio borhidrido hidrolizės reakcijai, t.y., vandenilio išskyrimo reakcijai. Atrinktos perspektyvios katalizatorių kompozicijos bus integruojamos kuro elementų prototipų maketuose bei įvertintos kuro elementų charakteristikos: celės įtampa, našumas ir kt. Taip pat numatoma kurti energijos šaltinius (baterijas), pagrindu naudojant  $MnO_2$  ir kitų metalų oksidus ( $Fe_3O_4, RuO_2$ ) bei jų kompozitus su anglimi ar grafenu bei ištirti jų savybes, taikant elektrocheminius metodus: srovės-potencialo priklausomybių bei talpos įvertinimas, įkrovimo/iškrovimo eksperimentai, degradacijos tyrimai.

Vykdam 3.1.5 papunktyje nurodytą uždavinį, planuojama sukurti originalų fotoelektrocheminių celių našumo nustatymo bei modifikuoto  $Si$  paviršiaus (adsorberio) fizikinių savybių matavimo metodikas ir standus, kurie bus panaudoti silicio paviršiaus modifikavimo pirmos grupės elementais ( $Cu, Au, Ag$ ) ir  $Pt$  procesų tyrimams. Sukurtas fotoelektrocheminės celės panaudoti šias ne tik tiesioginei saulės energijos konversijai į elektros energiją, bet ir vandens fotoelektrolizei bei kitiems kataliziniams procesams (pvz., metanolio skaldymui).

Vykdam 3.2.1 papunktyje nurodytą uždavinį numatoma atlikti taikomuosius cheminio platinos, paladžio, kobalto, nikelio, vario, sidabro ar jų lydinių nusodinimo, reduktoriumi naudojant morfolino boraną, kobalto(II) bei titano(III) jonus ir kitus dar netyrinėtus šiuose procesuose reduktorius, tyrimus. Taip pat nustatyti pagrindinius metalų jonų redukcijos dėsningumus, surasti optimalias sąlygas įvairių storių kobalto, nikelio ar jų lydinių nusodinimui ant įvairių paviršių: nustatyti platinos, paladžio, kobalto, nikelio ar jų lydinių nusėdimo greičio priklausomybes nuo reaguojančių medžiagų koncentracijos, priedų, tirpalo pH, temperatūros bei ištirti gautų dangų paviršiaus morfologiją, struktūrą bei sudėtį, taikant lauko emisijos skenuojančią elektroninę mikroskopiją, Rentgeno spindulių energijos dispersinę analizę, Rentgeno spindulių difrakciją bei indukuotos plazmos optinės emisijos spektroskopiją. Taip pat numatoma ištirti gautų dangų tinkamumą barjerinio sluoksnio formavimui ant vario paviršiaus, cheminiu būdu nusodintų karščiui atsparių tauriųjų metalų dangų tinkamumą kosmoso technologijoms ir kitas pritaikymo galimybes, įskaitant lazeriu aktyvuotų plastmasių paviršių metalizavimą. Taip pat numatoma gautus cheminio kobalto, nikelio ar jų lydinių paviršius modifikuoti  $Pt, Au, Pd$  ir kt. metalų nanodalelėmis bei ištirti jų katalizinį aktyvumą natrio borhidrido hidrolizės bei natrio borhidrido, hidrazino, metanolio, etanolio ir kt. elektro-oksacijos reakcijose, taikant ciklinę voltamperometriją, chronoamperometriją, chronopotenciometriją. Ypatingas dėmesys bus skiriamas cheminio metalų nusodinimo procesų realizavimui nevandeniniuose tirpaluose bei lydinių formavimui.

Vykdam 3.2.2. papunktyje nurodytą uždavinį planuojamas ABS, PC/ABS bei PEEK plastikų paviršiaus fizinių ir cheminių pokyčių adhezinio paruošimo (ėsdinimo) metu tyrimas bei tų pokyčių koreliacijos su gaunamos dangos adhezija nustatymas. Pirmame etape, kadangi ėsdinimo tirpalų stabilumas yra pagrindinė problema, yra numatoma stabiliausių plastikų ėsdinimo tirpalų paieška. Sekančiame tyrimų etape yra numatomi eksperimentiniai darbai, nukreipti šių tirpalų efektyvumo didinimui, nemažinant jų stabilumo laike. Trečiasis etapas yra sukurtų adhezinio paruošimo tirpalų efektyvumo priežasčių aiškinimasis. Numatoma tyrimus atlikti panaudojant tokias oksiduojančias medžiagas, kaip permanganatai, chloratai, peroksidiniai junginiai.

Vykdam 3.3.1 papunktyje nurodytą uždavinį, naudojant magnetroninio plazminio dulkinimo metodą planuojama nusodinti  $Mg$  lydinius, legiruotus  $Nb, Hf$  ar  $Zr$  bei, papildomai taikant atominių sluoksnių nusodinimo (ALD) technologiją, bus bandoma eliminuoti galimas dangų poras. Magnio lydinio legiruojančio priedo oksidu modifikuotų dangų paviršiai bus charakterizuojami nustatant jų

korozines savybes vandeniniuose tirpaluose ir dirbtinėje atmosferoje bei planuojama ieškoti šių lydinų taikymo galimybių kontroliuojamo greičio biomedžiagose, pramoniniuose ir buitiniuose gaminiuose.

Vykdam 3.3.2 papunktyje nurodytą uždavinį, sukaupia patirtis vykdant plieno aktyvios korozinės apsaugos tyrimus (MT mokslininkų grupių 2 projektai) bus panaudota savaiminio užgijimo gebėjimu pasižyminčių konversinių plėvelių Zn elektrolitinių dangų paviršiuje procesų analizei. Kadangi konversinės dangos formuojasi tirpstant pagrindui ir iš persotinto tirpalo nusėdant reakcijos produktams, yra būtina kontroliuoti metalo pagrindo tirpimo greitį ir nusodinamos dangos paviršiaus reljefą, tikslu suformuoti struktūrą, gebančią adsorbuoti kuo didesnę kiekį ir kuo aukštesnio oksidacijos laipsnio junginių, pasižymintį korozijos inhibitorių savybėmis. Pradiniam etape numatyti vykdyti tyrimai bus kreipiami į fundamentinių žinių apie vykstančius cheminius procesus kaupimą, tuo tarpu sekantys darbo etapai bus siejami su praktinių, technologinių problemų (per ilgą procesų trukmę) sprendimu.

Vykdam 3.3.3 papunktyje nurodytą uždavinį planuojama kurti funkcinių, storų (storis svyruoja nuo 1.3 iki 760  $\mu\text{m}$ ) chromo dangų, nusodinamų iš trivalenčio chromo elektrolitų technologijas. Gaunamos dangos savo fiziko-mechaninės savybėmis turi prilygti arba būti geresnėmis už chromo dangas gautomis iš šešiavalenčio chromo elektrolitų.

Vykdam 3.4 papunktyje nurodytą uždavinį, pradinis ir pats svarbiausias tyrimų etapas yra fundamentalių žinių apie trinties, dilimo ir kitus tribologinius procesus kūrimas. Tiriant paviršių trintį ir dilimą būtina įvertinti mechaninių parametrų ir topografinių savybių efektus, ištirti tepamųjų medžiagų plėvelių elgseną ir nustatyti nanostruktūrinių darinių poveikį orientuojantis į tris pagrindines koncepcijas: tepamųjų medžiagų kūrimą; dilimui atsparių dangų kūrimą bei tribologinių polimerų apdorojimą. Sekantis tyrimų etapas bus fundamentalių žinių taikymas, didžiausią dėmesį skiriant tepamųjų medžiagų kūrimui naudojant aliejų, taukų, riebalų ir kitų lipidų darinius. Šios medžiagos funkcionuotų kaip bazinės alyvos arba terpės galutiniam produktui: tepalui, užpildui ar dangai. Taip pat fundamentalios žinios tribologijos srityje bus taikomos kuriant dilimui atsparias dangas, fokusuojantis į anoduotus aliuminio lydinius. Bus įvertinta paviršių nanostruktūros įtaka lydinų tribologinėms savybėms ir išnagrinėtas įvairių užpildų efektyvumas mažinant dilimo nuostolius. Veiklų metu gaunamos žinios apie trinties procesus bus naudojamos ir kuriant polimerų apdorojimo technologijas. Bus akcentuojamas daugiafunkcinis gumos perdirbimas, kurio metu gumos atliekos sąveikauja su besitrinančiais paviršiais ir tikslingai parinktais cheminiais junginiais. Siekiant patobulinti šio daugiafunkcinio proceso efektyvumą yra būtina sukaupiti daugiau fundamentinių žinių apie tribologinius mechanizmus, susijusius su elastomerų smulkinimu, mechanocheminiais virsmas ir topografijos transformacijomis. Siekiant sukaupiti fundamentalias žinias apie nanodalelių bei cheminės aplinkos poveikio procesus ir taikyti jas kuriant daugiafunkcines technologijas, skirtas elastomerų perdirbimui, dangų dilimo slopinimui ir tepamųjų medžiagų tobulinimui, tyrimai bus vykdomi pagal šį įgyvendinimo planą.

Vykdam 3.5.1 papunktyje nurodytą uždavinį bus tiriamos įvairių vandeninėse nuotėkose pasitaikančių organinių junginių oksidacijos ozonu modelinės reakcijos, jų kinetika ir konversijos laipsnis. Numatoma sukurti patikimas ozono koncentracijos vandeniniuose tirpaluose nustatymo metodikas, pageidautina reakcijos mišinyje. Planuojama pritaikyti selektyvius elektrodus ir kitus metodus. Numatoma sukurti modelių organinių junginių ir jų oksidacijos produktų koncentracijų nustatymo metodikas taikant dujų chromatografiją ir kitus metodus.

Apibendrinus šių modelių reakcijų duomenis, bus parenkama optimali, efektyviausia ir ekonomiškiausia pavojingų organinių junginių vandeniniuose tirpaluose mineralizavimo sistema. Sukurti nukenksminimo metodai bus perkelti ir pritaikomi pramoninėms nuotekoms ir sąvartynų filtratams nukenksminti.

Vykdam 3.5.2 papunktyje nurodytą uždavinį planuojama vykdyti Lietuvos archeologinių radinių, susijusių su ankstyvąja metalurgija, cheminės ir fazinės sudėties bei struktūros tyrimus. Numatomas metalurginių procesų ypatumų bei jų raidos įvertinimas. Efektyvios senovės gyvenviečių paieškos ir tyrimų metodikos, paremtos cheminiais grunto tyrimais, kūrimas ir taikymas.

Konkrečių darbų sąsaja su norminiais etatais:

Efektyvios elektrocheminės sistemos šviesos energijos konversijai. Fotovoltinių bei fotoelektrocheminių sistemų ir jų kombinacijų tyrimai, nebrangių bei našių elektrodų vandens oksidacijos ir redukcijos reakcijoms paieška. (3 norminiai etatai).

Plonasluoksnių saulės elementų formavimas ir tyrimas. Kesteritinių saulės elementų našumo didinimo,

naujų efektyvių medžiagų: apatinio kontakto, absorberio bei barjerinio sluoksnių ir viršutinio kontakto paieška. (6 norminiai etatai).

Metallų klasteriai ir erdvinės struktūros. Naujos medžiagos nanomediciniai. (3 norminiai etatai).

Medžiagos kuro elementams. Katalizinių procesų, vykstančių kuro elementuose, tyrimai, naujų kuro elementų prototipų kūrimas ir testavimas. (5 norminiai etatai).

Modifikuoti polikristalinio ir monokristalinio Si paviršiai. Cu, Ag, Au dalelėmis modifikuoto Si paviršiaus fotoelektrocheminių savybių tyrimai. (2 norminiai etatai).

Pereinamųjų ir tauriųjų metalų bei jų lydinų funkcinės dangos. Autokatalizinių metalų jonų redukcijos vandeniniuose ir nevandeniniuose tirpaluose procesų tyrimai bei technologijų kūrimas. (5 norminiai etatai).

Plastikų bechrominės metalizacijos technologijos. ABS, PC/ABS ir PEEK plastikų ėsdinimo mechanizmo tyrimai bei technologijų kūrimas. (2 norminiai etatai).

Naujo tipo Mg lydiniai. Magnetroninio dulkinimo metodu suformuotų lydinų paviršiaus modifikavimo sunkiųjų metalų (Nb, Hf, Zr) oksidais tyrimai. (5 norminiai etatai).

Sumaniosios, aktyvios korozinės apsaugos dangos. Daugiakomponenčių, savaiminio užgijimo gebėjimu pasižyminčių, konversinių dangų Zn paviršiuje formavimo tyrimai. (3 norminiai etatai).

Kompozicinių trivalenčio chromo dangų elektrocheminis nusodinimas ir jų fizikinių-mechaninių savybių tyrimas. (2 norminiai etatai).

Nanodalelių bei cheminės aplinkos poveikio trinties procesams tyrimai ir rezultatų taikymas kuriant daugiafunkcines technologijas, skirtas elastomerų perdirbimui, dangų dilimo slopinimui ir tepamųjų medžiagų tobulinimui. (3 norminiai etatai).

Vandens ir nuotekų valymo procesai. Valymo technologijų, taikant vakuuminės distiliacijos, atvirkštinės osmozės, ozonavimo bei naudojant sorbentus (aktyvuota anglis, geležis, sintetinius bei natūralius chitozono darinius), kūrimas. (2 norminiai etatai).

Lietuvos archeologinių radinių tyrimai. Lietuvos archeometalurginių radinių ir archeologinio grunto cheminės sudėties ir struktūros tyrimai. (2 norminiai etatai).

#### **6. Numatomi rezultatai:**

Igyvendinus programos tikslus ir uždavinius, atlikus fundamentinius mokslinius tyrimus bus parengta 90 straipsnių tarptautiniuose mokslo žurnaluose, 5 patentai, 5 technologijos, 12 apgintų mokslo daktaro disertacijų.

#### **7. Rezultatų sklaidos priemonės:**

20 pranešimų tarptautinėse mokslo konferencijose. Mokslo populiarinimo paskaitos, straipsniai.

#### **8. Preliminarus programos lėšų paskirstymas (tūkst. Eur):**

| Eil. Nr. | Išlaidų pavadinimas                                                                                                | 2017 metais | 2018 metais | 2019 metais | 2020 metais | 2021 metais | Visai programai (suma) |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|------------------------|
| 1.       | Programai skirti norminiai etatai, lėšos                                                                           | 43<br>412   | 43<br>412   | 43<br>412   | 43<br>412   | 43<br>412   | 2060                   |
| 2.       | Kitos lėšos planuojamos programai vykdyti (iš kitų, institutui skirtų valstybės biudžeto bazinio finansavimo lėšų) | 412         | 412         | 412         | 412         | 412         | 2060                   |
|          | Iš viso                                                                                                            | 824         | 824         | 824         | 824         | 824         | 4120                   |

#### **9. Programos trukmė: 2017–2021 metai**

#### **10. Programos vadovas:**

Habil. dr. Rimantas Ramanauskas, vyriausiasis m. d., tel.: 852648844;  
rimantas.ramanauskas@ftmc.lt

## MATAVIMŲ TECHNOLOGIJOS IR PRIETAISAI

**1. Programos vykdytojas** – Valstybinis mokslinių tyrimų instituto Fizinių ir technologijos mokslų centras (toliau – FTMC).

Norminiai etatai skirti programai – 6.

**2. Programos tikslai:**

2.1. Fizikinių ir cheminių matavimo technologijų kūrimas, tyrimas ir plėtra;

2.2. Inovatyvių matavimo technologijų diegimas Lietuvos ūkyje, moksle, medicinoje, valstybės valdyme bei atominėje energetikoje.

**3. Programos uždaviniai:**

3.1. Tirti tarptautinės SI sistemos vienetų atkūrimo technologijas. Tai – bendras uždavinys visoms Metrologijos skyriaus laboratorijoms, jo sprendimai veda prie matavimų rezultatų patikimumo ir tikslumo palaikymo arba gerinimo.

3.2. Tirti temperatūros gradientus medžiagose siekiant nustatyti jose esančių priemonių įtaką temperatūros atkūrimo tikslumui ir vystyti CO<sub>2</sub> sublimavimosi technologiją:

3.2.1. bus tiriama gryųjų metalų Al ir Ag stingimo proceso dinamika celėse, nustatyta priemonių koncentracijos įtaka metalo kristalizacijos trukmei ir temperatūros vieneto atkūrimo tikslumui;

3.2.2. laboratorijoje esančiomis priemonėmis tęsiami CO<sub>2</sub> sublimavimosi temperatūros atkūrimo sistemos, savo tikslumu artimos kitas temperatūras atkuriančioms, pasauliniu mastu jau įteisintoms, celėms, tyrimai;

3.2.3. bus kuriama CO<sub>2</sub> matavimo sistema, pritaikyta EPVT matavimams, atliekami jos tyrimai.

3.3. Tirti laiko ir dažnio vienetų atkūrimo variacijas bei UTC(LT) laiko skalės perdavimo technologijas:

3.3.1. laiko ir dažnio vienetų atkūrimo stabilumo tyrimai siekiant nustatyti atkurtą dydžių nuokrypio vertes ilgalaikėje skalėje;

3.3.2. bus atliekamas šviesolaidinis UTC(LT) laiko skalės perdavimas bei laiko vienetų palyginimas;

3.3.3. akustoelektrinių generatorių (veikiančių tūrinių bei paviršinių akustinių bangų pagrindu) ilgalaikio ir trumpalaikio (fazinių triukšmų) stabilumo tyrimas bei metrologinių charakteristikų tobulinimas.

3.4. Atlikti elektrinės varžos etalono temperatūrinius tyrimus, taikyti Džozefsono ir Zenerio efektus elektrinės įtampos etaloniniuose matavimuose:

3.4.1. kurti ir tirti Zenerio įtampos etalonų charakteristikų prognozavimo metodus;

3.4.2. atlikti drėgmės įtakos Zenerio įtampos etalonų stabilumui, bei triukšminių charakteristikų tyrimus.

3.5. Tirti medžiagų kiekybinės analizės metodų ribojimus siekiant mažinti matavimų neapibrėžtį, taikyti rezultatus medicinoje, farmacijoje, branduoliniuose ir aplinkosaugos tyrimuose:

3.5.1. chromatografijos ir masių spektrometrijos panaudojimas naujų, patikimų ir tikslų medžiagų analizės metodų sukūrimui, tyrimui bei taikymui medicinoje, farmacijoje ir aplinkosaugoje;

3.5.2. korekcijų nustatymas branduolinėje medicinoje naudojamų jonizacinių kamerų atsakui, matuojant diagnostikai ir terapijai skirtų radionuklidų aktyvumą (F-18, Tc-99m, I-123, I-131);

3.5.3. radionuklidų pernašos iš paviršinės saugyklos į aplinką tyrimas (lokalusis mastelis) bei foninės radionuklidų sudėties pažemio atmosferoje tyrimas Vosyliškių stotyje (3,5 km nuo Ignalinos AE) prieš paleidžiant Astravo reaktorių;

3.5.4. trigubų ir dvigubų sutapčių santykių metodo plėtra signalų apdorojimui panaudojant skaitmeninę techniką.

3.6. Cheminių matavimų technologijų inovacija, tobulinant ir kuriant naujas mėginio surinkimo ir įvedimo sistemas chromatografijai.

#### 4. Metodologinis tyrimų pagrindimas:

Moksliniai tyrimai etaloninių matavimų srityje yra vienas iš svarbiausių veiklos barų, susijusių su valstybiniu reguliavimu ir standartizavimu, kuris yra būtinas laisvam prekių paslaugų judėjimui užtikrinti. Dauguma pasaulio valstybių metrologijos mokslinius tyrimus ir matavimo technologijų plėtrą laiko itin svarbia veikla, reikalinga ilgalaikiam šalių ekonominiam augimui stiprinti. Lietuvos Respublikos Vyriausybės 2014 m. birželio 25 d. nutarimu Nr. 595 „Dėl matavimo vienetų valstybinių etalonų tvirtinimo, saugojimo ir naudojimo tvarkos aprašo, matavimo vienetų valstybinių etalonų ir matavimo vienetų valstybinių etalonų laboratorijų sąrašų patvirtinimo ir Nacionalinio metrologijos instituto paskyrimo“ Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Fizinių ir technologijos mokslų centras atlieka ir Nacionalinio metrologijos instituto (NMI) funkcijas. NMI paskirtis – užtikrinti, kad valstybiniais etalonais atkuriamų matų vienetų vertės būtų susietos su Tarptautinės vienetų sistemos (SI) matų vertėmis bei perduotos Lietuvos ūkio subjektams, mokslo organizacijoms bei kitoms institucijoms. Šių užduočių įgyvendinimas yra ne tik taikomųjų mokslinių tyrimų bei technologinių priemonių kompleksas, bet ir mokslinė tiriamoji veikla, apimanti eksperimentinę ir teorinę medžiagų savybių analizę bei fundamentinius plataus energijos ruožo elektromagnetinės spinduliuotės sąveikos su medžiaga tyrimus. Lietuvos Respublikos Metrologijos įstatymas (6 straipsnis, 3 punktas), 2006 m. birželio 22 d. Nr. X717 įpareigoja atlikti nuolatinis valstybinių etalonų mokslinius tyrimus.

Lietuvos metrologijos mokslinių tyrimų infrastruktūros branduolys yra sutelktas FTMC Metrologijos skyriaus (MS) laboratorijose: Laiko ir dažnio etalono laboratorijoje (Valstybinis laiko ir dažnio etalonas); Temperatūros vieneto etalono laboratorijoje (Valstybinis temperatūros vieneto etalonas); Elektros dydžių etalonų laboratorijoje (Valstybiniai elektrinės įtampos ir elektrinės varžos etalonai); Cheminės metrologijos laboratorijoje (Metrologijos chemijoje etaloniniai matavimo metodai ir priemonės); Jonizuojančiosios spinduliuotės metrologijos laboratorijoje (Valstybinis radionuklidų aktyvumo vieneto etalonas).

Laiko ir dažnio matavimų sritis – FTMC Laiko ir dažnio etalono branduolį sudaro du cezio (Cs) atominiai laikrodžiai ir dvi GPS (Global Positioning System) laiko palyginimo sistemos. Abu Cs atominiai laikrodžiai yra integruoti į tarptautinio atominio laiko (TAI) ir suderintojo pasaulinio laiko (UTC) formavimą, kuriuos atlieka BIPM Laiko skyrius. Tokiu būdu FTMC Laiko ir dažnio etalono Cs atominiai laikrodžiai yra UTC laiko skalės fizinė realizacija UTC(LT). Pasaulyje šiuo metu yra 68 laiko ir dažnio etalonų laboratorijos, atliekančios fizines laiko skalių realizacijas UTC(k) ir tokiu būdu užtikrinančios šių etalonų tarptautinę sietį. UTC(k) laiko etalonų metrologinės charakteristikos turi tenkinti griežtus BIPM reikalavimus, kuriuos galima patenkinti tik atliekant etalono sisteminius tyrimus. Kadangi laiko ir dažnio etalonas yra nuolatos veikiantis įrangos kompleksas šie tyrimai privalo būti atliekami nuolatos. Tai: Cs atominių laikrodžių fazinių triukšmų (trumpalaikio stabilumo) ir ilgalaikio stabilumo tyrimai bei GPS laiko palyginimo sistemų sąlygotų laiko perdavimo neapibrėžčių tyrimai. Tyrimų rezultatai yra skelbiami kiekvieną mėnesį atnaujinamoje BIPM duomenų bazėje (<http://www.bipm.org/jsp/en/TimeFtp.jsp>). Perduodant laiko ir dažnio vienetų vertes bei atliekant etaloninių matavimo priemonių palyginimus yra pasitelkiami etaloninių dažnių generatoriai, telekomunikacijų ryšio linijos bei palydovinės navigacijos sistemos. Visos šios sistemos perduodamos harmoninius etaloninių dažnių signalus įneša papildomus fazinius triukšmus, kurių fizikinių priežasčių tyrimas yra svarbus matavimo technologijų uždavinys.

Temperatūros matavimų sritis – ITS-90 temperatūros skalė atkurama naudojant gryųjų metalų (Ga, In, Sn, Zn, Al, Ag, Cu) stingimo proceso charakteristikas. Stingimo dinamikos tyrimas yra labai svarbus atkuriant temperatūros vienetą ir perduodant jį žemesnėms metrologinėms grandims. Stingimo temperatūros nustatymui įtakos turi daug faktorių, tarp kurių vienas iš svarbiausių priemaišų kiekis celėje. Numatoma tirti Al ir Ag stingimo dinamiką celėse. Matavimai bus atliekami naudojant turimą kaitinimo ir matavimo įrangą. Šiuo metu pasaulyje vykdomi moksliniai tyrimai pamatinių celių temperatūrų tikslesniam atkūrimui. Šie rezultatai yra patikrinami tarplaboratoriniuose palyginimuose ir galės būti panaudoti programos tikslams pasiekti. Kristalizacijos grafikuose matosi, kad stingstant metalui, vyksta stingimo temperatūros kaita. Ji priklauso nuo sustingusio metalo kiekio, o pastarasis – nuo priemaišų koncentracijos išsilydžiusiame metale. Metalų stingimo temperatūros slinktis yra proporcinga priemaišų koncentracijai. Žinant temperatūros slinktį, galima įvertinti priemaišų koncentraciją metale, o tuo pačiu ir atkuriamos temperatūros tikslumą. Gauti rezultatai yra patikrinami dalyvaujant tarptautiniuose daugiašaliuose tarplaboratoriniuose palyginimuose, kuriuos organizuoja

BIPM ir Euramet.

Esant dideliems temperatūrų intervalams tarp ITS-90 skalės pirminių taškų, tikslumo padidinimui įvedami papildomi antriniai pamatinių temperatūrų taškus. Žemų temperatūrų intervale nuo -189,344°C iki -38,834°C yra tik vienas antrinis taškas, todėl pasaulio etalonų laboratorijos ieško galimybių realizuoti papildomą tašką šiame žemų temperatūrų intervale. Rekomenduojamas vienas iš antrinių pamatinių taškų yra anglies dioksido sublimavimosi taškas esant 1 atm slėgiui, tačiau šio taško atkūrimo technologija neišvystyta. Panaudojus laboratorinę įrangą, buvo sukonstruota CO<sub>2</sub> sublimavimosi temperatūrą atkurianti ir palaikanti sistema su reguliuojamu slėgiu. Esant palankioms aplinkos sąlygoms tyrimų metu gautas kuriamos sistemos tikslumas yra tos pačios eilės kaip ir jau patvirtintų pamatinių celių. Bus toliau atliekami tikslūs absoliutinio slėgio matavimai, paklaidų šaltinių ir konstrukcinių ypatumų tyrimai, perskaičiuojamos ir tikslinamos konstantos, kuriamas celės prototipas ir siekiama patikslinti ITS -90 skalėje rekomenduotą CO<sub>2</sub> sublimavimosi temperatūrą. Siekiant turėti pilną CO<sub>2</sub> sublimavimosi temperatūros perdavimo grandinę, nuo šiuo metu laboratorijoje atkuriamos CO<sub>2</sub> sublimavimosi temperatūros (tikslumas 10-20 mK) iki celės prototipo (tikslumas-0,4mK) bus kuriama CO<sub>2</sub> matavimo sistema EPVT matavimams (tikslumas – 4 mK).

Elektrinių matavimų sritis – FTMC elektros dydžių etalonų sistema koncentruojama apie pirminį nuolatinės įtampos etaloną – Džozefsono įtampos etaloną, antriniais etalonais realizuojant varžos, kintamos įtampos ir srovės stiprio vienetus. Didžiausio tikslumo ir stabilumo etalono – Džozefsono įtampos etalono sistemos vaidmuo yra realizuoti etalonines nuolatinės įtampos vertes 1 V – 10 V ruože bei užtikrinti patikimą antrinių kintamos įtampos ir varžos etalonų funkcionavimą. Numatomais tyrimais siekiama užtikrinti elektros dydžių etalonų tarptautinį ekvivalentiškumą ir efektyvų viso etalonų komplekso panaudojimą.

Jonizuojančiosios spinduliuotės matavimų sritis – Laboratorijoje pradėti diegti pirminiai radionuklidų aktyvumo matavimo metodai taikant  $4\pi$   $\beta$ - $\gamma$  sutapčių proporcinį skaitiklį bei trigubų ir dvigubų sutapčių santykių (TDCR) skaičiavimo įrenginį; vystomi antriniai metodai: gama spektrometrija, jonizacinės kameros su šuliniu. Taikymai: pamatinių medžiagų gamyba; uždaryjū šaltinių, skirtų aukštųjų technologijų pramonei ir medicinai, gamyba; radioaktyviųjų atliekų tvarkymo programos eksploatuojant naujus ir uždarytus (ar uždaromus) branduolinius objektus; branduolinės ir radiacinės saugos sistemų kūrimas. Jonizuojančiosios spinduliuotės matavimų srityje bus tiriamos medžiagos, taikomos beta skilimo metu generuojamų dalelių ir vienalaikių gama kvantų registracijai, kai radioaktyvusis preparatas sukoncentruotas ant plonasluoksnio paviršiaus. Bus tirama, koku laipsniu pagerina matavimų tikslumą skaitmeninės technikos panaudojimas TDCR įrenginio signalų analizei. Taikymai apims tiriant įvairius radionuklidų sklaidos procesus.

Cheminių matavimų srityje: moksliniai tyrimai bus atliekami bendradarbiaujant su kitais FTMC moksliniais padaliniais (Brenduolinių tyrimų skyriumi, Aplinkotyros skyriumi, Organinės chemijos skyriumi, Jonizuojančiosios spinduliuotės metrologijos laboratorija), Gamtinių tyrimų centru (GTC), VUL Santariškių klinikų HOTC, Nacionaline visuomenės sveikatos priežiūros laboratorija (NVSPL), Malmės universitetu ir kt. (pvz. UAB Innovative Pharma Baltic). Moksliniai tyrimai planuojami dviem pagrindinėmis kryptimis, t.y. taikomieji tyrimai skirti chromatografijos ir masių spektrometrijos panaudojimui naujų, patikimų ir tikslių medžiagų analizės metodų sukūrimui, tyrimui bei taikymui medicinoje, farmacijoje ir aplinkosaugoje, bei eksperimentinė plėtra susijusi su cheminių matavimų technologijų inovacija, tobulinant ir kuriant naujų mėginio surinkimo ir įvedimo sistemų prototipus chromatografijai. Turima elementinės analizės įranga (LA-ICP-HRMS, LC-ICP-HRMS, ICP-MS) įranga bus naudojama vienalaikiam elementų formų išskyrimui ir jų izotopų kiekybiniam nustatymui (d-elementai, aktinoidai, retųjų žemių metalai). Sukurti metodai bus pritaikyti aplinkosaugoje atominių elektrinių atliekų charakterizavimui. Nauja tyrimų kryptis – termodesorbcinė dujų chromatografinė analizė (TD-GC-FID ir TD-GC-HRMS) – bus naudojama lakiųjų organinių medžiagų tyrimams dujiniuose mėginiuose (aplinkos oro tyrimai su on-line mėginio paėmimu; markerių, skirtų ankstyvajai aspergiliozės neinvazinei diagnostikai, paieška ir tyrimai imunosupresuotų ligonių iškvėptame ore (metodo sukūrimas, validavimas, mėginių paėmimo sistemos prototipo sukūrimas); lakiųjų organinių junginių pamatinių medžiagų gamyba, panaudojant termodesorbcinius vamzdelius).

## **5. Tyrimų etapai ir jų charakteristika; detalus įgyvendinimo planas:**

5.1. Tarptautinės SI sistemos vienetų atkūrimo technologijų tyrimai (2017–2021 metai) 1 norminis etatas;

- 5.2. Grynujų metalų Al ir Ag stingimo proceso dinamikos celėse tyrimai (2017–2019 metai) 0,4 norminiai etatai;
- 5.3. CO<sub>2</sub> sublimavimosi temperatūros atkūrimo sistemos tyrimai (2017–2020 metai) 0,3 norminiai etatai;
- 5.4. CO<sub>2</sub> matavimo sistemos, pritaikytos EPVT matavimams, kūrimas ir tyrimai (2018–2021 metai) 0,3 norminiai etatai;
- 5.5. Laiko ir dažnio vienetų atkūrimo variacijų ir stabilumo bei UTC(LT) laiko skalės perdavimo technologijų tyrimai (2017–2021 metai) 0,5 norminiai etatai;
- 5.6. Šviesolaidinio UTC(LT) laiko skalės perdavimo realizavimas bei laiko vienetų palyginimas (2018–2021 metai) 0,25 norminiai etatai;
- 5.7. Akustoelektrinių generatorių stabilumo tyrimas bei metrologinių charakteristikų tobulinimas (2017–2020 metai) 0,25 norminiai etatai;
- 5.8. Elektrinės varžos etalono temperatūriniai tyrimai taikant Džozefsono ir Zenerio efektus (2017–2021 metai) 0,5 norminiai etatai;
- 5.9. Zenerio įtampos etalonų charakteristikų prognozavimo metodų kūrimas (2017–2019 metai) 0,2 norminiai etatai;
- 5.10. Drėgmės įtakos Zenerio įtampos etalonų stabilumui tyrimai (2018–2020 metai) 0,2 norminiai etatai;
- 5.11. Elektrinės įtampos etalonų triukšminių charakteristikų tyrimas (2017–2018 metai) 0,1 norminis etatas;
- 5.12. Chromatografijos ir masių spektrometrijos panaudojimas naujų, patikimų ir tikslių medžiagų analizės metodų sukūrimui, tyrimui bei taikymui medicinoje, farmacijoje ir aplinkosaugoje (2017–2020 metai) 0,5 norminiai etatai;
- 5.13. Cheminių matavimų technologijų inovacija, tobulinant ir kuriant naujas mėginio įvedimo sistemas chromatografijai (2017–2021 metai) 0,5 norminiai etatai;
- 5.14. Korekcijų nustatymas branduolinėje medicinoje naudojamų radionuklidų aktyvumui (F-18, Tc-99m, I-123, I-131) matuoti (2017–2021 metai) 0,5 norminiai etatai;
- 5.15. Radionuklidų pernašos iš paviršinės saugyklos į aplinką tyrimas (2017–2019 metai) 0,2 norminiai etatai;
- 5.16. Foninės radionuklidų sudėties pažemio atmosferoje tyrimas prieš paleidžiant Astravo reaktorių (2017–2019 metai) 0,15 norminiai etatai;
- 5.17. TDCR metodo plėtra signalų apdorojimui panaudojant skaitmeninę techniką (2017–2019 metai) 0,15 norminiai etatai.

#### **6. Numatomi rezultatai:**

Programos rezultatai turėtų būti trejopi. Visų pirma, tai – mokslinės publikacijos aukštą reitingą turinčiuose moksliniuose žurnaluose, antra – tarptautiniai ir nacionaliniai projektai, kurie turėtų būti kaip atšakos į tam tikrą kryptį iš šios programos kamieno, ir trečia – prototipai (pvz., naujo tipo mėginio įvedimo sistemos dujų chromatografijai, iškvepiamo oro bandinio paėmimo sistema, uždarieji jonizuojančiosios spinduliuotės šaltiniai), kurie gali turėti savąją vietą aukštųjų technologijų pramonės gaminių ir taikymų rinkoje, o taip pat branduolinės medicinos bei aplinkosauginių technologijų, įskaitant radioaktyviųjų atliekų tvarkymą, srityse.

Bus sukurtas naujas temperatūros etalonas, nauji elektros dydžių bei temperatūros matavimo prietaisai, laiko skalių ir etaloninių dažnių signalų perdavimo metodikos, pamatinių paliudytyjų medžiagų su radionuklidų tirpalais bei stabiliaisiais izotopais gamybos metodikos, nauji lakiųjų organinių junginių koncentracijų ir radionuklidų aktyvumo matavimo metodai, atlikti foniniai tyrimai. Bus sukurtas d- elementų ir retųjų žemių metalų formų vienalaikio išskyrimo ir jų izotopų kiekybinio nustatymo metodas, jis pritaikytas aplinkosaugoje, charakterizuojant branduolinių elektrinių atliekas. Termodesorbcinė dujų chromatografinė analizė bus pritaikyta lakiųjų organinių junginių tyrimams, modernizuotos dujų chromatografijos įvedimo sistemos bei sukurti jų prototipai.

#### **7. Rezultatų sklaidos priemonės:**

Įvertinus programoje dalyvausiančių mokslinių grupių produktyvumą pastaruoju laikmečiu, tikimasi, kad gautųjų rezultatų pagrindu kasmet bus paskelbta vidutiniškai po 4 mokslinius straipsnius prestižiniuose tarptautiniuose moksliniuose žurnaluose su citavimo indeksais, bei perskaityta po 5 mokslinius pranešimus svarbiausiose tarptautinėse konferencijose.

Matavimo galimybių tobulinimo rezultatai bus skelbiami BIPM tinklapyje.

Dėmesys bus skiriamas gautųjų rezultatų sklaidai platesniuose visuomenės sluoksniuose. Bus rašomi populiarūs straipsniai spaudoje, teikiama informacija kitoms žiniasklaidos priemonėms, ja papildoma FTMC internetinė svetainė. Dėstomos paskaitos Vilniaus universitete.

**8. Preliminarus programos lėšų paskirstymas (tūkst. Eur):**

| Eil. Nr. | Išlaidų pavadinimas                                                                                                | 2017 metais | 2018 metais | 2019 metais | 2020 metais | 2021 metais | Visai programai (suma) |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|------------------------|
| 1.       | Programai skirti norminiai etatai, lėšos                                                                           | 6<br>58     | 6<br>58     | 6<br>58     | 6<br>58     | 6<br>58     | 290                    |
| 2.       | Kitos lėšos planuojamos programai vykdyti (iš kitų, institutui skirtų valstybės biudžeto bazinio finansavimo lėšų) | 58          | 58          | 58          | 58          | 58          | 290                    |
|          | Iš viso                                                                                                            | 116         | 116         | 116         | 116         | 116         | 580                    |

**9. Programos trukmė: 2017–2021 metai.**

**10. Programos vadovas:**

Dr. Arūnas Gudelis, vyresnysis mokslo darbuotojas, tel. 8-5 2644 855, 8620 17793,  
arunas.gudelis@ftmc.lt



## MOLEKULINĖ ELEKTRONIKA IR NANOINŽINERIJA

**1. Programos vykdytojas** – Valstybinis mokslinių tyrimų instituto Fizinių ir technologijos mokslų centras (toliau – FTMC).

Norminiai etatai skirti programai – 34.

**2. Programos tikslai:**

2.1. Molekulinės elektronikos ir nanoinžinerijos fundamentinių pagrindų ir technologinių principų vystymas,

2.2. Mokslinės terpės naujų funkcinių organinių medžiagų sintezei ir fizikocheminių savybių charakterizavimui sukūrimas, mokslinės kompetencijos molekulinės elektronikos, sensorikos, nanomokslo ir nanotechnologijų srityje ugdymas bei mokslinių pagrindų kūrimas ir jų taikymas pažangių technologijų plėtrai. Aukšto tarptautinio lygio moksliniai tyrimai ir eksperimentinė plėtra bei aukštos kompetencijos palaikymas deklaruotoje mokslo srityje.

**3. Programos uždaviniai:**

3.1. Fundamentinių tyrimų srityje bus atliekami aukščiausio lygio organinių ir kompozicinių molekulinų darinių homogeninėse ir heterogeninėse terpėse tyrimai, pasitelkiant modernius elektrocheminius, chromatografinius ir spektroskopinius metodus, vystomi molekulinės inžinerijos, cheminės inžinerijos ir nanotechnologijų principai. Bus vystomi teoriniai vyksmų ir medžiagų savybių aprašymo ir tyrimo metodai. Šiais tyrimais siekiama prisidėti prie geresnio reiškinių ir medžiagų savybių supratimo, kelti darbuotojų kompetenciją, norint sukurti gerai techniškai aprūpintą molekulinės fizikos ir technologijų centrą, galintį spręsti Lietuvai ir pasauliui aktualius molekulinės elektronikos, cheminių technologijų ir nanoinžinerijos problemas.

3.2. Taikomųjų tyrimų srityje – bus kuriamos naujos organinės medžiagos, pasižyminčios molekulinei elektronikai ir nanotechnologijoms svarbiomis savybėmis, bus tobulinamos molekulinų struktūrų formavimo technologijos ir nanotechnologijos. Tuo būdu bus siekiama sukurti mokslinės kompetencijos ir technologijų bazę, kuri turėtų tapti atspirties tašku naujų įmonių kūrimui ir jų veiklos palaikymui, suteikiant sudėtingų ir brangių tyrimų paslaugas.

3.3. Eksperimentinės plėtos srityje bus vykdomi Lietuvos ir užsienio ūkio subjektų užsakomieji darbai organinės sintezės srityje, atliekami gamtinių ir organinių medžiagų mišinių chromatografinės analizės užsakomieji projektai. Bus vystomi spektroskopiniai, elektrocheminiai tyrimo metodai bei tobulinama šiems tikslams reikalinga įranga. Bus kuriami molekulinės elektronikos ir sensorikos elementai, mazgai ir prietaisai. Naujų organinių ir bioorganinių molekulinų darinių pagrindu bus kuriamos naujos elektrokatalizės sistemos, konstruojami jutikliai ir biojutikliai, vystomi pavienių ląstelių analizės ir modifikavimo įrenginiai, tinkami molekulinei optoelektronikai skirtų medžiagų charakterizavimui.

**4. Metodologinis tyrimų pagrindimas:**

Ateities gamybos perspektyvos yra siejamos su organinėmis medžiagomis, nanotechnologijomis ir biotechnologijomis. Esminis šių gamybos technologijų privalumas – tai mažesnės energijos sąnaudos ir mažesnis kenksmingumas aplinkai. Tačiau šios naujos sritys reikalauja intensyvių mokslinių tyrimų, naujų pažangių tyrimo metodų, aukštesnės tyrimų ir jų pagrindų kuriamos gamybos būdų kultūros ugdymo, bei įgūdžių nanomokslų ir nano- bei biotechnologijų srityse. Vienu svarbiausių faktorių, stabdančių naujo tipo organinėmis medžiagomis ir nanotechnologijomis pagrįstų įmonių kūrimąsi Lietuvoje, kompetetingų šioje srityje žmoniškųjų išteklių stoka, bei reikiamos mokslinės-inžinerinės bazės trūkumas. Išvysčius plačius mokslinius tyrimus molekulinės elektronikos ir nanotechnologijos srityse, kartu būtų ugdomi žmoniškieji ištekliai, tinkantys šioms naujoms gamybos sritims vystyti. Kadangi darbo pobūdis šiose naujose nanotechnologijų srityse yra artimas moksliniam darbui, beveik vieninteliu darbo išteklių šaltiniu tokiai gamybai turėtų tapti mokslinis ir techninis personalas, atliekantis mokslinius tyrimus ir turintis atitinkamus darbo

įgūdžius. Pastaraisiais metais buvo vykdomi įvairūs projektai, kurie leido praplėsti reikiamą mokslinį potencialą, o atsiradę nauji cheminiai dariniai (pvz., hibridiniai perovskitai) atveria naujas taikymo perspektyvas fotovoltaike ir saulės energetikoje. Pažymėtina, jog ši kryptis yra intensyviai vystoma ir Europos mastu, pastaruoju metu šioje kryptyje yra inicijuojami labai dideli projektai, angliškai vadinami *flagship*. Gautos žinios taip pat atveria naujas taikymo perspektyvas biotechnologiniuose tyrimuose, medicinoje bei suteikia galimybę vykdyti užsakomuosius organinių medžiagų sintezės darbus.

Tyrimo metodų vystymas bus vykdomas keliomis kryptimis:

4.1. bus siekiama sukurti kuo platesnio medžiagų ir vyksmų charakterizavimo kompleksą, bei įsisavinti teorinius tyrimų metodus, leidžiančius kuo visapusiškiau charakterizuoti tiriamas medžiagas, bei vyksmus jose. Šiam tikslui jau yra įsigyta eilė rutininių matavimo prietaisų tokių kaip sugerties, liuminescencijos, Ramano sklaidos spektrometrai, optiniai, ir fluorescenciniai mikroskopai, elektriniai signalų generatoriai, oscilografai. Kartu bus siekiama tobulinti ir įsisavinti naujus elektrocheminius tyrimo metodus ir pritaikyti juos naujiems uždaviniams spręsti. Bus taip pat tobulinama gamtinių organinių medžiagų ir jų mišinių kiekybinė ir kokybinė analizė, naudojant pažangias chromatografijos – masių spektrometrijos metodikas. Bus taip pat naudojami jau įsigyti ir sukomplektuoti kinetinių vyksmų charakterizavimo prietaisai tokie, kaip fluorescencijos kinetikų matavimo spektrometrai, krūvininkų dinamikos charakterizavimo kompleksas, Saulėtekio Slėnio programos rėmuose įsigytų šiuolaikinių molekulinų struktūrų bei prietaisų eksperimentinės gamybos įrenginių. Tai sukuria palankias sąlygas vykdyti naujų struktūrų formavimo ir tobulinimo darbus.

4.2. Bus siekiama įsigyti ir panaudoti pažangiausius pasaulyje, eksploatuojamus tik nedaugelyje mokslo laboratorijų siauros srities prietaisus ar jų kompleksus ir išvystyti unikalius tyrimo metodus, suteikiančius galimybę užimti lyderio pozicijas tam tikrose siaurose mokslo srityse. Šiuo metu pagrindiniai iš struktūrinių fondų lėšų yra instaliuoti tokie prietaisai, kaip ultrasparti optinė skleidžiančioji kamera (*streak camera*), dvimatės koherentinės optinės spektroskopijos kompleksas, itin jautrus Ramano spektrometras su įvairių bangos ilgių šviesos šaltiniais, pavienių molekulių fluorescencijos spektrometras, išvystyta ultrasparti krūvininkų dreifo tyrimo metodika. Šie prietaisai suteikia galimybę vystyti pažangiausius tyrimo metodus, ir įsiliesti į fundamentinius ir taikomuosius priešakinio fronto tyrimus. Bus siekiama sukurti ar tobulinti naujus Ramano spektroskopijos ir spektroelektrocheminius metodus, paremtus šviesolaidinės optikos naudojimu. Bus kuriami nauji pasauliniu mastu *in situ* Ramano spektroelektrocheminiai metodai ir taikomi naujoms elektrokatalizės sistemoms kurti. Bus įsisavinamos ir taikomos fazių skyrimo ribai tirti įvairios virpesių spektroskopijos rūšys, tokios, kaip paviršiaus plazmono rezonanso spektroskopija. Bus kuriamos nanotechnologijomis pagrįstos eksperimentinės metodikos, svarbios šios srities tyrimams. Per pastaruosius keletą metų buvo sukurta regione unikali bazė, kuri suteikia plačias galimybes konstruojant mikro bei nanoskopinių matmenų darinius ir prietaisus. Skenuojančio zondo nanolitografijos platformos, kurios Europoje yra mažai prieinamos.

4.3. Bus vystoma cheminės technologijos bazė, atsižvelgiant į ūkio subjektų užsakymus, vystomi nauji cheminės sintezės metodai siekiant patenkinti platesnį užsakymų ratą. Nanoinžinerijos skyriuje buvo sėkmingai išstobulintos ir pritaikytos molekulinų darinių *in situ* sintezei, valdomam savaiminiam susirinkimui, biofizikiniams ląstelės membranos tyrimams. Kiti valdoma medžiagos pernaša ir nanochemija pagrįsti eksperimentiniai metodai ypač tinka dirbtinių ir hibridinių biomedžiagų, biologinių ir cheminių lustų konstravimui. Pradėti unikalių preitaisų projektavimo ir konstravimo darbai, kurie išplečia galimybes pasiteisinusius eksperimentinius rezultatus perkelti į prototipų kūrimą ir bandomąją gamybą. Kartu su Šveicarijos EPFL mokslininkais jau yra įkurta ląstelių nanobiotechnologijos laboratorija, kurioje kuriami nanoutikliai pavienių ląstelių bioanalizei ir diagnostikai. Pabrėžtina, kad nanoinžinerijos eksperimentinės metodikos bei tyrimų bazė tinka tiek fundamentiniams tyrimams, tiek taikomiems verslo subjektų darbams, todėl paslaugas reguliariai užsako mažosios ir vidutinės įmonės, tarptautinės kompanijos, klinikos, ir kt. Todėl kito programos etapo uždavinys yra išlaikyti pirmavimą naujausių nanoinžinerijos platformų kūrime, jas pritaikyti molekulinės elektronikos, biofizikos, nanobiotechnologijų tyrimams. Planuojama dalį eksperimentinių metodikų perkelti į kontroliuojamos švaros zonas Saulėtekio NFTMC, kad jos ilgainiui dar labiau atitiktų Lietuvos ir tarptautinių partnerių bei verslo subjektų poreikius. Šie tyrimai priklauso šiuo metu intensyviai pasaulyje vystomoms tyrimų kryptims, kurios tiesiogiai taikytinos kuriant naujas nanobiotechnologijas. Lietuvoje artimų kryptų darbai buvo ir tebėra

vykdomi FTMC kamieniniuose padaliniuose - Fizikos ir Chemijos institute, bei kitose mokslo įstaigose, kaip antai Vilniaus universiteto Biochemijos institute, Fizikos ir Chemijos fakultetuose. Šios krypties mokslinį potencialą sustiprino keletas iš užsienio grįžusių mokslininkų: R. Valiokas, M. Gavutis, R. Pauliukaitė, D. Abramavičius, D. Rutkauskas, R. Augulis.

### **5. Tyrimų etapai ir jų charakteristika; detalus įgyvendinimo planas:**

5.1. Nanodimensinių struktūrizuotų organinių ir metalokompleksinių sluoksnių ant metalų paviršių sudarymo metodų paieška ir tobulinimas – darbai bus vykdomi 1-2 programos metais.

5.2. Nestandartinių nanolitografijos metodų sukūrimas – darbai bus vykdomi 3-5 programos metais.

5.3. Elektrocheminės polimerizacijos ant elektrodų tyrimas, siekiant gauti naujų laidžiųjų ir redoks aktyvių polimerų plonus sluoksnius – darbai bus vykdomi 1-3 programos metais.

5.4. Savitvarčių molekulių ir polimerizuotų sluoksnių savybių tyrimas moderniais elektrocheminiais ir spektriniais metodais – darbai bus vykdomi 3-5 programos metais.

5.5. Elektrodinių ir elektrokatalizės procesų, vykstančių ant modifikuotų elektrodų, tyrimas, ypač siekiant identifikuoti procesus, potencialiai turinčius taikomąją vertę – darbai bus vykdomi 3-5 programos metais.

5.6. Jutiklių ir biojutiklių, paremtų procesais, vykstančiais ant modifikuotų elektrodų, kūrimas – darbai bus vykdomi 1-3 programos metais.

5.7. Elektroninių vyksmų molekulinei elektronikai skirtose medžiagose tyrimai įgalinantys organinių šviestuvų, saulės elementų ir kitų organinės elektronikos prietaisų plėtrą – darbai vykdomi 3-5 programos metais.

5.8. Elektroninių vyksmų nanostruktūrose modeliavimas – darbai bus vykdomi visą programos laikotarpį.

5.9. Lietuvos ir užsienio subjektų užsakovieji darbai organinės sintezės srityje – darbai bus vykdomi visus 5 programos vykdymo metus, nuolat atsirandant naujiems užsakymams.

5.10. Organinių medžiagų mišinių ir medžiagų gamtiniuose (daugiausia augaliniuose) objektuose chromatografinė analizė – darbai bus vykdomi visą programos vykdymo laikotarpį, derinant juos su suinteresuotomis institucijomis.

### **6. Numatomi rezultatai:**

Programos rezultatai turėtų būti trejopi. Visų pirma, tai mokslinės publikacijos aukštą reitingą turinčiuose moksliniuose žurnaluose, antra, tarptautiniai ir nacionaliniai projektai, kurie turėtų būti kaip atšakos į tam tikrą kryptį iš šios programos kamieno, ir trečia, prototipai (pvz, nanojutikliai, organinės elektronikos elementai), kurie gali turėti savąją vietą aukštųjų technologijų pramonės gaminių ir taikymų rinkoje.

Tikimasi sukurti naujus molekulinės elektronikos prietaisus ir sistemas, išvystyti naujus vyksmų zondavimo ir kontroliavimo metodus.

Eksperimentinės plėtros srityje – bus sukurtos ar patobulintos naujos organinių junginių sintezės schemas ir pagal jas atliktos užsakomosios sintezės Lietuvos ir užsienio ūkiniams subjektams, bus atliktos įvairių gamtinių objektų organinių komponentų analizė. Planuojama sukurti bent 1-2 naujas nanogamybos technologijas, kurios bus siūlomos verslo ir kitoms institucijoms per FTMC atviros prieigos centrą BALTFAB ([www.baltfab.lt](http://www.baltfab.lt)). Planuojama pateikti 2-3 patentines paraiškas sukurtų išradimų apsaugai (rodiklis pagrįstas, kadangi toks skaičius Europos patentinių paraiškų buvo pateiktas per praeitą programos etapą). Priklausomai nuo šių išradimų komercinio potencialo, galimas naujos įmonės įsteigimas, arba naujos bendradarbiavimo sutartys su veikiančiomis Lietuvos arba užsienio aukštųjų technologijų įmonėmis.

### **7. Rezultatų sklaidos priemonės:**

Įvertinant programoje dalyvausiančių mokslinių grupių ligšiolinį produktyvumą galima tikėtis, kad gautųjų rezultatų pagrindu kasmet turėtų būti paskelbta ne mažiau kaip 15–20 mokslinių straipsnių prestižiniuose tarptautiniuose moksliniuose žurnaluose, bei perskaityta ne mažiau kaip po 10 mokslinių pranešimų svarbiausiose tarptautinėse konferencijose. Be to bent penki mokslininkai iš programoje dalyvausiančių grupių skaitytų paskaitas Vilniaus universitete, todėl nauji moksliniai rezultatai papildys

esamas studijų programos; studentams bus pasiūlyti nauji, šiuolaikinės mokslo ir technikos tendencijas atspindintys laboratoriniai darbai.

Didelis dėmesys bus skiriamas gautųjų rezultatų sklaidai platesniuose visuomenės sluoksniuose. Tam tikslui bus rašomi populiarūs straipsniai spaudoje, teikiama informacija kitoms žiniasklaidos priemonėms, ja papildoma FTMC internetinė svetainė.

**8. Preliminarus programos lėšų paskirstymas (tūkst. Eur):**

| Eil. Nr. | Išlaidų pavadinimas                                                                                                | 2017 metais | 2018 metais | 2019 metais | 2020 metais | 2021 metais | Visai programai (suma) |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|------------------------|
| 1.       | Programai skirti norminiai etatai, lėšos                                                                           | 34<br>326   | 34<br>326   | 34<br>326   | 34<br>326   | 34<br>326   | 1630                   |
| 2.       | Kitos lėšos planuojamos programai vykdyti (iš kitų, institutui skirtų valstybės biudžeto bazinio finansavimo lėšų) | 326         | 326         | 326         | 326         | 326         | 1630                   |
|          | Iš viso                                                                                                            | 652         | 652         | 652         | 652         | 652         | 3260                   |

**9. Programos trukmė:** 2017–2021 metai.

**10. Programos vadovas:**

Prof., habil.dr. Leonas Valkūnas, vyriausiasis m.d., tel.: 869844472; leonas.valkunas@fmtc.lt

**NANOSTRUKTŪRIZUOTOS MEDŽIAGOS IR ELEKTRONIKOS PRIETAISAI**

**1. Programos vykdytojas** – Valstybinis mokslinių tyrimų instituto Fizinių ir technologijos mokslų centras (toliau – FTMC).

Norminiai etatai skirti programai – 34.

**2. Programos tikslai:**

2.1. Kurti ir tirti naujas nanostruktūrizuotas medžiagas šiuolaikiniams elektronikos ir spintronikos prietaisams.

2.2. Šių medžiagų pagrindu kurti naujus elementus elektronikos ir spintronikos prietaisams bei naujos kartos elektronikos įtaisus.

**3. Programos uždaviniai:**

3.1. Sukurti nanostruktūrizuotų medžiagų bei jų darinių iš feromagnetinių ir metalo oksidų, Heuslerio lydinių, aukštatemperatūrių superlaidininkų, elektrai laidžių puslaidininkinių polimerų bei baltymų gamybos/auginimo technologijas. Šio uždavinio vykdymo metu bus sukurtos šių medžiagų bei darinių iš jų gamybos technologijos:

3.1.1. feromagnetikų (nanostruktūrizuoti manganitų  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}(\text{Ca})_x\text{Mn}_{1+y}\text{O}_3$ , kobaltitų  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Mn}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_3$  ir kt.), panaudojant impulsinį injekcinį cheminį nusodinimą iš metaloorganinių junginių garų fazės (PI MOCVD) ir impulsinį lazerinį nusodinimą (PLD);

3.1.2. Heuslerio junginių ir metalų oksidų ( $\text{Co}_2\text{MnSi}$ ,  $\text{MgO}$  ir kt.), panaudojant magnetroninį dulklinimą (MS) ir PLD;

3.1.3. aukštatemperatūrių superlaidininkų (didelio tankio prilipimo (piningo) centrų Y-Ba-CuO sluoksniai), panaudojant PI MOCVD ir PLD;

3.1.4. įvairiatarpių puslaidininkinių darinių ( $\text{A}_3\text{B}_5$  puslaidininkinių), panaudojant skystinę epitaksiją;

3.1.5. elektrai laidžių ir puslaidininkinių polimerų, biologinių struktūrų, atkartojančių dirbtinius analogus (bio-inspired) (tokių kaip pirolas ir kt.), panaudojant cheminę ir biogeninę polimerizaciją;

3.1.6. baltymų (daugiasluoksniai nanodariniai iš proteinų), panaudojant biocheminę imobilizaciją ant nanometrinių metalų sluoksnių ir savitvarkių monosluoksnių.

3.2. Ištirti nanostruktūrizuotų sluoksnių iš feromagnetinių oksidų, Heuslerio junginių ir lydinių bei aukštatemperatūrių superlaidininkų elektrines ir magnetines savybes, siekiant juos panaudoti magnetinio lauko jutiklių bei matuoklių, magnetinių tunelinių jungčių ir sparčiųjų elektroninių jungiklių prototipų kūrimui. Šio uždavinio vykdymo metu bus atlikta:

3.2.1. Išaugintų sluoksnių bei nanodarinių iš jų cheminės sudėties, morfologijos bei struktūros tyrimai, panaudojant Rentgeno spindulių difrakcijos (XRD), Rentgeno spinduliais sužadintų fotoelektronų spektroskopijos (XPS), skenuojančios elektronų mikroskopijos (SEM), peršviečiamosios elektronų mikroskopijos (TEM), elektronais sužadintų Rentgeno spindulių dispersijos (EDX), didelės energijos atspindžio elektronų difrakcijos (RHEED), induktyviai sužadinamos plazmos masių spektrometrijos metodus (ICP-MS);

3.2.2. Ištirtas nanostruktūrizuotų manganitų ( $\text{La}_{1-x}\text{Sr}(\text{Ca})_x\text{Mn}_{1+y}\text{O}_3$ ) ir kobaltitų ( $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Mn}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_3$ ) plonųjų sluoksnių morfologijos bei mikrostruktūros sąryšis su elektrinėmis sluoksnių savybėmis stipriuose impulsiniuose elektriniuose ir magnetiniuose laukuose, ištirti elektrovaržos, magnetovaržos bei magnetovaržos anizotropijos reiškinių ir magnetinės atminties efektų ypatumai, atliktas krūvio pernašos mechanizmų bei fizikinių ir cheminių procesų, vykstančių nanodarinių tarpfazinėse srityse, skaitinis modeliavimas ir eksperimentinių rezultatų analizė;

3.2.3. Ištirtos sluoksnių iš Heuslerio junginių ir metalų oksidų ( $\text{Co}_2\text{MnSi}$ ,  $\text{MgO}$  ir kt.) elektrinės ir magnetinės savybės, jų darinių su dielektriniu barjeru tunelinė magnetovarža;

3.2.4. Ištirta superlaidžių polikristalinių Y-Ba-CuO sluoksnių ant CeO pasluoksnio morfologija ir struktūra, elektrinės ir magnetinės savybės, nustatytos krizinių srovių ir temperatūrų priklausomybės nuo struktūros bei sluoksnių storio, atlikta piningo centrų sluoksnyje analizė.

3.2.5. Skaliarinių magnetinio lauko ir srovės jutiklių ir matuoklių prototipų kūrimas, eksperimentiniai tyrimai laboratorinėse ir eksploatacijos sąlygose, panaudojant plonuosius

nanosruktūrizuotus manganitų ir kobaltitų sluoksnius;

3.2.6. Tunelinių magnetinių jungčių iš Heuslerio lydinių prototipų kūrimas ir tyrimai;

3.2.7. Sparčiųjų elektroninių jungiklių, skirtų apsaugai nuo elektromagnetinio impulso, prototipų kūrimas, panaudojant YBCO superlaidininkų plonuosius polikristalinius sluoksnius.

3.3. Sukurti naujus mikrobangų registravimo metodus ir sistemas, panaudojant puslaidininkinius nanodarinius iš A3B5 medžiagų ir anglies darinių Vykdanč šį uždavinį bus:

3.3.1. išnagrinėtos skaitinio modeliavimo metodais įvairių puslaidininkinių darinių ir anglies darinių savybės;

3.3.2. sukurtos nanosruktūrizuotų medžiagų įvairių puslaidininkinių darinių ir anglies darinių pagrindu gamybos technologijos;

3.3.3. sukonstruotas hibridinis darinys, integruojant plonasluoksnį nesimetriškai susiaurintą darinį su auto persijungiančiu diodiniu dariniu;

3.3.4. sukurta originali mikrobangų diodo konstrukcija lauko tranzistoriaus pagrindu;

3.3.5. ištirtas eksitoninės spinduliuotės sustiprėjimas homogeniniuose ir heterogeniniuose puslaidininkiniuose dariniuose;

3.3.6. sukurta varizoninių bei įvairių  $Al_xGa_{1-x}As$  darinių ant tekstūruoto padėklo auginimo technologija;

3.4. Ištirti nepusiausvyrinių krūvininkų dinamiką puslaidininkiniuose nanodariniuose, pagamintuose iš A3B5 medžiagų, siekiant pagerinti elektronikos prietaisų (infraraudonosios ir matomos šviesos detektorių, tranzistorių ir kt.), našumą ir spartą. Vykdanč šį uždavinį bus:

3.4.1. kuriami teoriniai krūvininkų generavimo ir kaitimo, fotoįtampos impulsų susidarymo modeliai, lyginami su eksperimentiniais rezultatais;

3.4.2. tiriami skirtingo draudžiamosios energijos tarpo puslaidininkų – GaAs, AlGaAs, GaInAs – dariniai;

3.4.3. tiriami skirtingo legiravimo laipsnio ir skirtingo aktyvaus sluoksnio storio dariniai;

3.4.4. analizuojami fotoįtampos susidarymo ypatumai esant įvairaus spektro bei intensyvumo žadinančiajai lazerinei spinduliuotei;

3.5. Ištirti nanolaminatų, savitvarkių monosluoksnių, daugiasluoksnių nanosruktūrų iš baltymų ir elektrai laidžių polimerų, skirtų biologiniams jutikliams, struktūrines, optines bei elektrines savybes. Šio uždavinio vykdymo metu bus atliekami tokie tyrimai:

3.5.1. baltymų sąveikos kinetikos tyrimai spektroskopinės elipsometijos metodu (afiniškumo konstantų nustatymas, sluoksnių formavimosi kinetikos modelių kūrimas) panaudojant spektroskopinius elipsometrus, Ramano spektroskopijos įrangą, moduluota infraraudonojo atspindžio-adsorbcijos poliarizuotoji spektroskopija (Polarization modulation-infrared reflection-adsorption spectroscopy PM-IRRAS);

3.5.2. nanolaminatų bei 3D nanosruktūrizuotų ZnO/Au nanometrinių matmenų darinių plazmonikai bei optiniams biojutikliams tyrimai (biomolekulių orientacijos įtaka šviesos poliarizacijos būsenai, nanolaminatų iš ZnO sluoksnių fotoluminescencija) panaudojant TEM, SEM, Rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) įrangą, spektroskopinius elipsometrus;

3.5.3. įvairių organinių molekulių (pvz. DHICA/Au) formavimosi ant grafito bei metalų paviršių teoriniai tyrimai (naudojant tankio funkcionalo ir Monte Karlo metodus) bei feroelektrinių fazinių virsmų metalo organinėse sistemose (MOFs) Monte Karlo modeliavimas.

3.6. Sukurti naujas biologinių nanosruktūrų (ląstelių sienelių ir membranų) permeabilizacijos elektriniais ir magnetiniais impulsais technologijas, siekiant išvystyti modernius maisto apdorojimo ir medicinos metodus. Šio uždavinio vykdymo metu bus atliekami tokie tyrimai:

3.6.1. mielių permeabilizacijos tyrimai (sienelių barjerinių savybių atstatymas po permeabilizacijos, magnetiniu lauku indukuotos permeabilizacijos prigimtis, netemperatūrinė pasterizacija) panaudojant ms-ns trukmės elektrinių impulsų generatorius, ns trukmės magnetinio lauko generatorius, fluorescencinę mikroskopiją, jonų koncentracijos matuoklius;

3.6.2. viduląstelių signalų raiškos tyrimai (programuojama ląstelių žūtis, reaktyvios deguonies formų susidarymo mechanizmai) panaudojant genų inžinerijos metodus, spektrofotometrijos įrangą;

3.6.3. biogeniškai susintetinto polipirolo struktūros, cheminės sudėties ir elektrinių savybių tyrimai (darinių iš biogeniškai susintetinto polipirolo formos tyrimai, elektrinis laidumas mikrobangų ruože, sienelių, modifikuotų polimeru, mechaninės savybės), panaudojant optinės ir elektroninės mikroskopijos įrangą, mikrobangų adsorbcijos ir atspindžio metodus, Rentgeno spinduliais sužadintų fotoelektronų spektroskopijos (XPS) įrangą;

3.6.4. magnetinių  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ /polipirolas nanodalelių citotoksiškumo tyrimai (sintezė, struktūra, toksiškumas), panaudojant TEM, SEM įrangą, įmagnetėjimo tyrimo aparatūrą, biocheminiai metodai, šviesinę mikroskopiją.

Šio uždavinio vykdymo metu taip pat numatoma: kurti saugias, naujas ir energiją tausojančias kenksmingų mikroorganizmų kontrolės, bei valdymo priemones ląstelių elektroporacijos pagrindu; kurti viduląstelių biologinių nanostruktūrų permeabilizacijos technologijas vaistų pristatymo dozavimui.

#### **4. Metodologinis tyrimų pagrindimas; detalus įgyvendinimo planas:**

Tyrimams bus naudojama FTMC mokslinė aparatūra bei unikali įranga ir metodikos:

4.1. patobulinta impulsinio injekcinio cheminio nusodinimo iš metaloorganinių junginių garų fazės (PI MOCVD) įranga manganitų, kobaltitų ir aukštatemperatūrinių superlaidininkų sluoksnių auginimui;

4.2. pritaikyti pagal numatomus poreikius pastoviosios ir kintamos srovės magnetroninio dulkinimo įrenginiai Heuslerio junginių, metalizuotų struktūrų formavimui, tauriųjų metalų (aukso, sidabro) užnešimui ant nanolaminatų bei jų 3D nanostruktūrizuotų darinių;

4.3. impulsinio lazerinio nusodinimo (PLD) įrenginys manganitų, kobaltitų bei Heuslerio junginių auginimui;

4.4. atominių jėgų mikroskopas nanostruktūrizuotų sluoksnių paviršiaus analizei;

4.5. rentgeno spindulių difrakcijos (XRD), Rentgeno spinduliais sužadintų fotoelektronų spektroskopijos (XPS), skenuojančios elektronų mikroskopijos (SEM), peršviečiamosios elektronų mikroskopijos (TEM), didelės energijos atspindžio elektronų difrakcijos (RHEED) įranga nanostruktūrizuotų junginių morfologijos ir struktūros tyrimams;

4.6. rentgeno spinduliais sužadintų fotoelektronų spektroskopijos (XPS), elektronais sužadintų Rentgeno spindulių dispersijos (EDX) ir induktyviai sužadinamos plazmos masių spektrometrijos (ICP-MS) įrenginiai nanostruktūrizuotų junginių cheminės sudėties tyrimams;

4.7. spektriniai elipsometrai, spektrofotometrai, įvertinantys optinio atsako sklaidą, infraraudonosios srities Furje spektrofotometras, moduluotos infraraudonosios atspindžio-adsorbcijos poliarizuotosios spektroskopijos įranga nanolaminatų ir plazmoninių darinių optinio atsako charakterizavimui;

4.8. plonųjų sluoksnių ir darinių iš jų elektrinio laidumo tyrimų nuolatiniuose magnetiniuose laukuose iki 2,3 T ir kompaktinis stipraus impulsinio magnetinio lauko šaltinis (iki 40 T);

4.9. skysto helio kriostatas plonųjų sluoksnių ir darinių iš jų elektrinio laidumo tyrimams 4,2-313 K temperatūrų ruože;

4.10. nanosekundinių didelės galios elektrinių laukų generavimo ir registravimo įranga, skirta greitaveikių elektroninių procesų nanostruktūrizuotuose dariniuose tyrimams;

4.11. biologinių ląstelių mikrosekundžių trukmės elektrinių impulsų generatoriai kartu su peristaltiniais siurbliais ir FTMC sukurtomis elektroporacijos celėmis;

4.12. tetrafenilfosfonio jonų koncentracijos matavimo ir programinė įranga, optinė ir fluorescencinė mikroskopija; mikroorganizmų kultivavimo įranga;

4.13. biologinių ląstelių bei viduląstelių organelių elektroporacijos tyrimams nanosekundinės trukmės elektrinių impulsų generavimo ir registravimo stendas, leidžiantis paveikti ląsteles iki kV amplitudės ns -  $\mu$ s trukmės įtampos impulsais;

4.14. reporterinių genų raiškos tyrimų metodai (genų inžinerija ir spektrometrija). Optinė mikroskopija bei besisukančio disko konfokalinė mikroskopija. Bus bendradarbiaujama su Vilniaus universiteto botanikos ir genetikos katedra bei su Paryžiaus Dekarto universitetu (Université Paris Descartes);

4.15. tauriųjų metalų (aukso, sidabro) užnešimas ant nanolaminatų bei 3D nanostruktūrizuotų darinių magnetroninio dulkinimo metodu (Nanolaminatų gamybą atlieka partneriai Prancūzijoje).

4.16. skystinės epitaksijos įranga, molekulinį pluoštelių epitaksijos įranga puslaidininkinių  $\text{A}_3\text{B}_5$  medžiagų ir jų nanodarinių formavimui;

4.17. lazerinė nanosekundžių trukmės impulsų tolimosios ir artimosios infraraudonosios spinduliuotės įranga: impulsinis pasyvios kokybės moduliacijos  $\text{CO}_2$  lazeris, Nd:YAG lazeris (impulso trukmė 25 ns);

4.18. unikali puslaidininkinių darinių gamybos (fotolitografija, ėsdinimas) įranga;

4.19. spausdinto montažo plokščių projektavimo, elektroninių schemų modeliavimo, mikrovaldiklių programavimo įranga;

4.20. spausdinto montažo plokščių greito paruošimo (rapid prototyping) įranga;

4.21. spartieji (iki 16 GHz) realaus laiko oscilografai nanostruktūrizuotų medžiagų ir jų darinių dinaminį procesų tyrimams.

Vykdamas programos tikslus ir uždavinius, bus remiamasi ilgamete programos vykdytojų mokslinių tyrimų patirtimi. Vykdamas 3.1 ir 3.2 papunkčiuose nurodytus programos uždavinius, bus tęsiamas manganitų ir superlaidininkų sluoksnių bei jų darinių auginimo technologijų vystymas, bei vykdomas naujų didesnio magnetinio jautrio kobaltitų sluoksnių gamybos technologijų kūrimas, siekiant valdyti jų saviformavimo būdu susidariusias nanostruktūras ir su jomis susijusias elektrines bei magnetines savybes. Taip pat bus vykdomi naujų medžiagų paieškiniai tyrimai, pvz., Heuslerio lydinių, kurie anksčiau FTMC nebuvo auginami. Heuslerio junginiai, žymimi apibendrintomis formulėmis XYZ ir X<sub>2</sub>YZ jungia gausią grupę medžiagų, kurių elektrines ir magnetines savybes galima keisti plačiose ribose priklausomai nuo jų cheminės sudėties. Junginiai, kurių sudėtyje yra magnetiniai jonai (Fe, Co, Mn, Ni) pasižymi didele magnetinių, magnetooptinių ir magnetoelektrinių savybių įvairove. Spintronikos taikymams ypač svarbūs elektrai laidūs feromagnetiniai junginiai, pasižymintys aukštomis Kiuri temperatūros vertėmis ( $T_C \gg 300K$ ), kuriuose krūvininkų sukiniai yra orientuoti vidinio magnetinio lauko kryptimi. Numatoma sukurti Heuslerio junginių plonųjų sluoksnių ir daugiasluoksnių darinių technologiją, siekiant valdyti šių medžiagų elektrines ir magnetines savybes ir panaudoti jas kaip elektrodus magnetinėse tunelinėse jungtyse. Pagrindinė technologinė problema – sukurti sluoksnius ir darinius, pasižyminčius aukštomis Kiuri temperatūros vertėmis ir dideliu krūvininkų magnetinės poliarizacijos laipsniu. Svarbiausias Heuslerio lydinių tyrimų tikslas yra pagaminti planarines magnetines tunelines jungtis (MTJ), kurių elektrodai būtų feromagnetiniai Co-Mn pagrindu sudaryti Heuslerio junginių (X<sub>2</sub>YZ) sluoksniai, o tunelinio barjero gaminimui būtų panaudoti ultraplonieji dielektrinių oksidų (pvz., MgO) sluoksniai. Numatoma sukurti technologijas, įgalinančias pagaminti tokias MTJ struktūras, kurios kambario temperatūroje pasižymėtų didelėmis tunelinės magnetovaržos vertėmis, esant silpniems ( $B < 10$  mT) magnetiniams laukams.

Vykdamas programos 3.1 ir 3.2 papunkčiuose nurodytus uždavinius bus laikomasi šios metodologinės tyrimų sekos:

nanostruktūrizuotų medžiagų ir struktūrų gamybos technologijos metodų kūrimas ir išvystymas; šių medžiagų ir struktūrų savybių eksperimentinis tyrimas; fizikinių reiškinių naudojamų elektronikos prietaisų kūrimui mechanizmų išaiškinimas ir teorinis modeliavimas; elektroninių prietaisų elementų ir jų gamybos technologijų kūrimas bei elektronikos įtaisų, naudojančių šiuos elementus, kūrimas, prototipavimas, jų testavimas bei rinkos galimybių išaiškinimas.

Vykdamas programos 3.3 papunktyje nurodytą uždavinį, bus laikomasi šios metodologinės tyrimų sekos:

modeliuojami kuriamų elektroninių darinių elektriniai parametrai, pasitelkiant tiek analitinius, tiek skaitmeninius šių parametų skaičiavimo metodus; teoriniams grafeno tyrimams ketinama pritaikyti naują matematinį aparatą, taip vadinamą geometrinę algebrą;

suprojektuoti dariniai bus auginami, pasitelkiant FTMC turimą skystinės epitaksijos, molekulinį pluoštelį epitaksijos įrangą bei VU turimą MOCVD įrangą; grafeno sluoksniai bus auginami FTMC instaliuojamos įrangos pagalba; taip pat planuojama pasinaudoti modernia mikroelektronikos infrastruktūra užsienyje;

užaugintų puslaidininkinių darinių parametrai bus tiriami, pasinaudojant gerai žinomais (elektrinio laidumo – Hall'o, Van der Paw, magnetovaržiniais metodais) ir moderniais metodais (mikrobangės artimojo lauko mikroskopijos metodais dielektrinių ir laidžiųjų medžiagų homogeniškumo tyrimams (panaudojant originalų artimojo lauko mikroskopą, dirbantį D dažnių ruože. Mikroskopas sukurtas, bendradarbiaujant su UAB Elmika); dinaminės vienifotonės koreliacinės spektroskopijos ir nuostoviosios vienifotonės fotoluminescencijos metodikomis - bandinių kokybės ir optinių savybių tyrimai žemose temperatūrose;

gaminami mikrobangės elektronikos prietaisai, pasinaudojant FTMC technologine baze; bandinių gamybos proceso metu atsiradusių problemų pagrindu koreguojama jų konstrukcija ir technologinis gamybos maršrutas;

atliekami mikrobangės elektronikos prietaisų tyrimai nuostoviosios ir aukštadažnės srovės režimuose; tyrimai aukštadažnėje srityje paspartėja, pasinaudojant galimybe šiuos matavimus atlikti tiesiai ant puslaidininkinės plokštelės su darinių matrica, prie darinių prisijungiant per Cascade Microtech aukštadažnius zondus X, Ka ir W dažnių ruožuose bei pasitelkiant UAB Elmika pagamintus skaliarinius tinklo analizatorius R2400 Ka, W ir D dažnių ruožams;



atliekama naujų mikrobangės elektronikos prietaisų pritaikymo serijinės gamybos prietaisuose analizė ir paieška.

Vykdamas programos 3.4 papunktyje nurodytą uždavinį, bus vykdomi įvairūs tyrimai, paremti kompiuteriniu modeliavimu ir eksperimentiniu jų verifikavimu. Apšvietus puslaidininkinį darinį, susidaro fotoįtampa. Jei fotono energija didesnė už puslaidininkio draudžiamosios energijos tarpą, sandūroje susidaro įtampa dėl elektronas-skyklė porų generavimo ir jų atskyrimo sandūros elektriniame lauke; tokio vyksmo sparta priklauso nuo krūvininkų gyvavimo trukmės. Jei fotono energija mažesnė už draudžiamosios energijos tarpą, dominuoja laisvųjų krūvininkų sugertis, o sandūroje susidaro karštųjų krūvininkų elektrovara; šiuo atveju sparta priklauso nuo fundamentinės krūvininkų energijos relaksacijos trukmės. Be to, daugiafotonės šviesos sugerties sąlygota fotoįtampa gali susidaryti esant dideliems sužadavimo intensyvumams. Visų trijų reiškinių vyksmo sparta (dinamika) yra skirtingos. Taipogi skiriasi šių fotoįtampų poliškumai, priklausomybė nuo sužadavimo lygio ir bangos ilgio bei nuo aplinkos sąlygų; dažnais atvejais jie vyksta vienu metu.

Vykdamas šiuos tyrimus bus laikomasi šios metodologinės tyrimų sekos: kuriami teoriniai generavimo ir kaitimo fotoįtampos impulsų modeliai, lyginami su eksperimentiniais rezultatais;

tiriami skirtingo draudžiamosios energijos tarpo puslaidininkių – GaAs, AlGaAs, GaInAs – dariniai; tiriami skirtingo legiravimo laipsnio ir skirtingo aktyvaus sluoksnio storio dariniai; analizuojami fotoįtampos ypatumai, esant įvairaus spektro bei intensyvumo žadinančiajai lazerinei spinduliuotei;

tyrimai atliekami įvairiose – nuo kambario iki skystojo helio – temperatūrose.

Vykdamas programos 3.5 papunktyje nurodytą uždavinį, taip pat bus vykdomi paieškiniai tyrimai, kadangi nanolaminatai anksčiau FTMC nebuvo tiriami. Nanolaminatai iš ZnO ir Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> arba grafeno plonųjų sluoksnių gali būti labai perspektyvūs kaip reguliuojamo lūžio rodiklio padėklai optiniams biologiniams jutikliams. Šiuo metu tokie nanodariniai yra gaminami Membranų institute (Institute of Membrane, Monpelje) ir Latvijos Universitete, naudojant atominį sluoksnių nusodinimą (Atomic layer deposition ALD) technologiją, o jų optinės savybės pradėtos tirti FTMC Medžiagotyros ir elektros inžinerijos skyriaus Bionanotechnologijų laboratorijoje. Galutinis biologinio jutiklio sukūrimas bus atliekamas FTMC ir VU Chemijos fakultete, ant nanolaminatų suformuojant savitvarkį monosluoksnį, skirtą tirti proteinų sąveiką. Nors yra neblogas pradinis įdirbis, ši tema yra paieškinė, nes nanolaminatų optinių savybių tyrimo rezultatai turi būti panaudoti, kryptingai keičiant šių darinių gamybos technologiją. Atlikus šiuos tyrimus, bus galima geriau nustatyti tokių biologinių jutiklių privalumus ir taikymo sritis, o ateityje nusipirkus ALD įrangą, visą jutiklių technologiją išvystyti FTMC.

Vykdamas programos 3.6 papunktyje nurodytą uždavinį, bus laikomasi šios metodologinės tyrimų sekos: nanostruktūrizuotų organinių medžiagų ir biologinių struktūrų gamybos technologijos arba auginimo metodų kūrimas ir išvystymas; šių medžiagų ir struktūrų savybių eksperimentinis tyrimas; fizikinių reiškinių naudojamų elektronikos prietaisų kūrimui mechanizmų išaiškinimas ir teorinis modeliavimas; bionanoelektroninių prietaisų elementų ir jų gamybos technologijų kūrimas bei naujų įtaisų, naudojančių šiuos bionanoelektroninius elementus, kūrimas, prototipavimas bei testavimas.

Vystomos biologinių nanostruktūrų permeabilizacijos elektriniais ir magnetiniais impulsais technologijos; biologinių struktūrų dirbtinių analogų (Bio-inspired) kūrimas ir tyrimas; konkrečių biologinių struktūrų dirbtinių analogų prototipų gamyba ir testavimas.

## **5. Tyrimų etapai ir jų charakteristika:**

5.1. Vykdamas programos 3.1 papunktyje nurodytą uždavinį, bus:

5.1.1. formuojami nanostruktūrizuoti manganitų ir kobaltitų, Co-Mn Heuslerio junginių bei aukštatemperatūrinių superlaidininkų sluoksniai, panaudojant skirtingas medžiagas, jų derinius, įvairius padėklus bei sluoksnių užnešimo technologijas;

5.1.2. tiriama technologinių auginimo sąlygų, o taip pat tolimesnių žematemperatūrinių atkaitinimų, stabilizuojančių sluoksnių parametrus, įtaką jų cheminei sudėčiai, kristalinei struktūrai, paviršiaus tobulumui, elektrinėms bei magnetinėms savybėms;

5.1.3. atliekama mikroorganizmų ir veiksnių, atliekančių organinių polimerų sintezę, paieška ir tyrimai;

5.1.4. vykdomi biogeninių polimerų cheminės sudėties ir struktūros tyrimai;

5.1.5. tiriama struktūrizuotų biogeninių polimerų struktūros įtaka medžiagos elektriniams laidumui mikrobangų ruože ir polimero mechaninėms savybėms;

5.1.6. kuriamos biologines struktūras atkartojančių dirbtinių (bio-inspired) medžiagų technologijos;

5.1.7. vykdomas biologines struktūras atkartojančių dirbtinių analogų (bio-inspired) kūrimas ir tyrimas.

5.2. Vykdamas programos 3.2 papunktyje nurodytą uždavinį, bus:

5.2.1. atliekami kompleksiniai nanostruktūrizuotų manganitų, kobaltitų sluoksnių, Heuslerio junginių ir jų tunelinių darinių elektrinių bei magnetinių savybių tyrimai silpnuose pastoviuose bei stipriuose impulsiniuose elektriniuose ir magnetiniuose laukuose, analizuojami elektrovaržos, magnetovaržos bei magnetovaržos anizotropijos reiškinių ir magnetinės atminties efektų ypatumai, atliekamas krūvio pernašos mechanizmų bei fizikinių ir cheminių procesų, vykstančių nanodarinių tarpfazinėse srityse, skaitinis modeliavimas;

5.2.2. formuojami skaliariniai stipraus magnetinio lauko jutikliai panaudojant nanostruktūrizuotus manganitų ir kobaltitų plonuosius sluoksnius, tiriamos jų charakteristikos, tame tarpe temperatūrinis stabilumas plačiame temperatūrų ruože ir laikinis stabilumas;

5.2.3. formuojamos daugiasluoksnės tunelinės struktūros, panaudojant Heuslerio junginius; tiriamas netiesinis elektrinis transportas daugiasluoksniuose MTJ dariniuose su feromagnetiniais elektrodais; analizuojamas MTJ elektrinių savybių valdymas išoriniais elektriniais ir magnetiniais laukais ir šių struktūrų panaudojimas naujų elektronikos ir spintronikos prietaisų: silpno magnetinio lauko jutiklių, magnetiniu bei elektriniu lauku valdomų jungiklių kūrimui;

5.2.4. formuojami spartieji saugikliai superlaidžių polikristalinių Y-Ba-CuO struktūrų pagrindu, tiriamos jų charakteristikos ir panaudojimo galimybės.

5.3. Vykdamas 3.3 papunktyje nurodytą uždavinį, bus suprojektuoti įvairialyčiai puslaidininkiniai ir grafeno dariniai ir jie užauginti:

5.3.1. kuriant hibridinį darinį, integruojant plonasluoksnį nesimetriškai susiaurintą darinį su autopersijungiančiu diodiniu dariniu, bus: sukurta nesimetriškai susiaurinto puslaidininkinio darinio konstrukcija su nanometrinio dydžio autopersijungiančiu diodiniu dariniu; nesimetriškai susiaurinto grafeno sluoksnio konstrukcija su nanometrinio dydžio auto-persijungiančiu grafeno diodiniu dariniu; mikrobangės spinduliuotės planarinio detektoriaus konstrukcija, apjungiant puslaidininkinius mikrobangų diodus ir mikrobangės spinduliuotės antenas iš grafeno.

5.3.2. kuriant originalią mikrobangų diodo konstrukciją lauko tranzistoriaus pagrindu, bus: teoriškai įvertinta sklendės virš dvimačio elektroninių dujų kanalo įtaka mikrobangio diodo detektuojamos įtampos dydžiui; suprojektuotas planarinis mikrobangų diodas su daline sklende virš dvimačio elektroninių dujų kanalo; sukurta planarinių mikrobangų diodo su daline sklende virš dvimačio elektroninių dujų kanalo gamybos technologija.

5.3.3. nagrinėjant grafeno ir topologinių izoliatorių spektro priklausomybę ir savybes nuo tokių įvairių veiksnių, kaip sukinys-orbita sąveika, pamaininė sąveika ir kitų, bus surasta elektrinio bei magnetinio laukų įtaka spektrui, išnagrinėtos sukinio ir kvazisuakinio savybės esant įvairioms perturbacijoms.

5.3.4. tiriant eksitoninės spinduliuotės sustiprėjimą homogeniniuose ir heterogeniniuose puslaidininkiniuose dariniuose, bus atlikti pagamintų GaAs/AlGaAs nanometrinių heterodarinių bandinių fotoluminescencijos tyrimai, atliekama gautų eksperimentinių tyrimų rezultatų analizė ir pateikiami siūlymai darinių kokybei gerinti.

5.3.5. kuriant varizoninių bei įvairialyčių  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  darinių ant tekstūruoto padėklo auginimo technologiją, bus tiriamos varizoninių bei įvairialyčių GaAs- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  darinių epitaksinio augimo ant tekstūruotų padėklų ypatybės, siekiant suderinti tekstūruoto padėklo reljefo ir skystinės epitaksijos proceso parametrus optimaliems dariniams išauginti bei formuojami įvairių profilių paviršiai ant išaugintų varizoninių arba įvairialyčių darinių ir auginami trijų dimensijų GaAs- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  dariniai.

5.4. Vykdamas 3.4. uždavinį, nepusiausvyrinių krūvininkų dinamika bus tiriama puslaidininkinių nanodariniuose, užaugintuose ir pagamintuose vykdamas programą. Siekiant nustatyti krūvininkų generavimo ir jų kaitimo reiškinių įtakotų fotoįtampų susidarymo sąlygas, ieškant galimybių praktiškai atskirti šiuos reiškinius bei įtakoti kiekvieno jų indėlį, bus:

5.4.1. kuriami teoriniai generavimo ir kaitimo fotoįtampos impulsų modeliai, lyginami su eksperimentiniais rezultatais;

5.4.2. tiriami skirtingo draudžiamosios energijos tarpo puslaidininkinių – GaAs, AlGaAs, GaInAs – dariniai;

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>5.4.3. tiriami skirtingo legiravimo laipsnio ir skirtingo aktyvaus sluoksnio storio dariniai;</p> <p>5.4.4. analizuojami fotoįtampos ypatumai, esant įvairaus spektro bei intensyvumo žadinančiajai lazerinei spinduliutei;</p> <p>5.4.5. tyrimai atliekami įvairiose – nuo kambario iki skystojo helio – temperatūrose.</p> <p>5.5. Vykdamas programos 3.5. uždavinį, bus kuriami nanolaminatai bei 3D nanostruktūrizuoti ZnO/Au nanometrinių matmenų dariniai plazmonikai bei optiniams biojutikliams (biomolekulių orientacijos įtaka šviesos poliarizacijos būsenai, nanolaminatų iš ZnO sluoksnių fotoluminescencija) (TEM, SEM, XRD, spektroskopiniai elipsometrai, spektrofotometrai įvertinantys sklaidą, paviršiaus plazmonų rezonanso biojutikliai). Numatoma tokia darbų seka:</p> <p>5.5.1. nanolaminatų bei 3D aukso nanostruktūrų optinė dispersija bei jautrumas bus charakterizuojamas spektrofotometriškai bei spektrinės elipsometrijos metodu, panaudojant išsamią poliarizacijos būsenų analizę;</p> <p>5.5.2. atlikus nanostruktūrizuotų struktūrų tinkamumo biojutiklių panaudojime įvertinimą, bus atliktas šių padėklų biomodifikavimas specifiniais baltymais bei tolesnis biomolekulių monosluoksnių tyrimas;</p> <p>5.5.3. <i>In situ</i> baltymų sąveikų dinamikos tyrimas ant nanolaminatų ir 3D aukso nanostruktūrų bei tolesnis susiformavusių biomolekulių monosluoksnių charakterizavimas.</p> <p>5.6. Vykdamas programos 3.6. uždavinį, numatoma:</p> <p>5.6.1. tirti elektrinių ir magnetinių impulsų poveikį ląstelių plazminės membranos pralaidumui: tirti plazminės membranos pralaidumo poveikį sienelę turinčių mikroorganizmų gyvybingumui; tirti plazminės membranos permeabilizacijos poveikį sienelės permeabilizacijai, bei ieškoti šiam tikslui selektyvių tyrimo būdų; tirti permeabilizuotos sienelės atsistatymo mechanizmą; kurti, vystyti ir diegti elektroporacijos pagrindu sukurtas technologijas kenksmingų mikroorganizmų kontrolei.</p> <p>5.6.2. tirti itin trumpų (nanosekundžių trukmės) elektrinių ir magnetinių impulsų poveikį viduląsteliniais signalams: tirti plazminės membranos pralaidumo poveikį sienelę turinčių mikroorganizmų programuojamai žūčiai – apoptozei; tirti elektriniais ir magnetiniais impulsais indukuojamos mikroorganizmų apoptozės mechanizmą; genų inžinerijos pagalba kurti genų raiškos iniciatorių (promotorių) sekas, kurias būtų galima valdyti elektriniais ir magnetiniais impulsais; kurti, vystyti ir diegti sukonstruotų promotoriaus sekų pagrindu sukurtas technologijas genoterapinių vaistų dozavimui.</p> |
| <p><b>6. Detalus įgyvendinimo planas:</b></p> <p>Pirmas etapas (2017–2019 metai).</p> <p>6.1. Vykdamas 3.1 papunktyje nurodytą uždavinį, šiame etape numatoma:</p> <p>6.1.1. ant įvairių kristalinių ir polikristalinių padėklų formuoti nanostuktūrizuotus manganitų ir kobaltitų (La-Sr-Mn-O, La-Ca-Mn-O, La-Sr-Mn-Co-O), aukštatemperatūrų superlaidininkų (YBCO) sluoksnius, panaudojant skirtingus sluoksnių užnešimo metodus (PIMOCVD ir PLD);</p> <p>6.1.2. gaminti atskirus Co-Mn-Si Heuslerio junginių sluoksnius ir tirti technologinių formavimo sąlygų įtaką jų cheminei sudėčiai, kristaliniam tobulumui, stabilumui, elektrinėms bei magnetinėms savybėms;</p> <p>6.1.3. pagal 3.2 papunktyje nurodyto uždavinio vykdymo tyrimų rezultatus parinkti optimalias technologines sąlygas, užtikrinančias praktiniams taikymams reikalingus magnetinio lauko jutiklių, magnetinių tunelinių jungčių bei apsaugos nuo elektromagnetinio impulso įtaisų prototipų parametrus ir charakteristikas;</p> <p>6.1.4. kurti biogenines polimerizavimo technologijas:</p> <p>6.1.4.1. iš atrinktų aktyvių mikroorganizmų (mielių ir bakterijų) bus ieškoma veiksmų, atliekančių organinių polimerų sintezę. Paprastai organinių polimerų sintezėje dalyvauja įvairūs baltymai – fermentai. Bus siekiama šiuos fermentus identifikuoti ir išsigryninti.</p> <p>6.1.4.2. žinant, kad organiniai polimerai linkę suformuoti atsikartojančias makrostruktūras, todėl numatoma toliau tirti tokių struktūrų sudėtį ir makroskopinę struktūrą, aiškinantis susidarymo mechanizmą. Šios žinios padėtų ateityje atkartoti biologinės kilmės struktūrą.</p> <p>6.2. Vykdamas 3.2 papunktyje nurodytą uždavinį, šiame etape numatoma:</p> <p>6.2.1. iširti pagamintų nanostuktūrizuotų manganitų ir kobaltitų (La-Sr-Mn-O, La-Ca-Mn-O, La-Sr-Mn-Co-O), superlaidininkų (YBCO) bei sluoksnių iš Heuslerio lydinių morfologiją, struktūrą, elektrines ir magnetines savybes, atlikti eksperimentinių rezultatų analizę ir vykstančių fizikinių reiškinių skaitinį modeliavimą;</p> <p>6.2.2. pagal tyrimų rezultatus parinkti optimalias technologines sąlygas 3.1 uždavinio vykdymui,</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |

siekiant užtikrinti optimalius skaliarinio magnetinio lauko jutiklių parametrus ir charakteristikas;

6.2.3. sukurti elektroninių įterptinių sistemų, naudojamų portatyviame impulsinio magnetinio lauko matuoklyje ir elektroporatoriuose, programinę įrangą.

6.3. Pirmajame 3.3 papunktyje nurodyto uždavinio įgyvendinimo etape bus, suprojektuoti ir užauginti įvairialyčiai puslaidininkiniai ir daugiasluoksnio grafeno dariniai, sukurta nesimetriškai susiaurinto puslaidininkinio ir grafeninio darinio konstrukcija su nanometrinio dydžio autopersijungiančiu diodiniu dariniu, teoriškai įvertinta sklendės virš dvimačio elektroninių dujų kanalo įtaka mikrobangio diodo detektuojamos įtampos dydžiui, surasta elektrinio bei magnetinio laukų įtaka grafeno ir topologinių izoliatorių spektrui, eksperimentiškai ištirta užaugintų puslaidininkinių darinių kokybė ir optinės savybės, esant įvairioms gardelės temperatūroms, ištirtos varizoninių bei įvairialyčių GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As darinių epitaksinio augimo ant tekstūruotų padėklų ypatybės.

6.4. Pirmame 3.4 papunktyje nurodyto uždavinio įgyvendinimo etape bus vykdomas puslaidininkinių nanodarinių, sudarytų iš A<sub>3</sub>B<sub>5</sub> monosluoksnių ir heterodarinių, struktūros ir konstrukcijos modeliavimas, priklausomai nuo sudedamųjų dalių kiekio, legiravimo laipsnio, bei storio. Analizuojama krūvininkų pernaša darinyje, e papunktyje nurodytą sant krūvininkų sužaditimui šviesa. Rekomendacijos sluoksnių auginimui. Sluoksnių auginimas, darinių tyrimams gamyba. Tinkamų technologinių procesų parametrų parinkimas. Užaugintų epitaksinių sluoksnių kokybės ir darinių savybių kontrolė, panaudojant FTMC turimą modernią įrangą. Krūvininkų pernašos, jų dinamikos dėsningumų pagamintuose dariniuose elektriniai ir optoelektriniai tyrimai. Išvadų formavimas. Rekomendacijos tolimesniam sluoksnių auginimui bei darinių gaminimui.

6.5. Pirmame 3.5 papunktyje nurodyto uždavinio įgyvendinimo etape nanolaminatų bei 3D aukso nanostruktūrų su novatoriška architektūra optinė dispersija bei jautrumas skirtingoms bangos poliarizacijos būsenoms bus charakterizuojamas spektrofotometriškai, įskaitant sklaidos efektus optiniame atsake bei spektrinės elipsometrijos metodu, panaudojant išsamią poliarizacijos būsenų analizę.

6.6. Pirmame 3.6 papunktyje nurodyto uždavinio įgyvendinimo etape bus atliekami tokie darbai:

6.6.1. tirti elektrinių ir magnetinių impulsų poveikį ląstelių plazminės membranos pralaidumui;

6.6.2. plazminės membranos pralaidumo poveikį sienelę turinčių mikroorganizmų gyvybingumui ir aiškintis poveikio mechanizmą;

6.6.3. permeabilizuotos sienelės atsistatymo mechanizmas, panaudojant atrankią tetrafenilfosfoniui koncentracijos matavimo metodiką;

6.6.4. tirti itin trumpų (nanosekundžių trukmės) elektrinių ir magnetinių impulsų poveikį viduląsteliniais signalams:

6.6.4.1. bus tiriamos mielių ląstelės paveiktos nanosekundžių trukmės impulsais, tirinama plazminė membrana ir jos pralaidumas;

6.6.4.2. bus ieškoma veiksmų stabdančių apoptozę;

6.6.4.3. viduląstelių signalų raiškiai tirti bus konstruojamas eukariotų ląstelių signalinis vektorius.

Antras etapas (2019-2020 metai)

6.7. Vykdam 3.1 papunktyje nurodytą uždavinį numatoma:

6.7.1. tobulinti, modifikuoti feromagnetinių ir metalo oksidų, Heuslerio lydinių bei aukštatemperatūrų superlaidininkų gamybos technologijas;

6.7.2. parinkus tinkamiausias medžiagų chemines sudėtis ir jų nanokompozitų derinius, pagaminti magnetinio lauko jutiklių, magnetinių tunelinių jungčių bei apsaugos nuo elektromagnetinio impulso įtaisų aktyvius funkcinius elementus;

6.7.3. parengti technologinius maršrutus ir kitą technologinę dokumentaciją sukurtų technologijų diegimo ir aprobavimo klausimais;

6.7.4. kurti biogenines polimerizavimo technologijas: iš mikroorganizmų išskyrus veiksmų, atliekančių organinių polimerų sintezę, numatoma atkartoti biogeninę polimerizaciją in vitro; mikroskyščių technologijos pagalba kurti struktūras, kurios pasižymėtų mikrobangas absorbuojančiomis savybėmis.

6.8. Vykdam 3.2 papunktyje nurodytą uždavinį šiame etape numatoma:

6.8.1. ištirti suformuotų aktyvių funkcinių elementų iš nanostruktūrizuotų manganitų, kobaltitų, superlaidininkų bei Heuslerio junginių plonųjų sluoksnių elektrinius ir magnetinius parametrus bei šių elementų pagrindines charakteristikas;

6.8.2. ištirti suformuotų elektrodų ir geometrinių parametrų įtaką aktyvių elementų parametrams ir jų funkcinėms galimybėms;

6.8.3. atlikti tinkamų pagreitinto terminio sendinimo procedūrų, užtikrinančių suformuotų aktyvių funkcinį elementų parametrų eksploatacines charakteristikas, paiešką;

6.8.4. sukurti portatyviojo impulsinio magnetinio lauko matuoklio jautriojo elemento (zondo) konstrukciją;

6.8.5. sukurti elektroninių įterptinių sistemų, naudojamų portatyviame impulsinio magnetinio lauko matuoklyje ir elektroporatoriuose, aparatinę įrangą.

6.9. Antrajame 3.3 papunktyje nurodyto uždavinio įgyvendinimo etape bus sukurta mikrobangės spinduliuotės planarinio detektoriaus konstrukcija, apjungiant puslaidininkinius mikrobangų diodus ir mikrobangės spinduliuotės antenas iš grafeno; suprojektuotas planarinis mikrobangų diodas su daline sklende virš dvimačio elektroninių dujų kanalo, sukurta planarinių mikrobangų diodo su daline sklende virš dvimačio elektroninių dujų kanalo gamybos technologija, ištirta matricos įtaka dvimačių struktūrų kvantinėms savybėms, įvertintas eksitoninės linijos sustiprėjimas bei jos susiaurėjimas, esant įvairiems žadinančios šviesos šaltiniams bei intensyvumams, įvairioms gardelės temperatūroms, formuojami įvairių profilių paviršiai ant išaugintų varizoninių arba įvairialyčių darinių ir auginami trijų dimensijų  $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  dariniai.

6.10. Antrajame 3.4 papunktyje nurodyto uždavinio įgyvendinimo etape bus vykdomas naujų darinių ruošimas, jų kokybės ir savybių tyrimai. Fotoelektrinio signalo susidarymo dėsnų dariniuose nustatymas priklausomai nuo sluoksnių savybių (krūvininkų tankio, sluoksnio storio ir laidumo tipo, įterptinių pasluoksnių) bei nuo eksperimento sąlygų (temperatūros, spinduliuotės bangos ilgio, intensyvumo). Išvadų formavimas. Grįžtamasis ryšys: tyrimų pagrindu rekomendacijų teikimas naujų darinių modeliavimui ir auginimui bei gaminimui.

6.11. Antrajame 3.5 papunktyje nurodyto uždavinio įgyvendinimo etape visiško vidaus atspindžio elipsometrijos metodas bus taikomas nustatyti skirtingomis sąlygomis paruoštų nanostruktūrizuotų padėklų su novatoriška architektūra tinkamumui biojutiklių panaudojime. Bus atliktas šių padėklų biomodifikavimas specifiniais baltymais bei tolesnis biomolekulinių monosluoksnių charakterizavimas.

6.12. Antrajame 3.6 papunktyje nurodyto uždavinio įgyvendinimo etape numatoma:

6.12.1. Tirti elektrinių ir magnetinių impulsų poveikį ląstelių plazminės membranos pralaidumui:

6.12.1.1. bus tobulinama tetrafenilfosfonio (TPP) koncentracijos matavimo metodika;

6.12.1.2. bus konstruojamas TPP selektyvus plokščias elektrodas;

6.12.1.3. numatoma sukonstruoti ir įdiegti elektroporatorių netemperatūrinei pasterizacijai;

6.12.1.4. bus kuriama mielių krioprotekcijos technologija.

6.12.2. Tirti itin trumpų (nanosekundžių trukmės) elektrinių ir magnetinių impulsų poveikį viduląsteliniais signalais: numatome tirti mikroorganizmų apoptozės įtaką kitų, nepaveiktų ląstelių išgyvenimui; bus konstruojamas promotorius, kurį būtų galima naudoti genoterapinių vaistų dozavimui.

Trečias etapas (2020-2021 metai).

6.13.1. Vykdam 3.1. ir 3.2 papunkčiuose nurodytus uždavinius numatoma:

6.13.1.1. padidinto jautrio manganitų ir kobaltitų nanostruktūrizuotų sluoksnių pagrindu pagaminti magnetinio lauko bei srovės jutiklius ir matuoklius: B-skaliarinį matuoklį, skirtą komercinio magnetinių laukų ruošo (0,2-5 Teslų) matavimams; bekontaktį impulsinės srovės matuoklį geležinkelų elektros perdavimo sistemų patikrai.

6.13.1.2. heuslerio junginių pagrindu pagaminti daugiasluoksnes magnetines tunelines jungtis (MTJ), skirtas silpno (mT) magnetinio lauko matavimams kambario temperatūroje. Pritaikyti šias MTJ feromagnetinių nanodalelių, užaugintų, vykdam 3.4 uždavinį, didelės skiriamosios erdvinės gebos monitoringui biologiniuose objektuose.

6.13.1.3. didelės krizinės srovės aukštatemperatūrų superlaidininkų pagrindu pagaminti spartųjį subnanosekundinės suveikimo trukmės apsaugos įtaisą nuo didelės galios elektromagnetinio impulso.

6.13.1.4. kurti biogenines polimerizavimo technologijas, panaudojant mikroskyščių technologiją, chemiškai sintetinti organinius polimerus, kurie savo makroskopine struktūra atkartotų biogeninių polimerų struktūras.

6.14. Trečiajame 3.3 papunktyje nurodyto uždavinio įgyvendinimo etape bus ištirtos žemadažnės ir aukštadažnės nesimetriškai susiaurinto puslaidininkinio darinio su nanometrinio dydžio autopersijungiančiu diodiniu dariniu savybės plačiame dažnių ruože esant įvairioms aplinkos temperatūroms, detekcinės planarinio mikrobangų diodo su daline sklende virš dvimačio

elektroninių dujų kanalo savybės, atlikti klimatiniai sukurtų mikrobangės elektronikos diodinių darinių bandymai, atlikta sukurtų mikrobangės elektronikos diodinių darinių diegimo į serijinę gamybą analizė, pateikiant mikrobangų diodų prototipus potencialiems gamintojams, išnagrinėtos sukinio ir kvazisuakinio savybės esant įvairioms perturbacijoms, ištirti eksitoninės ir eksitoninės-poliaritoninės sąveikos poliarizaciniai reiškiniai, ištirti trijų dimensijų GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As dariniai jų panaudojimo naujo tipo mikrobangių diodų ir diodų masių (matricių) kūrimo požiūriu.

6.15. Trečiajame 3.4 papunktyje nurodyto uždavinio įgyvendinimo etape bus vykdomas naujų efektyvių daugiaskuksnių A<sub>3</sub>B<sub>5</sub> darinių gaminimas, jų kokybės ir savybių tyrimai. Krūvininkų pernešimo reiškinų ir dinamikos spektriniai tyrimai įvairioms sąlygoms (priklausomai nuo sužadinimo lygio, temperatūros). Plonasluoksnio saulės elemento formavimo technologijos modeliavimas ir gaminimas, jo savybių tyrimas bei tobulinimas.

6.16. Trečiajame 3.5 papunktyje nurodyto uždavinio įgyvendinimo etape bus vykdomas in-situ kinetinių baltymų sąveikų tyrimas ant nanolaminatų ir 3D aukso nanostruktūrų naudojant spektrinę elipsometriją bei tolesnis susiformavusių biomolekulių monosluoksnių charakterizavimas.

6.17. Trečiajame 3.6 papunktyje nurodyto uždavinio įgyvendinimo etape numatoma:

6.17.1. tirti elektrinių ir magnetinių impulsų poveikį ląstelių plazminės membranos pralaidumui: numatoma su pramonės partneriais ieškoti elektroporacijos taikymo sričių, o taip pat tobulinti elektroporatorių techninius parametrus; sukurti elektroporatorių prototipus, kurie skirti tam tikrų specifinių taikymo sričių eksperimentams laboratorinėmis sąlygomis;

6.17.2. tirti itin trumpų (nanosekundžių trukmės) elektrinių ir magnetinių impulsų poveikį viduląsteliniais signalams: sukonstruotų vektorių pagrindu planuojame atlikti tyrimus genoterapinių vaistų dozavimui in vivo.

## 7. Numatomi rezultatai:

90 straipsnių tarptautiniuose mokslo žurnaluose, turinčiuose aukštą citavimo indeksą.

60 straipsnių kituose recenzuojamuose mokslo žurnaluose.

5 Lietuvos patentai, 1 Europos patentas.

Programoje numatoma kurti naujų elektronikos, spintronikos ir bionanoelektronikos medžiagų bei jų darinių gamybos technologijas. Šios medžiagos – tai feromagnetikai (La<sub>1-x</sub>Sr(Ca)<sub>x</sub>Mn<sub>1+y</sub>O<sub>3</sub>, kobaltitų La<sub>1-x</sub>Sr<sub>x</sub>Mn<sub>1-y</sub>Co<sub>y</sub>O<sub>3</sub>), Heuslerio junginiai ir metalų oksidai (Co<sub>2</sub>MnSi, MgO ir kt.), superlaidieji metalų oksidai (YBaCuO), nanolaminatų bei 3D aukso nanostruktūros, polipirolo ir organinių puslaidininkų plonieji sluoksniai, įvairialyčiai Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As dariniai, skirtingo draudžiamosios energijos tarpo puslaidininkų – GaAs, AlGaAs, GaInAs – dariniai, formuojami panaudojant cheminį nusodinimą iš metaloorganinių junginių garų fazės, impulsinį lazerinį nusodinimą, magnetroninį dulkiniimą, skystinę epitaksiją ir molekulinį pluoštelių epitaksiją.

Numatoma sukurti elektronines įterptines sistemas, pritaikytas portatyviame impulsinio magnetinio lauko matuoklyje ir elektroporatoriuose.

Bus sukurtas portatyvus impulsinio magnetinio lauko matuoklis skirtas industrijoje generuojamų magnetinių laukų matavimui. Šis prietaisas veiks iki 10 kHz dažnio ir galės išmatuoti absoliutinę impulsinių magnetinių laukų vertę nuo 0,2 T iki 5T.

Bus sukurtas bekontaktinis impulsinės srovės matuoklis geležinkelių elektros perdavimo sistemų patikrai. Matuoklis leis identifikuoti viršutinių geležinkelių elektros perdavimo linijų pažeidimus realiaame laike aptikdamas iki 1kA amplitudės impulsinius viršsrovių.

Numatoma sukurti silpno (iki 20 mT) pastovaus magnetinio lauko jutiklio prototipas feromagnetinių nanodalelių vietos nustatymui. Numatoma, jog jutiklis galės būti panaudotas medicinoje lokaliai vaistų pernašai reguliuoti.

Numatoma sukurti nanostruktūrų su novatoriška architektūra nanolaminatų ir 3D aukso darinių pagrindu, kurios pasižymėtų geresniu optinio signalo jautrumu bei išplėstomis funkcinėmis savybėmis lyginant su tradiciniais ištisiniais aukso sluoksniais naudojančiais paviršiaus plazmonų jutikliais.

Numatoma sukurti optimalios konstrukcijos puslaidininkinius ir grafeno darinius, skirtus mikrobangei elektronikai.

Bus sukurti jautrūs, kompaktiški, pasižymintys mažais elektriniais triukšmais mikrobangės spinduliuotės jutikliai, kurie bus panaudojami matavimo prietaisų pramonėje, transporte, karyboje, medicinoje.

Bus paruoštas geometrinės algebros žinynas, kur bus susisteminti šios mokslo srities apibrėžimai, formulės, jų taikymas fizikoje.

Bus pateiktos rekomendacijos eksitoninės spinduliuotės sustiprėjimo pritaikymui LED šviesos emisijos ar saulės elementų efektyvumo padidinimui.

Nustačius sąlygas, leidžiančias minimalizuoti įvairių šalutinių reiškinių įtaką fotoįtampos susidarymui, bus atverti fizikiniai pagrindai kurti didesnės spartos ar didesnio fotovoltinio jautrio optoelektronikos prietaisus, didesnio efektyvumo saulės elementus.

Numatoma sukurti ir iširti padidinto efektyvumo saulės elemento prototipą.

#### **8. Rezultatų sklaidos priemonės:**

Numatoma paskelbti 150 (90 su aukštu citavimo indeksu) mokslinių straipsnių, pristatyti 40 pranešimų mokslinėse konferencijose.

#### **9. Preliminarus programos lėšų paskirstymas (tūkst. Eur):**

| Eil. Nr. | Išlaidų pavadinimas                                                                                                | 2017 metais | 2018 metais | 2019 metais | 2020 metais | 2021 metais | Visai programai (suma) |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|------------------------|
| 1.       | Programai skirti norminiai etatai, lėšos                                                                           | 34<br>326   | 34<br>326   | 34<br>326   | 34<br>326   | 34<br>326   | 1630                   |
| 2.       | Kitos lėšos planuojamos programai vykdyti (iš kitų, institutui skirtų valstybės biudžeto bazinio finansavimo lėšų) | 326         | 326         | 326         | 326         | 326         | 1630                   |
|          | Iš viso                                                                                                            | 652         | 652         | 652         | 652         | 652         | 3260                   |

#### **10. Programos trukmė:** 2017–2021 metai.

**11. Programos vadovas:** prof. habil.proc. Nerija Žurauskienė, vyriausioji m.d., tel.: 8-5-2619532; nerija.zurauskiene@ftmc.lt

## PATVIRTINTA

Lietuvos Respublikos švietimo ir mokslo  
ministro 2017 m. balandžio 24 d.  
įsakymu Nr. V-273

### OPTOELEKTRONIKOS IR LAZERIŲ TECHNOLOGIJOS

**1. Programos vykdytojas** -Valstybinis mokslinių tyrimų instituto Fizinių ir technologijos mokslų centras (toliau – FTMC)

Norminiai etatai skirti programai – 32.

**2. Programos tikslas** - vykdyti fundamentinius šviesos sąveikos su medžiaga tyrimus optoelektronikos, fotonikos ir lazerinių technologijų srityse, kurti naujas optoelektronikos prietaisų ir lazerių technologijas ir taikyti jas Lietuvos aukštųjų technologijų pramonės įmonėse.

#### **3. Programos uždaviniai:**

3.1. Kurti ir vystyti THz diapazono prietaisų technologijas, atlikti išsamius jų fizikinių savybių tyrimus.

3.2. Kurti ir tobulinti THz diapazono sistemas ir vykdyti naujųjų taikymų paieškas, įskaitant spektroskopiją, pramonės procesų kontrolę, vaizdinimą ir saugos sistemas.

3.3. Kurti viduriniojo IR diapazono prietaisų ir sistemų technologijas bei vykdyti jų taikymo paieškas.

3.4. Kurti naujas didelės impulso energijos ir ultra-trumpų impulsų skaidulinių lazerių technologijas, ieškoti naujų būdų koherentinės šviesos su didele išvadine galia ir gera pluošto kokybe generavimui kietuose kūnuose.

3.5. Tirti lazerio spinduliuotės sąveiką su medžiaga ir kurti naujas lazerines medžiagų mikroapdirbimo technologijas.

3.6. Vystyti ir taikyti pažangius optinių dangų gamybos procesus lazeriniams optiniams komponentams bei nanofotonikos prietaisų darinių projektavimo ir kūrimo technologijas.

#### **4. Metodologinis tyrimų pagrindimas:**

Lietuvos lazerių ir optikos pramonė žinoma visame pasaulyje, sėkmingai konkuruoja su žymiausiomis kompanijomis. Šie pasiekimai neatsiejami nuo mokslo potencialo, kuris buvo sukauptas per daugelį metų ir toliau vystomas. Tai leidžia ne tik parengti aukštos kvalifikacijos darbuotojus verslui, bet taip ieškomi nauji būdai generuoti koherentinę šviesą, sukurti modernius komponentus lazerių realizavimui, bei vykdoma įvairiapusė paieška lazerių taikymams pramonėje ar moksle. Iš kitos pusės, lazerių rinką yra ribota, tačiau šviesos mokslas, fotonika apima daugiau sričių, kurie žymiai išplečia panaudojimo sritis, einant arčiau prie kiekvieno žmogaus poreikių. Pasaulinė fotonikos rinka siekia 154 mlrd. USD (be fotovoltaikos ir displėjų) su 35% kasmetiniu augimu 2015 - 2020 metų perspektyvoje.

Ši programa kūrybingai apjungia mokslininkus, kuriančius naujus koherentinės šviesos šaltinius, optinius elementus jiems, detektorius, antrinius šaltinius, bei ieškančius jiems panaudojimo optinėse sistemose ir medžiagų apdirbimui. Todėl Programoje numatomos veiklos tiesiogiai dera su Lietuvos lazerių ir fotonikos pramonės poreikiais ar ateities perspektyvomis. FTMC Lazerinių technologijų ir Optoelektronikos skyriai turi unikalią mokslinę ir technologinę įrangą: sudėtingų optinių dangų formavimo Uonaplauščio, elektronų pluošto nusodinimo, magnetroninio dulkinimo); puslaidininkinių struktūrų auginimo (MBE); universalias lazerinio mikroapdirbimo sistemas su ns-, ps-, fs- trukmės impulsų lazeriais; technologinę įrangą optinių skaidulų ir lazerinių kristalų apdirbimui; matavimo ir analizės įrangą laidiniams, erdviniams, spektriniams ir struktūriniams bandinių ar prietaisų prototipų tyrimams). Visos tyrėjų grupės įvaldžiusios skaitmeninio modeliavimo metodus saviems uždaviniams spręsti.

Lietuvoje molekulių pluoštelių epitaksijos technologija puslaidininkinių sluoksnių ir jų darinių auginimui yra naudojama tik FTMC Optoelektronikos skyriaus Optoelektronikos technologijų laboratorijoje, turinčioje du tam reikalingus epitaksijos reaktorius. Šios laboratorijos mokslininkai yra vieni iš nedaugelio pasaulyje įsisavinusių naujos medžiagų grupės - praskiestųjų bismidų, auginimo technologiją. To paties skyriaus Ultrasparčiosios optoelektronikos ir Terahercinės fotonikos laboratorijų specialistai yra pasiekę svarių rezultatų



tirdami terahercinės spinduliuotės generavimo ir detektavimo būdus ir taikydami šią spinduliuotę įvairiems praktiniams uždaviniams spręsti. Lazerinių technologijų skyriaus mokslininkai, sukaupę didelę patirtį lazerių ir lazerinių sistemų kūrimo bei jų panaudojimo medžiagų apdirbimui srityse, pastebimi visame pasaulyje savo darbais ir ryšiais su lazerius naudojančia pramone.

Šia mokslo programa yra siekiama išlaikyti Programoje dalyvaujančių mokslininkų reikiamą tarptautinį mokslinių tyrimų lygį, pritraukiant doktorantus ir tuo sudarant tvirtą pagrindą toliau plėtoti optoelektronikos ir lazerių technologijas, taikyti jas naujose mokslinių tyrimų ir kuriant naujus inovatyvius produktus.

### **5. Tyrimų etapai ir jų charakteristika; detalus įgyvendinimo planas:**

5.1. Terahercinio (THz) dažnių ruožo prietaisų technologijos srityje bus kuriama trinarinių ir keturnarių III grupės bismidų auginimo molekulių pluoštų epitaksijos būdu technologija ir šių sluoksnių pagrindu bus gaminami nauji THz diapazono prietaisai. Visų šių tyrimų metu bus palaikomas pastovus grįžtamasis ryšys su gautųjų medžiagų fizikinių savybių ir prietaisams svarbių charakteristikų matavimais. Bus kuriami paviršiniai THz spinduliuotės impulsų emiteriai, efektyviau verčiantys optinius impulsus į THz impulsus už p-InAs kristalus - geriausius šiuo metu šio tipo emiterius. Tam bus pasitelkiami dariniai su vidiniu elektriniu lauku bei paviršinių plazmonų efektai. Bus siekiama sukurti paviršinį emiterį neturintį anteninės struktūros ribojančios generuojamųjų dažnių juostos plotį. (Optoelektronikos skyriaus Optoelektronikos technologijų ir Ultrasparčiosios optoelektronikos laboratorijos).

GaAs ir GaN nanostruktūrų pagrindu bus kuriami THz jutikliai, veikiantys pasitelkiant karštųjų krūvininkų bei plazmoninius efektus bei perduodami THz šaltiniai; bus projektuojamos ir užsakomos gaminti nitridinės nano-struktūros. Iš tokių struktūrų taip pat bus gaminami antenomis susieti efektyvūs THz jutikliai (karštųjų krūvininkų diodai, Tera-FET'ai) ir THz spinduliuotės šaltiniai (plazmoninės struktūros). Siekiant sukurti efektyvius aukštos skaitinės apertūros lęšius, dažninius ir erdvinius THz pluoštelio filtrus, poliarizatorius bei moduliatorius bei ištirti difrakcinės optikos komponentų tinkamumą THz vaizdinimo sistemose bus kuriami difrakcinės optikos komponentai iš puslaidininkinių (Si, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, GaN) ir metalo sluoksnių. (Optoelektronikos skyriaus Terahercų fotonikos laboratorija).

5.2. THz diapazono sistemų tobulinimo ir naujų jų taikymų paieškos srityje bus kuriamos laikinės THz spektroskopijos sistemos (THz-TDS), aktyvuojamos femtosekundiniais skaidulinių lazerių impulsais ir panaudojančios THz impulsų detektorius su geresne nei 100 fs laikine skyra (dažnių juosta >5 THz). Bus tiriamos elektronų sklaidos į šoninius, didelės efektinės masės slėnius panaudojimo tam galimybės. TOS sistemos pagrindu bus sukurtas THz diapazono elipsometrijos įrenginys, kurio pagrindiniai taikymai yra įvairių anizotropinių medžiagų dielektrinės funkcijos matavimai THz dažnių ruože bei puslaidininkinių, visų pirmą 20 medžiagų (grafenas, pereinamųjų metalų disulfidai), charakterizavimas optinio Hall'o efekto matavimų pagalba. (Optoelektronikos skyriaus Ultrasparčiosios optoelektronikos ir Puslaidininkinių optikos laboratorijos).

Bus sukurtos kompaktiškos spektroskopinės THz vaizdinimo sistemos, dirbančios realiu laiku, kambario aplinkoje. Jas taikant bus orientuojamasi į spektroskopinių vaizdinimo metodų panaudojimą odos ir žarnyno susirgimų diagnostikoje, vėžinių susirgimų ankstyvojoje diagnostikoje, kaulų ir implantų tyrimuose. Taip pat bus atliekamas poliarizacinių THz vaizdinimo metodų įsisavinimas ir taikymas odos tyrimams ir odontologijoje. (Optoelektronikos skyriaus Terahercų fotonikos laboratorija).

THz dažnių juostos įranga tai pat bus pradėta naudoti tekstilės medžiagų tyrimuose. Šioje srityje bus atliekamas įvairių medžiagų ir jų padirbinių identifikavimas THz TDS sistemomis matuojant jų dielektrinės funkcijos spektrus o taip pat sportinei ir specialiajai aprangai skirtų medžiagų pralaidumo vandens garams ir kitoms dujoms nustatymas. (Optoelektronikos skyriaus Ultrasparčiosios optoelektronikos laboratorija kartu su Tekstilės institutu).

5.3. Viduriniojo IR (VIR) diapazono prietaisų ir sistemų technologijų kūrimo bei jų taikymo srityje bus atliekami siauratarpių bismidinių junginių auginimo ant InP ar GaSb padėklų technologijos ir savybių tyrimai. Bus sukurta kvantinių darinių su III grupės bismidais (kvantinės duobės, nanovielelės, kvantiniai taškai) technologija. Bus pagaminti VIR foto- detektoriai: p-i-n, n-B-n ir p-B-p fotodiodai. Bismidai šiuo atveju leis su kurti energijos barjerą valentinėje juostoje ir taip padidinti fotodetektoriaus

jautri. VIR spinduliuotės šaltinių srityje bus gaminami šviesos diodai ir lazeriai. Šviesos diodų generuojamų bangų ilgiai sieks iki 3 m. Sukurtieji VIR diapazono komponentai bus pradėti naudoti kuriant fotoakustinius dujų jutiklius, skirtus taikymams chemijos pramonėje, naftos ir dujų nuotėkių registravimui ar atliekų sąvartynų tvarkyme. (Optoelektronikos skyriaus Optoelektronikos technologijų ir Ultrasparčiosios optoelektronikos laboratorijos kartu su Kauno technologijos universitetu).

5.4. Optinės ir lazerinės technologijos vis plačiau diegiamos įvairiose srityse, įskaitant medžiagų apdirbimą. Naujos medžiagos ar naujos taikymų sritys reikalauja tobulesnių lazerinių šaltinių, su specialiai parinktu bangos ilgiu ar energetiniais ir laikiniais parametrais. Planuojami moksliniai tyrimai, kurie spręs problemas lazeriuose ir ieškos naujų metodų didelės impulso energijos ir išvadinės galios, tinkamo bangos ilgio spinduliuotę, panaudojant optines skaidulas ir kitas kietakūnes aktyvias terpes.

Tyrimai, skirti naujų didelės impulso energijos ir ultra-trumpų impulsų skaidulinių lazerių technologijų sukūrimui koncentruosis į paiešką būdų ultratrumpų impulsų generavimui optinėse skaidulose su ilgalaikiu stabilumu, nenaudojant įsisotinančių sugėriklių. Tyrimai padės išspręsti degradacijos problemas šiuolaikiniuose impulsiniuose skaiduliniuose lazeriuose. Siekiant didelių impulsų energijų ir vidutinių galių iš skaidulinių lazerių, dirbančių ultratrumpų impulsų režimu, bus kuriami ir išbandomi nauji būdai impulsų koherentiniam ir laikiniam apjungimui.

Naujų koherentinės šviesos generavimo ir stiprinimo metodų kietuose kūnuose su didele vidutine ir smailine galia, išvadinė impulsų energija ir gera pluošto sklaidymo kokybe paieškos. Specifinės veiklos apims didelio energijos panaudojimo efektyvumo hibridinių skaidulinių ir kietakūnių lazerių tyrimus ir plėtrą; ir ypač kompaktinių TW klasės lazerių architektūros sukūrimą. Numatomas įvairių plonųjų Yb:YAG monokristalų bei sudėtinų polikristalinių ir aktyviųjų terpių technologijos taikymas didelės vidutinės ir smailinės galios daugialėkiams stiprintuvams, tūrinį Brego gardelių taikymas šviesos impulsų spūdai bei jų pagrindu sukurtų hibridinių skaidulinių-kietakūnių lazerių technologijos, taip pat ir modulinės architektūros kompaktinių TW klasės OPCPA lazerių technologijos plėtra ir įdegimas Lietuvos lazerių pramonės įmonėse. Hibridinių lazerių technologijos bus pritaikytos vidutinės galios trumpų impulsų lazerinių sistemų, skirtų medžiagų apdirbimui, prototipams bei derinamo bangos ilgio labai trumpų impulsų lazerinis šaltiniams skirtiems netiesi nei mikroskopijai sukurti.

5.5. Lazerinio medžiagų apdirbimo technologijos bus vystomos, remiantis šviesos ir medžiagos sąveikos modeliavimu ir tyrimais, atsižvelgiant į įvairios pramonės poreikį lazerinėms technologijoms bei ieškant naujų, inovatyvių būdų plonasluoksnėms, skaidrioms ar biologinėms terpėms modifikuoti lazerio spinduliuote:

5.5.1. lazerio pluošto formavimo būdai, panaudojant specialius optinius elementus ir erdvinis šviesos modulatorius.

5.5.2. specialaus erdvinio skirstinio lazerio pluoštų panaudojimas skaidrių medžiagų apdirbimui ir modifikavimui (nauji stiklo ir safyro pjovimo būdai, mikrokanalinių sistemų formavimas, panaudojant tūrinį jų modifikavimą ir cheminį įsodinimą). Išeiga bus technologijos, diegiamos verslo įmonėse bei komponentai antrinės spinduliuotės generavimui, panaudojant galingas lazerines sistemas.

5.5.3. selektyvaus plonų sluoksnių apdirbimo ir formavimo lazeriais technologijų vystymas plonasluoksnei elektronikai. Įvairių technologijų apjungimas, formuojant aplinką (pilotinę liniją).

5.5.4. Našaus lazerinio apdirbimo metodų vystymas, formuojant funkcinis paviršius dideliame plote, tame tarpe ir panaudojant lygiagretųjį (interferencinį) apdirbimą.

5.6. Lazerių ir lazerinių technologijų progresas neatsiejamas nuo optinių komponentų savybių ir optinių dangų technologijos yra labai svarbios. Bus siekiama pilnai išnaudoti moderniausias jonapluoščio, elektronų pluošto ir magnetroninio dulkavimo metodus ir jų pagrindu sukurti pažangius optinių dangų gamybos procesus lazeriniams optiniams komponentams sukūrimas ir kurti modernias, didelio atsparumo dangas mokslui ir lazerių bei optinei pramonei.

Bus vykdomi darbai, tobulinant tradicines (garinimo elektronų pluoštelio pagalba, jonapluoščio dulkavimo, magnetroninio dulkavimo) optinių dangų dengimo technologijas, pritaikant jas:

5.6.1. mažų įtempių daugiasluoksnių dielektrinių optinių dangų, suformuotų reaktyviojo magnetroninio dulkavimo (RMD) būdu, technologijų vystymas UV-VIS-NIR diapazone, panaudojant  $\text{HfO}_2$ ,  $\text{Sc}_2\text{O}_3$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{SiO}_2$  medžiagas.

5.6.2. IR diapazono daugiasluoksnių optinių ir dangų, suformuotų reaktyviojo magnetroninio dulkavimo būdu, technologijų vystymas, panaudojant a-Si:H, Ge medžiagas.

5.6.3. Skulptūrinių dangų technologijos:

5.6.3.1. fazinių plokštelių, skaidrinančių dangų ir poliarizatorių formavimas ant netiesinių kristalų (BBO, LBO ir kt.) paviršių.

5.6.3.2. porėtų struktūrų pagrindu suformuotos daugiasluoksnės dangos didelės galios lazerinėms sistemoms.

5.6.3.3. skulptūrinių dangų pagrindu suformuotų šurkščių paviršių panaudojimas biosensoriams. Moksliniai tyrimai bus taip pat vykdomi naujose kryptyse:

5.6.4. Atominių sluoksnio dengimo (ALD) technologijų taikymas lazerinių optinių komponentų gamybai. ALD technologija užtikrina aukštos kokybės, stabilią, atsikartojančią plonų sluoksnių struktūrą ant įvairių 2D ir 3D paviršių. ALD technologijos taikymas - perspektyvi kryptis mažų gabaritų (1-2 mm), trumpo židinio nuotolio ir kt. lazerinių optinių komponentų gamybai.

5.6.5. Optinės dangos su metalo salelėmis. Metalų-dielektrinės optinės (MDO) dangos yra viena iš optinių dangų tipų, kuriose į dielektrinių sluoksnių struktūrą įterpiamos metalo nanodalelės, koloninės, spiralinės ir kitokios anizotropinės nanostruktūros. Tokiu būdu, metalas yra ne tik apsaugomas nuo išorės poveikio, bet ir panaudojamas kaip viena iš daugiasluoksnių interferencinių optinių dangų sudedamųjų dalių. Dėl efektyvios sugerties, metalinės -dielektrinės dangos plačiai naudojamos kaip spektriškai selektyvūs sugėrikliai. Praktinės tokių dangų dengimo technologijų taikymo sritys: fotovoltiniai elementai, asimetriniai šviesos dalikliai, spalvoti filtrai, neutralūs atenuatoriai ir kt.

5.6.6. Nanofotoninių struktūrų modeliavimo, projektavimo, kūrimo ir charakterizavimo metodų vystymas. Bangolaidinės nanofotoninės struktūros bus tiriamos, panaudojant įvairias medžiagų platformas: silicis ant oksido (SOI), plazmoninės struktūros (Au:Ag:Pd), Ga N, SiN, stiklai, polimerai. Jos bus modeliuojamos ir tiriamos telekomo C-juostos ir VIR spektriniame diapazone, ieškant pritaikymų jutikliams (biojutikliams, dujų jutikliams (H<sub>2</sub>), netiesinei spektroskopijai (paviršiaus sustiprinta IR sugertis (SEIRA), paviršiaus sustiprinta Ramano sklaida (SERS), paviršiaus sustiprinta suminio dažnio generacija (SESFG)), bei kompaktiškiems integruotiems mikro-žiedinių rezonatorių šviesos šaltiniams. Suprojektuoti ir pagaminti nanofotoninių prietaisų prototipai bus diegiami fotonikos technologijų įmonėse.

Didžioji dalis iš išvardintųjų priemonių sudaro pagrindą visiems Programos metu vykdomiems taikomiesiems darbams, todėl jos bus vykdomos per visą Programos galiojimo laikotarpį.

Konkretūs tyrimai ar prietaisų/technologijų maketai bus išbandomi ir perkeltami į aukštesnę technologinę parengties lygį, kasmet analizuojant programos rezultatus Programos vykdytojų seminaruose.

## **6. Numatomi rezultatai:**

6.1. mokslinės publikacijos aukštą reitingą turinčiuose moksliniuose žurnaluose, parodančios sukurta ar palaikoma aukštą Programos vykdytojų kompetenciją pasauliniu mastu. Šios kompetencijos matomumas bus plečiamas per aktyvų dalyvavimą prestižinėse mokslinėse konferencijose;

6.2. tarptautiniai ir nacionaliniai projektai, kurie bus kaip atšakos į atrinktas kryptis iš šios programos kamieno, panaudojant ir gilinant mokslo žinias ir inovatyvių sprendimų technologinės parengties lygį.

6.3. Veiklos turės vesti prie patentų ar kitos intelektinės nuosavybės generavimo FTMC vardu. Prototipai (pvz. kompaktinės THz vaizdinimo sistemos saugumo reikmėms ar medicininei diagnostikai, naujo tipo lazeriniai šaltiniai, įranga lazerinėms technologijoms realizuoti), kurie bus taikomi aukštųjų technologijų pramonės gaminių ir taikymų rinkai. Bus sukurti nauji optoelektronikos prietaisai ir sistemos, nauji būdai generuoti ir stiprinti lazerinę spinduliuotę kietuose kūnuose ir optinėse skaidulose, siejant spinduliuotės parametrus su taikymų sferos poreikiais energetiniams, spektriniais ir laikiniams parametrams.

## **7. Rezultatų sklaidos priemonės:**

Įvertinant programoje dalyvausiančių mokslinių grupių ligšiolinį produktyvumą galima tikėtis, kad gautų mokslinių rezultatų pagrindu kasmet turėtų būti paskelbta ne mažiau kaip 20 mokslinių straipsnių prestižiniuose tarptautiniuose moksliniuose žurnaluose (Q1/Q2), bei perskaityta ne mažiau kaip po 20 mokslinių pranešimų svarbiausiose tarptautinėse konferencijose. Realūs skaičiai labai priklausys nuo finansavimo, tinkamo dalyvauti konferencijose. Ne mažiau kaip pusė mokslinių straipsnių bus skelbiama tokiuose žurnaluose kaip Scientific Report, Journal of Applied Physics, Applied Physics Letters, Optics Letters, Optics Express ir pan. Nauji technologiniai sprendimai bus apsaugomi, pateikiant bent po dvi patentines paraiškas per metus, o technologijos bus diegiamos perduodant jas

verslui ar steigiant atžalines įmones.

Be to, bent šeši mokslininkai iš programoje dalyvausiančių grupių skaito paskaitas Vilniaus universitete ir Vilniaus Gedimino technikos universitete. Todėl nauji moksliniai rezultatai papildys šių universitetų studijų programas; studentams bus pasiūlyti nauji, šiuolaikines mokslo ir technikos tendencijas atspindintys laboratoriniai darbai.

Didelis dėmesys bus skiriamas gautųjų rezultatų sklaidai platesniuose visuomenės sluoksniuose. Kasmet bus paskelbiama ne mažiau kaip po du populiarius straipsnius spaudoje, teikiama informacija kitoms žiniasklaidos priemonėms, ja papildoma FTMC internetinė svetainė.

#### **8. Preliminarus programos lėšų paskirstymas**

(tūkst. Eur):

| Eil. Nr. | Išlaidų pavadinimas                                                                                          | 2017 metais | 2018 metais | 2019 metais | 2020 metais | 2021 metais | Visai programai (suma) |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|------------------------|
| 1.       | Programai skirti norminiai etatai, lėšos                                                                     | 32<br>307   | 32<br>307   | 32<br>307   | 32<br>307   | 32<br>307   | 1535                   |
| 2.       | Kitos lėšos planuojamos programai vykdyti (iš kitų, institutui skirtų valstybės biudžeto bazinio finansavimo | 307         | 307         | 307         | 307         | 307         | 1535                   |
|          | Iš viso                                                                                                      | 614         | 614         | 614         | 614         | 614         | 3070                   |

#### **9. Programos trukmė.**

Programos pradžia 2017 - 2021 metai.

#### **10. Programos vadovas**

dr. Gediminas Račiukaitis, vyriausiasis m. d., tel.: 2644868;  
g.raciukaitis@ftmc.lt

**SUDĖTINGŲ SISTEMŲ DINAMIKA IR CHARAKTERIZAVIMAS**

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p><b>1. Programos vykdytojas</b> – Valstybinis mokslinių tyrimų instituto Fizinių ir technologijos mokslų centras (toliau – FTMC).</p> <p>Norminiai etatai skirti programai – 13.</p> <p><b>2. Programos tikslai:</b></p> <p>2.1. Netiesinių procesų chaotinėse sistemose, neuroniniuose tinkluose ir nanostruktūrose modeliavimas.</p> <p>2.2. Karštųjų elektronų ir fononų dinamikos bei fliktuacijų tyrimas.</p> <p>2.3. Sudėtingų megasistemų charakterizavimas ir modeliavimas.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <p><b>3. Programos uždaviniai:</b></p> <p>3.1. Sudėtingų neuroninių tinklų tyrimas, chaoso ir sinchronizacijos valdymo algoritmų bei elektroninių valdiklių kūrimas.</p> <p>3.2. Klasikinių ir kvantinių elektroninių sistemų bei terahercinės spinduliuotės šaltinių modeliavimas.</p> <p>3.3. Susietos elektronų-fononų sistemos fliktuacijų ir dinamikos tyrimas.</p> <p>3.4. Plazmonų vaidmens stipriai sužadintų elektronų ir fononų dinamikai tyrimas.</p> <p>3.5. Megasistemų charakterizavimo metodų kūrimas ir taikymas.</p> <p>3.6. Sudėtingų megasistemų chemodinaminės evoliucijos tyrimas (2,5 norminio etato).</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| <p><b>4. Metodologinis tyrimų pagrindimas:</b></p> <p>4.1. Sudėtingų neuroninių tinklų tyrimas, chaoso ir sinchronizacijos valdymo algoritmų bei elektroninių valdiklių kūrimas. Sudėtingų neuroninių tinklų bei chaoso ir sinchronizacijos valdymo algoritmų tyrimai bus atliekami analiziniais ir skaitmeniniais metodais. Analiziniai tyrimai bus vykdomi, taikant netiesinės dinamikos teorijos metodus: lėtų ir greitų procesų atskyrimo metodą, vidurkinimo metodą, fazinės redukcijos metodą ir kt. Taip pat bus naudojami neseniai pasiūlyti Ott-Antonsen bei Lorentzian anatz metodai (Ott &amp; Antonsen 2008, Chaos, 18, 037113; Montbrió et al. 2015, Phys. Rev. X 5, 021028), kuriais sudėtingą neuroninių tinklų sistemą termodinaminėje riboje galima redukuoti į keleto paprastų diferencialinių lygčių sistemą. Analiziniai rezultatai bus lyginami su skaitmeniniais suformuluotų uždavinių tyrimais naudojant standartinius diferencialinių lygčių sprendimo algoritmus.</p> <p>Konstruojant elektroninius valdiklius bus naudojama ELECTRONICS WORKBENCH PROFESSIONAL ir WOLFRAM MATHEMATICA programinė įranga bei elektroninės matavimo priemonės: analoginiai ir skaitmeniniai oscilografai, spektro analizatoriai, aukštųjų ir žemųjų dažnių generatoriai, kita fizikinė įranga.</p> <p>4.2. Klasikinių ir kvantinių elektroninių sistemų bei terahercinės spinduliuotės šaltinių modeliavimas. Klasikiniai tyrimai bus atliekami analitiniais bei skaitmeninio modeliavimo metodais. Analitiniuose modeliuose bus naudojamas hidrodinaminis artėjimas. Skaitmeninis modeliavimas bus atliekamas, naudojant mūsų sukurtą vertikalios elektronų pernašos heterogeninėse struktūrose modeliavimo programą (Reklaitis 2008, Phys. Rev. B 77, 153309; Reklaitis 2012, J. Appl. Phys. 112, 093706). Ši programa modeliuoja krūvio nešėjų dinamiką impulsinėje erdvėje Monte Karlo metodu ir jų pernašą realioje erdvėje, sprendžiant Puasono lygtį. Kai kuriuose modeliuose bus suderintinai sprendžiama Šredingerio lygtis ir lygtys, aprašančios karštų fononų dinamiką bei rekombinacijos procesus.</p> <p>Kvantiniuose tyrimuose bus apsiribojama dvimačiais uždaviniais, kurie nereikalauja didelių resursų: turimas personalinis kompiuteris ir parašytos C++ programos, kurių pagrindą sudaro paprastųjų diferencialinių lygčių sistemų sprendimas bei standartiniai veiksmai su matricomis, yra pakankami pirmajame tyrimų etape. Analizinių skaičiavimų palengvinimui bei tarpinių rezultatų vizualizacijai bus naudojami Maple12 ir MatLab2014 paketai, kurie buvo įsigyti anksčiau.</p> <p>4.3. Susietos elektronų-fononų sistemos fliktuacijų ir dinamikos tyrimas. Uždavinys išsiskaido į dvi dalis. Pirmosios dalies tikslas yra susietos (ir karštos) elektronų-fononų sistemos vaidmens</p> |

didelės galios tranzistoriuose tyrimas. Antrosios dalies tikslas – taškinių defektų kietuosiuose kūnuose, tinkamų kvantiniam informacijos apdorojimui, teorinis tyrimas naudojant *ab-initio* metodus.

Tirsime karštos elektronų-fononų sistemos savybes tranzistoriuose (karštųjų fononų efektą) (Matulionis 2013, *Semicond. Sci. Technol.* 28, 074007). Naudosime eksperimentinį fluktuacinės spektroskopijos metodą (Matulionis et al. 2010, *Proc. IEEE*, 98, 1118) elektrinės galios konversijos efektyvumui ir šilumos kaupimuisi kanale vertinti. Fluktuacijų atvaizdai rasti spėsime Bolcmano lygtį, naudodami Monte-Karlo metodą susietajai elektronų-fononų sistemai.

Tirsime elektronų ir fononų dinamiką taškiniuose defektuose: (i) pavienių fotonų emiterių kvantinį našumą, liuminescencijos spektrus; (ii) kvantinių bitų sukinių inicializavimo mechanizmus. Naudosime kodus quantum espresso, abinit. Bus tiriami defektai deimante, SiC, h-BN, GaN ir kitose medžiagose.

4.4. Plazmonų vaidmens stipriai sužadintų elektronų ir fononų dinamikai tyrimas. Pagrindinis tikslas – suprasti fononinio-plazmoninio rezonanso fiziką su taikymu į plazmoniką ir terahercų generaciją. Nagrinėsime tolimojo infraraudonojo diapazono ir terahercų diapazono sąsajas, esant stipriems elektriniams sužadiniams plačiatarpiuose poliniuose puslaidininkiuose. Tirsime, kokie dar sužadiniai atsiranda, kai karštieji elektronai sužadina karštuosius (polinius) LO fononus, o šie – suyra. Tirsime plazmonų vaidmenį karštųjų fononų suirime – teoriškai uždavinys neišspręstas net dielektrinės funkcijos artinyje. Ieškosime tinkamų sąlygų plazmos generacijai GaN heterodariniuose su 2DEG dujomis realizuojant fononinį-plazmoninį rezonansą. Naudosime skaitmeninį sferinių harmonikų Bolcmano (SHB) lygties sprendimo metodą (Ramonas & Jungemann, 2015, *J. Computational Electronics*, 14, 43), įskaitant elektronų-fononų sąveiką 2DEG elektronų dujose. Taip pat naudosime karštųjų elektronų fluktuacijų eksperimentinį metodą (Šermukšnis et al. 2015, *J. Appl. Phys.*, 117, 065704) mikrobangų ruože (~40 GHz) fononiniam-plazmoniniam rezonansui tirti.

4.5. Megasistemų charakterizavimo metodų kūrimas ir taikymas. Galaktikų aptikimo ir charakterizavimo algoritmai bus kuriami dirbtinių konvoliucinių neuroninių tinklų pagrindu (Sander et al. 2015, *MNRAS* 450, 1441). Jie skirti automatizuotai įvairių teleskopų archyvinį stebėjimo duomenų (skaitmeninių nuotraukų ir matavimų katalogų) analizei. Algoritmai bus apmokomi, atliekant realistišką stebėjimo duomenų modeliavimą plačiame objektų populiacijos chemodinaminio ir spektrofotometrinių parametrų diapazone. Tikimiausios objektus charakterizuojančių parametrų vertės bus nustatomos, sprendžiant atvirkštinius uždavinius MCMC (angl. *Markov Chain Monte Carlo*) šeimos algoritmais (Brewer & Foreman-Mackey 2016, <http://arxiv.org/abs/1606.03757>).

4.6. Sudėtingų megasistemų chemodinaminės evoliucijos tyrimas. Galaktikų chemodinaminė evoliucija bus tirama, remiantis daugiažoniu stochastinės žvaigždėdaros modeliu (Mineikis & Vansevičius 2015, *Baltic Astron.* 24, 223), įgalinančiu ištirti plačią fizinių, galaktikos savybes nusakančių, parametrų erdvę ir įvertinti stebimų parametrų stochastiškumo įtaką galaktikų evoliucinių scenarijų atkūrimui. Skaitmeninis modeliavimas bus atliekamas, naudojant hibridinį SPH/N-kūnų algoritmu paremtą kodą GADGET-3 (<http://wwwmpa.mpa-garching.mpg.de/gadget>). Taip pat bus atliekama įvairialypė modelių analizė ir vizualizacija, kokybinis ir kiekybinis panašumo į realių sistemų savybes tikrinimas.

Stebėjimo duomenų analizei, modelių skaičiavimui ir atvirkštinių uždavinių sprendimui bus naudojami laboratorijos daugiaprocesorinis skaičiavimų serveris ir superkompiuteris „Fizika 2000“.

## **5. Tyrimų etapai ir jų charakteristika; detalus įgyvendinimo planas:**

5.1. Sudėtingų neuroninių tinklų tyrimas, chaoso ir sinchronizacijos valdymo algoritmų bei elektroninių valdiklių kūrimas (3 norminiai etapai).

I etapas (2017–2019 metai).

Bus nagrinėjami neuroniniai tinklai sudaryti iš paprastų neuronų modelių aprašomų fazinio osciliatoriaus lygtimis, teta-neurono lygtimis ir kt. (Kuramoto 1984, *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence*, 165 p., Springer-Verlag; Ermentrout 1996, *Neural-Comput.* 8, 979). Tirsime sinchronizacijos efektus tokiuose tinkluose, kai kiekvienas neuronas sąveikauja su kiekvienu sinaptinio tipo ryšiu. Tokią globalią sąveiką galima aprašyti vidutiniu lauku. Mes nagrinėsime termodinaminę ribą, kai osciliatorių skaičius artėja prie begalybės. Pagrindinis tikslas yra redukuoti tokios sistemos dimensiją, t. y., iš mikroskopinių lygčių išvesti paprastų lygčių sistemą makroskopinių kintamųjų dinamikai aprašyti. Taip pat bus kuriami ir tobulinami įvairūs chaoso ir sinchronizacijos valdymo metodai. Jie bus taikomi dinaminiam procesams neuroniniuose tinkluose

valdyti. Neuroninių tinklų sinchronizacijos valdymo uždaviniai bus nagrinėjami, naudojant tiek mikroskopinius, tiek ir makroskopinius tinklų modelius.

Planuojama sukurti elektroninį valdiklį neuroninio tipo osciliatorių rimties būsenų stabilizavimui. Stabilizuojantys impulsai (100-200 Hz) bus perduodami aukšto (3-30 MHz) ar labai aukšto (30-300 MHz) dažnio radijo bangomis. Bus suprojektuotas ir pagamintas veikiantis valdiklio maketas.

II etapas (2020–2021 metai).

Bus tęsiami tyrimai neuroninių modelių redukcijos srityje ir skaitmeniškai nagrinėjami neuroniniai tinklai, sudaryti iš sudėtingesnių neuronų modelių: FitzHugh-Nagumo, Morris-Lecar, Hodgkin-Huxley ir kt. (FitzHugh 1955, Bull. Math. Biophys., 17, 257; Morris & Lecar 1981, Biophys. J., 35, 193; Hodgkin & Huxley 1952, J. Physiology, 117, 500). Taip pat, nagrinėsime sudėtingesnės nei visų-su-visais ryšio topologijos tinklus. Realistiškesnis modelis, aprašantis sąveiką tarp neuronų tinkle, yra bemastelinis tinklas (angl. *scale free network*), kuriame tik nedidelė dalis neuronų turi daug ryšių su kitais neurais, o didesnė dalis – turi nedaug ryšių. Bus toliau kuriami ir tobulinami įvairūs chaoso ir sinchronizacijos valdymo metodai ir taikomi sudėtingesnių neuroninių tinklų dinaminiams procesams valdyti.

Planuojama sukurti elektroninį valdiklį neuroninio tipo susietųjų osciliatorių ansamblių desinchronizavimui. Desinchronizuojantys impulsai bus perduodami aukšto (3-30 MHz) ar labai aukšto (30-300 MHz) dažnio radijo bangomis. Bus suprojektuotas ir pagamintas veikiantis valdiklio maketas.

5.2. Klasikinių ir kvantinių elektroninių sistemų bei terahercinės spinduliuotės šaltinių modeliavimas (1 norminis etapas).

I etapas (2017–2019 metai).

Klasikiniame modeliavime bus tęsiami THz spinduliuotės šaltinių tyrimai. Lėta elektronų ir skylių rekombinacija yra pagrindinė priežastis, ribojanti heterogeninių impulsinių THz šaltinių efektyvumą, todėl bus tiriama galimybė sukurti struktūras, kuriose vyktų greita tunelinė rekombinacija. Taip pat bus nagrinėjama karštų optinių fononų įtaka impulsinių THz šaltinių efektyvumui. Be to, bus tiriami optiniai maišikliai, generuojantys pastovią terahercinę spinduliuotę. Numatoma pasiūlyti naujo tipo daugiasluoksnius optinius maišiklius (sudarytus iš platių *i*-sluoksnių ir siaurų heterogeninių barjerų) veikiančius dažnių ruože iki 1 THz.

Kvantiniuose tyrimuose bus nagrinėjami dvimačiai (2D) elektronų spektrai, didžiausią dėmesį skiriant kraštinių būsenų atsiradimui, kurios, kaip dabar žinoma (Hasan & Kane 2010, Rev. Mod. Phys. 82, 3045), apsprendžia daugelį žematemperatūrinių elektrinių, akustinių bei optinių plokščių nanostruktūrų (grafenas, topologiniai izoliatoriai, kvantinio Holo bei sukininio kvantinio Holo sistemos) charakteristikų. Pagrindinis tyrimų tikslas – analizinių asimptotinių įvertinimų, būdingų daugeliui minėtų 2D sistemų, paieška, pasitelkiant galimus mažus parametrus, sudarytus iš valdančių elektromagnetinių laukų amplitudžių bei charakteringų elektronų energijų.

II etapas (2020–2021 metai)

Klasikiniuose tyrimuose bus analizuojamas nitridinių šviesos diodų (LEDų) efektyvumo mažėjimas didėjant srovei. Šiuo metu skaitmeniniai LED diodų tyrimai yra atliekami komercinėmis programomis, kurios naudoja dreifinį-difuzinį artėjimą ir neįskaito karštų elektronų kvazibalistinio transporto ypatumų. Numatoma sukurti mikroskopinio LED diodų modeliavimo programą, kuri įskaitytų šiuos ypatumus. Tikimasi identifikuoti pagrindines LED diodų efektyvumo mažėjimo priežastis ir nustatyti būdus kaip minimizuoti šį reiškinį. Kvantiniai tyrimai bus išplėsti į elektronų paketų judėjimo, sklaidos ir valdymo analizę, skiriant pagrindinį dėmesį paketams, sudarytiems iš kraštinių elektrono būsenų, ir ieškant ypatingų savybių būdingų metamedžiagoms.

5.3. Susietos elektronų-fononų sistemos fliktuacijų ir dinamikos tyrimas (3 norminiai etapai).

I etapas (2017–2019 metai)

Tirsime GaN tranzistorių protakas, talpinančias didelio tankio 2DEG elektronų dujas, esant stipriam elektriniam sužadimui, eksperimentiškai stebint elektroninės sistemos pernašą bei atsaką fliktuacijų domene. Atliksime fliktuacijų spektrų bei elektronų pernašos Monte-Karlo skaičiavimus, įskaitydami karštųjų fononų efektą. Elektronų transporto eksperimentiniai tyrimai tranzistorių 2DEG protakose, esant stipriai sužadintai elektronų-fononų sistemai, tačiau esant silpnai sužadintam akustinių fononų termostatui.

Bus vystoma metodologija sudėtingiems taškinių defektų liuminescencijos spektrams skaičiuoti (Alkauskas et al. 2014, New J. Phys. 16, 073026). Ji bus išplėsta polinėms medžiagoms ir pritaikyta

defektams deimante, SiC (skirtinguose politipuose), h-BN bei kitose medžiagose. Taip pat bus vystomi nespindulinės krūvininkų pagavos praktiniai *ab-initio* skaičiavimai. Konkrečiau, bus išvystyti, taip vadinamos, kuloninės pagavos skaičiavimai ir toliau tobulinami multifononinės emisijos skaičiavimai (Alkauskas et al. 2014, Phys. Rev. B 90, 075202).

II etapas (2020–2021 metai).

Realistinis fononinio-plazmoninio rezonanso valdymas priklausomai nuo tranzistoriaus elektronų pasiskirstymo profilio protakoje ir jos struktūros. Karštųjų elektronų triukšmo temperatūros interpretacija labai stiprių elektrinių sužadinių atveju.

Defektų sužadintų elektroninių būsenų modeliavimas, naudojant įvairias metodikas, tokias kaip daugiadalelę trikdžių teoriją, tankio matricos renormalizacijos grupę. Fotodinamikos taškiniuose defektuose tyrimas, siekiant išsiaiškinti optinių nestabilumų kilmę. Programos pabaigoje bus išvystyta pavienių fotonų emitterių kvantinio našumo skaičiavimo *ab-initio* metodika.

5.4. Plazmonų vaidmens stipriai sužadintų elektronų ir fononų dinamikai tyrimas (2 norminiai etapai).

I etapas (2017–2019 metai).

Kursime sferinių harmonikų Boltzmano lygties (SHB) sprendimo metodą, kuris įskaitytų ir elektroninę-fononinę sąveiką. Tirsime elektronų ir fononų dinamiką, naudojantis SHB metodu. Elektronų ir fononų fliktuacijų atvaizdo ieškojimas, naudojantis SHB metodu – karštųjų elektronų ir karštųjų LO fononų fliktuacijų spektrų skaičiavimas, elektronų chaotinio judėjimo mikrobangų ir terahercų ruožuose sąsajos, rezonanso kilmė.

Eksperimentinis elektronų greičio fliktuacijų tyrimas ~40 GHz mikrobangų ruože. Perspektyvių GaN pagrindo 2DEG protakų dizaino paieška, siekiant efektyviai perkelti elektronų mikrobangų ruožo greičio fliktuacijas į terahercų ruožą. Optimalaus 2DEG tankio parinkimas protakose ir plazmonų efekto karštųjų fononų suirime tyrimas.

II etapas (2020–2021 metai).

Sferinių harmonikų metodo taikymas elektronų ir fononų fliktuacijoms mikrobangų-terahercų ruožuose 2DEG atveju. Fliktuacijų eksperimento interpretacija naudojant SHB metodą. Optimalių sąlygų, LO fononų koherentinei generacijai karštaisiais elektronais, paieška. Plazminių virpesių generacijos karštaisiais fononais sąlygos. Susietųjų fononų-plazmonų modų dinamikos teorinis tyrimas 2D ir 3D atvejais. Fononinio-plazmoninio rezonanso tyrimas dielektrinės funkcijos artinyje. 2DEG plazmonų spektrų skaičiavimai. Fononų-plazmonų rezonanso modelio įtraukimas į SHB modelį.

5.5. Megasistemų charakterizavimo metodų kūrimas ir taikymas (1,5 norminio etato).

I etapas (2017–2019 metai).

Bus kuriamas konvoliucinių neuroninių tinklų pagrindu veikiantis nykštukinių galaktikų aptikimo algoritmas, jo apmokymui naudojant Hubble kosminio teleskopo archyvinės nuotraukas. Algoritmo pritaikymo būsimai „Euclid“ kosminei observatorijai (<http://sci.esa.int/euclid>) galimybės bus tiriamos, modeliuojant šios kosminės observatorijos stebėjimus. Algoritmas bus optimizuojamas, siekiant nustatyti parametrus tiek artimoms, į pavienes žvaigždes išskiriamoms, tiek tolimoms, į žvaigždes neišskiriamoms, nykštukinėms galaktikoms. Šio uždavinio sprendimui kartu bus naudojama skaitmeninėse nuotraukose ir matavimų kataloguose esanti stebėjimų informacija.

II etapas (2020–2021 metai).

Objektų aptikimo uždavinys yra betarpiškai susijęs su klasifikavimo uždaviniu, o šis – su spektrofotometrine objektų evoliucija, todėl nykštukinių galaktikų aptikimo algoritmo tolimesnis tobulinimas bus paremtas chemodinaminiais evoliucijos modeliais (žr. 6 uždavinį), kurie leis atsižvelgti į stebėjimo parametrų išsigimimus ir jų stochastinį pobūdį priklausomai nuo galaktikos masės ir amžiaus.

5.6. Sudėtingų megasistemų chemodinaminės evoliucijos tyrimas (2,5 norminio etato).

I etapas (2017–2019 metai).

Bus sukurtas žvaigždėdaros istorijos atkūrimo algoritmas, remiantis pavienių žvaigždžių stebėjimo duomenų interpretavimu, taikant Bayes'o metodą ir remiantis žvaigždžių evoliucijos modeliais (<http://stev.oapd.inaf.it>). Bus nagrinėjami žvaigždėdaros procesai ekstremaliomis sąlygomis. Sukursime modelį, paaiškinantį mūsų Galaktikos centrinės dalies aktyvumo poveikį visai sistemai nuo centrinės dalies iki halo – žvaigždėdaros pokyčius, dujų telkinių morfologiją ir dinamiką. Modelį panaudosime žvaigždėdaros aktyvumo epizodo savybėms nustatyti, naudojant realių



struktūrų stebėjimų duomenimis. Sukursime ir įdiegsime skaitmeninį modelį, kuris įgalins tirti dujų telkinių atsaką į ekstremalias aplinkos sąlygas ir žvaigždėdaros pokyčius.

II etapas (2020–2021 metai).

Naudojant sukurtą žvaigždėdaros istorijos atkūrimo algoritmą, bus atliktas homogeniškas Hubble teleskopu stebėtų į pavienės žvaigždes išskiriamų nykštukinių galaktikų chemodinaminės evoliucijos tyrimas. Mūsų Galaktikos aktyvumo modelį pritaikysime kitoms galaktikoms ir nustatysime aktyvumo pėdsakų aptikimo galimybes. Panaudosime stebėjimų informaciją ir nustatysime tikėtinus buvusios žvaigždėdaros aktyvumo epizodus artimose galaktikose. Pritaikysime ekstremalios žvaigždėdaros modelį tirdami mūsų Galaktikos ir artimų galaktikų žvaigždžių spiečių sistemas.

#### **6. Numatomi rezultatai:**

Straipsniai tarptautiniuose mokslo žurnaluose, turinčiuose aukštą citavimo indeksą (Thomson Reuters Web of Knowledge, Q1-Q2) – 40.

Bus suprojektuotas ir pagamintas veikiantis valdiklio maketas; bus išvystyta pavienių fotonų emiterių kvantinio našumo skaičiavimo *ab-initio* metodika; sukurtas ir įdiegtas skaitmeninis modelis, kuris įgalins tirti dujų telkinių atsaką į ekstremalias aplinkos sąlygas ir žvaigždėdaros pokyčius.

#### **7. Rezultatų sklaidos priemonės:**

Pranešimai tarptautinėse mokslinėse konferencijose – 40;

Mokslo populiarinimo paskaitos, straipsniai spaudoje ir internete, televizijos, radijo laidos – 30.

#### **8. Preliminarus programos lėšų paskirstymas (tūkst. Eur):**

| Eil. Nr. | Išlaidų pavadinimas                                                                                                | 2017 metais | 2018 metais | 2019 metais | 2020 metais | 2021 metais | Visai programai (suma) |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|------------------------|
| 1.       | Programai skirti norminiai etatai, lėšos                                                                           | 13<br>125   | 13<br>125   | 13<br>125   | 13<br>125   | 13<br>125   | 625                    |
| 2.       | Kitos lėšos planuojamos programai vykdyti (iš kitų, institutui skirtų valstybės biudžeto bazinio finansavimo lėšų) | 125         | 125         | 125         | 125         | 125         | 625                    |
|          | Iš viso                                                                                                            | 250         | 250         | 250         | 250         | 250         | 1250                   |

#### **9. Programos trukmė:** 2017–2021 metai.

#### **10. Programos vadovas:**

Prof. dr. Vladas Vansevicius, vyriaus. m. d., tel.: 860871571; vladas.vansevicius@ftmc.lt

**TEKSTILĖS TECHNOLOGIJOS IR TECHNINĖS TEKSTILĖS APRANGOS SISTEMOS**

**1. Programos vykdytojas** – Valstybinis mokslinių tyrimų instituto Fizinių ir technologijos mokslų centras (toliau – FTMC).

Norminiai etatai skirti programai – 10.

**2. Programos tikslas** - Vystyti mokslinius tekstilės technologijų bei tarpdisciplininius tyrimus, taikyti pažangius medžiagų savybių tyrimo metodus ir ekologiškas gamybos technologijas, kuriant funkcinę ir techninę tekstilę, gerinančią žmogaus gyvenimo kokybę, užtikrinančią saugų darbą, saugančią nuo įvairių grėsmių sveikatai ir gyvybei, padedančią spręsti pagyvenusių žmonių ir ligonių priežiūros problemas bei padedančią aktyviai sportuojantiems.

**3. Programos uždaviniai:**

3.1. Vykdyti mokslinius tyrimus, kuriant išmaniąją tekstilę, integruojant dėvimąją elektroniką į įvairių struktūrų elektrai laidžias tekstilės medžiagas, kurioms elektrinis laidumas suteikiamas, panaudojant gamtinius ir cheminius pluoštus su įvairios prigimties laidžiais priedais bei formuojant specialias elektrai laidžias dangas ar elektrai laidžius kontūrus įprastomis (sietiniais marginimo šablonais) ir skaitmeninio marginimo technologijomis, suteikiant tekstilės medžiagoms gebėjimą perduoti ar keisti elektrinius signalus.

3.2. Vystyti funkcinės tekstilės technologijas, skirtas gaminių termoreguliacinių savybių gerinimui, taikant fizinio virsmo medžiagas, šilumos kaupimo gebą didinančių mineralų priedus, bio- ir organinius polimerus, funkcinės mikroporingas dangas ir plėveles bei gamtos išteklius ir energiją tausančius tekstilės medžiagų apdailos metodus: plazminį modifikavimą, elektroverpimą, laminavimą karštais polimerų lydalais ir kt. Atlikti teorinius šilumos ir masės mainų tyrimus, taikant daugiaskalius skaitinius modelius ir juos panaudojant tekstilės medžiagų struktūros ir sandaros įtakai integraliems šilumos ir masės mainų rodikliams tirti.

3.3. Vykdyti drabužių, saugančių nuo įvairių grėsmių sveikatai ir gyvybei (balistinio poveikio, elektromagnetinės spinduliuotės ir pan.), teorinius ir technologinius tyrimus: taikant daugiaskalę austų struktūrų ir lanksčių vienkrypčių kompozitų skaitinę analizę, įvertinančią tamprumo, stiprio, plastiškumo ir suirimo reiškinius realiose daugiasluoksnėse tekstilės struktūrose, įvertinti ir išbandyti naujų medžiagų (polimetilmetakrilato, anglies vamzdelių, grafeno darinių ir kt.) panaudojimo galimybes naujos kartos drabužių, apsaugančių nuo balistinio poveikio, kūrimo. Vystyti technologijas, užtikrinančias ilgalaikę apsaugą eksploataavimo metu nuo elektromagnetinės spinduliuotės, taikant įvairios kilmės nanostruktūros junginius ir pluošto paviršiaus cheminį modifikavimą.

**4. Metodologinis tyrimų pagrindimas:**

4.1. Vykdyti mokslinius tyrimus, kuriant išmaniąją tekstilę.

Išmanioji tekstilė priklauso smarkiai besivystančioms ir perspektyvioms technologijoms, galinčioms tekstilės pramonei suteikti naują proveržį, gaminant aukštųjų technologijų didelės pridėtinės vertės produktus. Tai yra tekstilė, kuri reaguoja į įvairius žmogaus kūno ar išorinės aplinkos pokyčius ir gali prie jų prisitaikyti. Tokia tekstilė vis plačiau taikoma sveikatos priežiūros, sporto ir sveikatingumo, mados ir pramogų, karinėje ir saugumo srityse. Išmaniosios tekstilės plėtra yra susidomėję įvairių sričių - naujų tekstilės medžiagų, elektronikos, jutiklių, nanotechnologijų, aprūpinimo energija sistemų ir kt. - mokslininkai, tyrėjai ir gamintojai. Visi išmaniųjų gaminių komponentai - jutikliai, elektronikos elementai, laidininkai ir aprūpinimo energija šaltiniai turi būti patikimai integruoti į tekstilės medžiagas, naudojant kuo mažiau siūlių ir lanksčias laidžias jungtis, išsaugant tekstilei būdingą minkštumą ir komfortiškumą, bei išlikti kuo mažiau pastebimi bei pažeidžiami. Jungiant tekstilės ir elektronikos žinias, galima į tekstilės gaminius integruoti daugelį žinomų elektronikos prietaisų. Ateities vizija – kompiuterija, integruota į kasdieninius rūbus. Tokios dėvimos sistemos automatiškai atpažins savininko veiklą ir aplinkos sąlygas ir prie jų prisitaikys.

Išmaniosios tekstilės aktualumą byloja platus jos potencialių vartotojų ir kūrėjų ratas. Didelį postūmį išmaniosios tekstilės kūrimo padarė kariuomenės poreikiai, gynybos struktūros kartu su apsauginių rūbų dėvėtojais ir toliau išlieka vienomis iš svarbiausių išmaniosios tekstilės vartotojų.

Didžioji dalis mokslinių tyrimų yra skiriama tekstilės elektriniam laidumui, kuris yra išmaniosios tekstilės

pagrindas. Laidumas yra būtinas elektroninėms ar kompiuterinėms funkcijoms atlikti, tačiau taip pat suteikia tekstilei antistatinės ir apsauginės nuo elektromagnetinių spindulių savybes, sugeria infraraudonuosius spindulius ir kt. Be to, laidų tekstilė, kuri geba keisti elektrines savybes dėl išorinių poveikių, gali būti naudojama kaip jutiklis. Elektrinis laidumas medžiagoms gali būti suteikiamas naudojant laidžius pluoštus arba marginimo būdus. Laidžių medžiagų, panaudojant elektrai laidžius pluoštus, gamybos būdai yra pakankamai ištirti ir jau turi komercinį pritaikymą. Tuo tarpu elektrai laidžių grandinių sudarymo tekstilės medžiagoje metodas marginant tekstilės pastomis ar rašalu yra paprastesnis bei pigesnis, lyginant su elektrai laidžių siūlų tekstilės medžiagose panaudojimu, tačiau turi neišspręstų klausimų dėl sidabro turinčių marginimo pastų trapumo bei jų nepakankamo mechaninio atsparumo, medžiagą lankstant.

Išskirtinis dėmesys išmaniosios tekstilės kūrime skiriamas energijos tiekimo sistemoms, reikalingoms aktyvuoti išmaniojoje tekstilėje integruotus elektroninius komponentus. Viena iš naujų energijos tiekimo sistemų kūrimo kryptų - kūno judesių ir kūno šilumos energijos panaudojimas. Yra duomenų apie neorganinių medžiagų - cinko oksido ir bario titanato bei organinių - polivinilidenfluorido nanopluoštų sėkmingą panaudojimą mechaninės (sukimosi, vibracijos ir tempimo) energijos pavertimui į elektros energiją.

#### 4.2. Vystyti funkcinės tekstilės technologijas.

Didėjant žmonių fiziniam aktyvumui bei reikalavimams gyvenimo kokybei, ilgėjant gyvenimo trukmei, svarbu žmogų aprūpinti funkcionaliais, lengvais, prie aplinkos temperatūros pokyčių prisitaikančiais kasdieniais drabužiais. Termoreguliaciniai aprangos aspektai yra ypač aktualūs kuriant apsauginę aprangą, - dirbantiems atliekant sunkų fizinį ar pavojingą darbą ekstremaliose aplinkos sąlygose, netinkami drabužiai gali sukelti šiluminį stresą, kuris savo ruožtu gali sukelti ne tik įvairias ligas, bet ir sumažinti žmogaus fizinį pajėgumą bei sąmoningumą darbo metu. Be funkcinės apsauginės reikalavimų darbo drabužiams keliami ir komforto reikalavimai, - turi būti užtikrintas termofiziologinis komfortas tarp kūno ir gamtinio, t.y. būsenos ar pojūtis, kai nėra nei per šalta, nei per karšta, o kūno išskiriama drėgmė (prakaitas) lengvai pašalinami į aplinką. Tradicinės tekstilės gamybos technologijos dėl procesų derinimo sudėtingumo riboja galimybes vienam gaminiui suteikti keletą skirtingų (multi) funkcinių savybių. Be to, išlieka aktualūs nutekamųjų vandenų valymo, didelių cheminių medžiagų ir žaliavų kiekių panaudojimo bei atliekų perdirbimo klausimai. Todėl, suteikiant ir gerinant tekstilės gaminių funkcines apsauginės ir komforto savybes, bus atliekami nano struktūros medžiagų ir nanotechnologijų taikymo tyrimai, nes nanopluoštų gamybos technologija yra perspektyvi, draugiška aplinkai, nereikalauja didelių energijos sąnaudų, santykinai nebrangi.

Atliekant teorinius šilumos ir masės mainų tyrimus, taikant daugiaskalius modelius, bus nagrinėjama oro ir vandens garų konvekcija mikroklimato sluoksnyje ir tekstilės 3D mikrostruktūroje, audinio (mezginio) sandaros įtaka integraliems šilumos ir masės mainų rodikliams. Bus atliekami šilumos ir masės mainų skaičiavimai, įvertinant vandens garų kondensacijos efektą bei tolimojo infraraudonojo spektro spinduliuotės įtakos tyrimas ir panaudojimas, taikant į tekstilę integruotas bio-keramines nanodaleles.

#### 4.3. Vykdyti drabužių, saugančių nuo įvairių grėsmių sveikatai ir gyvybei (balistinio poveikio, elektromagnetinės spinduliuotės), teorinius ir technologinius tyrimus.

Poreikį toliau kurti ir tobulinti elektromagnetinį spinduliavimą ekranuojančias medžiagas sąlygoja Pasaulinės Sveikatos Organizacijos (PSO) atliekami tyrimai dėl žmogaus sveikatai keliamos elektromagnetinio spinduliavimo grėsmės.

Esant šiuolaikiniam technikos išsivystymo lygiui, žmogų veikia ne tik gamtiniai, bet ir dirbtiniai elektromagnetiniai laukai. Elektromagnetinių bangų (EB) poveikis žmonių sveikatai vertinamas kaip visuotinė pasaulio industrializacijos problema ir kelia visuomenės susirūpinimą.

Elektromagnetinių bangų ekranavimo tyrimai - vieni svarbiausių tarpdisciplininių tyrimų srityje, kadangi tam tikrų dažnių EB neigiamai veikia gyvuosius audinius ir elektronines sistemas. Nustatyta, jog pavojų gali sukelti radijo dažniai diapazone nuo  $10^4$  iki  $10^{12}$  Hz, o jame labiausiai paplitęs yra mikrobangų ruožas nuo 1 GHz iki 40 GHz. Šiame dažnių ruože ir bus atliekami tyrimai.

Pastaraisiais metais plačiai tiriama galimybė apsaugai nuo elektromagnetinių bangų panaudoti elektrai laidžias tekstilės medžiagas. Siekiant padidinti pluoštų ar medžiagų elektrinį laidumą, naudojamos įvairios technologijos. Ankstesniuose mūsų darbuose buvo tiriama medžiagos su įkomponuotais laidžiais pluoštais - anglies, metalo ir kt.

Šiuo metu ypatingai didelis mokslininkų dėmesys teikiamas taip vadinamų natūraliai laidžių polimerų panaudojimui ne tik elektronikos pramonėje, bet ir kuriant laidžius tekstilės pluoštus bei medžiagas. Tai tokie polimerai, kaip polianilinas (PANI), polipirolas (Ppy), politiofenas (PT), poli (perinaftalenas) (Pna). Šių polimerų privalumas yra tas, kad jų laidumas gali būti lengvai keičiamas, įterpiančiam juos tam tikras savybes suteikiančių priemaišų, t.y. legiruojančių. Kiti laidžių polimerų privalumai – atsparumas korozijai, perdurbimo patogumas, EB ekranavimas ne tik dėl atspindžio (kaip metalų atveju), bet ir dėl sugerties, kas leidžia naudoti šiuos polimerus ten, kur reikalingas ypatingai didelis EB ekranavimas.

Institute sukurti tekstilės medžiagų pavyzdžiai, formuojant elektrai laidžias dangas su natūraliai elektrai laidžiu polimeru - (3,4-etilendioksitiofenu) apjungtu su polistireno sulfonatu - (PEDOT-PSS). Gauti rezultatai patvirtino darbo teorines prielaidas, kad medžiagos, padengtos laidžiais polimerais, gali ne tik atspindėti, bet ir gerai sugerti elektromagnetines bangas, tokiu būdu užtikrindamos geresnę apsaugą, negu medžiagos su metalizuotais siūlais, kurių ekranavimas pagrįstas tik atspindžiu. Tačiau gauti rezultatai netenkina dėl menko tvarumo kartotiniam skalbimui skaičiui. Todėl tikslinga toliau tęsti šiuos tyrimus, siekiant sustiprinti pluošto ir elektrinį laidumą suteikiančių organinių polimerų tarpusavio sąveiką.

Norint sukurti medžiagas, efektyviai ekranuojančias elektromagnetines bangas, ir tinkamai įvertinti jų elektromagnetinės apsaugos efektyvumą, reikalingos įvairių mokslo sričių specialistų žinios ir šiuolaikinė tyrimų bazė. Galimybės naudotis FTMC esančiais šiuolaikiniais tyrimo prietaisais bei technologinius procesus modeliuojančia įranga sudaro realų pagrindą vykdyti tokius tarpdisciplininius tyrimus.

Naujų apsaugos priemonių kūrimo tyrimai, kaip itin perspektyvūs įtraukti į ES technologinę platformą tekstilės ir aprangos pramonei, akcentuojant naujos kartos intelektualią apsaugos priemonių kūrimą. Todėl numatoma tęsti hibridinių daugiasluoksnių tekstilės medžiagų panaudojimo asmeninėms apsaugos priemonėms bei įvairių mechatronikos priemonių, tokių kaip jutikliai, valdikliai, vykdykliai, analizės ir jų panaudojimo ateities išmaniosioms apsauginėms priemonėms, ne tik informuojančioms, bet ir aktyviai reaguojančioms į aplinkos ir vartotojų sveikatos ar fizinės būklės pakitimus, tyrimus.

## **5. Tyrimų etapai ir jų charakteristika; detalus įgyvendinimo planas:**

5.1. Vykdyti mokslinius tyrimus, kuriant išmaniąją tekstilę. Elektrai laidžios tekstilės medžiagos, kurios gali būti naudojamos pagrindu išmaniesiems gaminiams, bus kuriamos mezgimo ar siuvinėjimo technologijomis, naudojant pluoštus su elektrai laidžiais priedais ir/ar laidžius vienagijus siūlus. Formuojant specialias elektrai laidžias dangas ar elektrai laidžius kontūrus įprastomis ir skaitmeninio marginimo technologijomis, bus naudojami natūraliai laidūs polimerai ir anglies nanostruktūriniai preparatai (grafeno dariniai, nano vamzdeliai). Bus ieškoma technologinių sprendimų šių medžiagų apsaugai nuo drėgmės ir korozijos, tiriami elektros laidumo, gebėjimo perduoti ar keisti elektrinius signalus pokyčiai, esant eksploatacinėms tempimo deformacijoms, bei vartojamųjų savybių patvarumas (atsparumas daugkartinėms mechaninėms deformacijoms ir skalbimo–valymo procedūroms). Parenkant/sukuriant reikiamų parametrų elektroninius elementus bei apjungiant tyrimus elektronikos komponavimo ir jos komponentų tarpusavio sujungimo srityje su tekstilės medžiagų tyrimais, bus kuriami patikimi elektronikos integravimo į tekstilės gaminius metodai. Realizuotų techninių/technologinių sprendimų racionalumas, efektyvumas ir patikimumas bus vertinami taikant šiuolaikinius tyrimo metodus bei vykdant suprojektuotų gaminių eksploataavimo imitacinėmis ir realiomis sąlygomis išbandymo programas. Vykdam šį uždavinį planuojama:

5.1.1. elektrai laidžių pluoštų integravimo į tekstilės medžiagas, skirtas naudoti sumaniuose tekstilės gaminiuose įvairioms elektros grandinėms sudaryti, tyrimai, suprojektuotų medžiagų elektrinių savybių bei jų kaitos, esant mechaninėms deformacijoms, ir eksploatacinio patvarumo tyrimai.

5.1.2. elektrinio laidumo tekstilės medžiagoms suteikimo, formuojant dangas, ir elektrai laidžių kontūrų sudarymo marginimo būdu technologiniai tyrimai, elektrinių savybių reikiamoms funkcijoms atlikti vertinimas ir jų patvarumo eksploatacijos metu tyrimai.

5.1.3. elektronikos elementų (jutiklių, vykdyklių, mikroprocesorių, energijos tiekimo šaltinių, jungčių ir kt.), tinkamų kuriamiems sumaniems tekstilės gaminiams, parinkimo, suderinamumo, integravimo į tekstilę patikimumo tyrimai, sumanių gaminių maketų ir prototipų kūrimas ir jų efektyvumo eksploatacinėmis sąlygomis tyrimas.

5.2. Vystyti funkcinės tekstilės technologijas. Atliekant programoje numatytus uždavinius bus taikomos aplinką tausojančios nanotechnologijos - paviršiaus aktyvinimas žemo slėgio neorganinių

dujų plazma, elektroverpimas, skaitmeninis dangų formavimas, laminavimas karštų polimerų lydalais, kurių metu bus įvedamos mikro- ir nanostruktūros medžiagos (bio- ir organiniai polimerai, fazinio virsmo junginių mikrokapsulės, šilumos kaupimo gebą didinantys gamtinių mineralų priedai, elementinės anglies dariniai ir metalai, mikroporingos dangos ir plėvelės).

Naudojant nanopluoštus, medžiagoje galima efektyviai derinti kelias skirtingas funkcijas – didinti medžiagų stiprį, absorbcinę gebą ir porėtumą, atsparumą karščiui, apsaugą nuo elektromagnetinio spinduliavimo, atsparumą vandens prasiskverbimui, gerinti drėgmės (prakaito) transportavimą. Todėl lengvų, funkcinėmis ir komforto savybėmis pasižyminčių medžiagų kūrimui numatoma įsigyti elektroverpimo įrangą. Bus atliekami nanopluoštų fiziniai - cheminiai tyrimai, verpiant iš bio- ir organinių polimerų (poliuretano, polietilenoksido, celiuliozės, chitozano ir kt.) vandeninių ir nevandeninių tirpalų, įvedant į juos stiprio, elektro- ir šilumos laidumo savybes gerinančius priedus (anglies vamzdelius, grafeno darinius, silicio ir kt. nanodaleles).

Daugiasluoksnės struktūros bus kuriamos, ant tradicinės tekstilės substratų užnešant elektroverpimo metodu gautų nanopluoštų klotus. Bus atlikti tyrimai medžiagų sluoksnių sujungimui taikant laminavimo karštais polimerų lydalais ir apdorojimo lazeriu metodus.

Numatoma atlikti išsamią naujų termofiziologinį komfortą apsprendžiančių parametrų nustatymo metodų analizę ir taikyti pažangius tyrimo metodus, vertinant sukurtų medžiagų, skirtų termoreguliacinių savybių gerinimui, funkcionalumą. Vykdam šį uždavinį planuojama:

5.2.1. termoreguliacinių savybių tyrimams, lygiagrečiai su atliekamais cheminiais paviršiaus modifikavimo metodais, bus kuriami daugiaskaliai skaitiniai modeliai, kurie įgalins nustatyti atskirų fizikinių faktorių įtaką bendrai termoreguliacinei sistemai bei prognozuoti šios sistemos elgseną pasikeitus fizinio aktyvumo ir aplinkos sąlygoms. Tai ypač aktualu, kuriant naujas medžiagas bei analizuojant jų dėvėjimo komforto rodiklius.

5.2.2. tekstilės paviršiaus aktyvacijos žemo slėgio dujų plazma, mikro- ir nano- struktūros medžiagų įvedimo bei suteiktų savybių tyrimai.

5.2.3. polimerinių tirpalų paruošimo ir elektroverpimo metodu gautų nanopluoštų fizinių-cheminių savybių tyrimai.

5.2.4. daugiasluoksnių struktūrų iš tekstilės substratų ir nanopluošto klotų jungimo tyrimai.

5.2.5. šilumos ir masės mainų tyrimai, taikant daugiaskalius modelius.

5.3. Vykdyti drabužių, saugančių nuo įvairių grėsmių sveikatai ir gyvybei (balistinio poveikio, elektromagnetinės spinduliuotės), teorinius ir technologinius tyrimus. Kuriant elektrai laidžias medžiagas, skirtas apsauginei aprangai, numatoma formuoti dangas su elektrai laidžiomis kompozicijomis, naudojant marginimą sietiniais šablonais bei numatomą įsigyti skaitmeninio marginimo įrenginį. Sukurtos medžiagos bus charakterizuojamos, nustatant jų elektrostazines savybes bei vertinant jų ekranavimo efektyvumą įvairiuose elektromagnetinės spinduliuotės srityse prieš ir po įvairių apdorojimų, imituojančių dėvėjimo procesus. Ekranavimo efektyvumo tyrimus mikrobangų ruože numatoma atlikti bendradarbiaujant su FTMC Fizikinių technologijų skyriumi.

Siekiant sustiprinti pluošto ir elektrinį laidumą suteikiančių organinių polimerų tarpusavio sąveiką, numatoma atlikti tekstilės medžiagų paviršiaus modifikavimą (cheminiais bei fizikiniais metodais) bei įvesti į kompoziciją chemines medžiagas, gebančias sustiprinti pluošto ir elektrinį laidumą suteikiančių organinių polimerų tarpusavio sąveiką. Atliekant šiuos tyrimus, bus taikomi spektrinės analizės metodai bei funkcinų savybių tvarumo skalbimui įvertinimas.

Drabužių, apsaugančių nuo balistinio poveikio, tyrimai bus tęsiami, išbandant naujų medžiagų (polimetilmetakrilato, anglies vamzdelių, grafeno darinių ir kt.) panaudojimo galimybes. Naujos kartos balistinės apsaugos drabužių funkcinės savybės bus prognozuojamos panaudojant matematinį modeliavimą. Vykdam šį uždavinį planuojama:

5.3.1. skirtingų kompozicijų (su natūraliai elektrai laidžiais polimerais ir su specialiais laidžiais priedais) dangų ir jų užnešimo ant tekstilės medžiagų būdo tyrimai.

5.3.2. suformuotų dangų elektrinio laidumo bei cheminės struktūros įtakos elektromagnetinei spinduliuotei tyrimai.

5.3.3. elektrai laidžių dangų atsparumo dėvėjimui tyrimai ir jų cheminių ryšių su pluoštu stiprinimas cheminės apdailos būdu; optimalių formuojamų dangų parametrų nustatymas.

5.3.4. daugiasluoksnių paketų balistinio stiprumo tyrimai vidutinių greičių ruože.

5.3.5. daugiaskalė austų struktūrų ir lanksčių vienkrypčių kompozitų skaitinė analizė, įvertinanti

tamprumo, plastiškumo ir suirimo reiškinius realiose daugiasluoksnėse tekstilės struktūrose.

5.3.6. tekstilinės apsaugos nuo dūrio skaitiniai modeliai ir analizė.

5.3.7. naujų medžiagų (grafenai ir kt.) mechaninio stiprumo modelių sukūrimas ir panaudojimas tekstilės struktūrų balistinio stiprumo skaitiniuose modeliuose.

#### **6. Numatomi rezultatai:**

6.1. Mokslinės publikacijos aukštą reitingą turinčiuose mokslo žurnaluose.

6.2. Dalyvavimas tarptautiniuose ir nacionaliniuose projektuose, atitinkančiuose šios programos kryptis.

6.3. Naujų gaminių prototipai.

#### **7. Rezultatų sklaidos priemonės:**

Įvertinant programoje dalyvausiančių mokslinių grupių ligšiolinį produktyvumą galima tikėtis, kad gautųjų rezultatų pagrindu kasmet turėtų būti paskelbta ne mažiau kaip 5 moksliniai straipsniai prestižiniuose tarptautiniuose moksliniuose žurnaluose bei perskaityta ne mažiau kaip 5 moksliniai pranešimai svarbiose tarptautinėse konferencijose.

Gautų rezultatų sklaida bus vykdoma, teikiant informaciją FTMC interneto svetainei, dalyvaujant parodose, mokslo populiarinimo renginiuose ir kt.

#### **8. Preliminarus programos lėšų paskirstymas (tūkst. Eur):**

| Eil. Nr. | Išlaidų pavadinimas                                                                                                | 2017 metais | 2018 metais | 2019 metais | 2020 metais | 2021 metais | Visai programai (suma) |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|------------------------|
| 1.       | Programai skirti norminiai etatai, lėšos                                                                           | 10<br>96    | 10<br>96    | 10<br>96    | 10<br>96    | 10<br>96    | 480                    |
| 2.       | Kitos lėšos planuojamos programai vykdyti (iš kitų, institutui skirtų valstybės biudžeto bazinio finansavimo lėšų) | 96          | 96          | 96          | 96          | 96          | 480                    |
|          | Iš viso                                                                                                            | 192         | 192         | 192         | 192         | 192         | 960                    |

#### **9. Programos trukmė:**

2017–2021 metai.

**10. Programos vadovas:** dr. Aušra Abraitienė, vyr. m. d., tel.: 8 37 308 666;

ausra.abraitiene@ftmc.lt