

## MOLEKULINĖ ELEKTRONIKA IR NANOINŽINERIJA

### Programos tikslai (tikslas)

Molekulinės organinės medžiagos sieja tris kertines gamtos mokslų kryptis – fiziką, chemiją ir biologiją. Molekulinė elektronika ir molekulinė nanoinžinerija yra neatsiejamoms šios tarpdisciplininės mokslo ir technologijų srities veikos apimančios tokias aktyviai vystomas technologijas kaip molekuliniai jutikliai, saulės energetika ir apšvietimas, naujos funkcinės medžiagos, nauji įrankiai medicininei diagnostikai ir terapijai, biotechnologijos bei biologinių procesų tyrimui. Nežiūrint išpūdingų pastarųjų metų pasiekimų daugelyje šios srities veiklų, ji ir toliau reikalauja intensyvių mokslinių tyrimų, naujų pažangių tyrimo metodų, aukštesnės tyrimų ir jų pagrindu kuriamos gamybos būdų kultūros ugdymo, bei įgūdžių. Vienas svarbiausių uždavinių išlieka molekulinės elektronikos ir nanoinžinerijos pasiekimų diegimas į pramonę, jos perorientavimas į aukštesnę technologinę lygmenį, naujų pažangių įmonių steigimas. Ši veikla savo ruožtu reikalauja kompetentingų aukštos kvalifikacijos specialistų, kurių paruošimui bendrųjų universitetinių studijų dažnai nepakanka.

Molekulinę elektronika ir nanotechnologijos dar nepasiekė ir akivaizdu, kad artimiausiu metu dar nepasieks brandos užtikrinančios jų pramoninį vystymąsi, todėl būtina tęsti ir aktyvinti šios srities mokslinę veiklą akademinėse institucijose. Programos rėmuose pastaraisiais metais buvo vykdomi įvairūs projektai, kurie leido praplėsti reikiamą mokslinį potencialą. Buvo išvystyti tyrimo metodai, kuriamos ir tobulinamos technologijos, kuriamos naujos medžiagos. Šios žinios atveria naujas taikymo perspektyvas biotechnologiniuose tyrimuose bei medicinoje bei vykdyti užsakomuosius organinių medžiagų sintezės darbus. Programos tikslas – toliau vykdyti aukšto tarptautinio lygio mokslinius tyrimus ir eksperimentinės plėtros darbus, užtikrinti aukštą kompetenciją, ruošti šios mokslo srities specialistus, kurti sąlygas aktyviam molekulinė technologijų diegimui pramonėje. 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. Šią programą vykdys Molekulinė Darinių Fizikos, Organinės Chemijos ir Nanoinžinerijos skyriai.

### Programos uždaviniai (kokie svarbūs uždaviniai bus išspręsti?)

1. Fundamentinių tyrimų srityje bus atliekami aukščiausio lygio organinių ir kompozicinių molekulinė darinių homogeninėse ir heterogeninėse terpėse tyrimai, pasitelkiant modernius elektrocheminius, chromatografinius, spektroskopinius, bei elektrinius metodus. Šiais tyrimais bus siekiama užpildyti dar esamas fundamentinių reiškinių ir savybių supratimo spragas, kuriami vis sudėtingesnių praktiniams uždaviniams taikomų sistemų teoriniai aprašymo metodai.
2. Taikomųjų tyrimų srityje bus siekiama tobulinti jau vystomus prietaisus ir technologijas siekiant patenkinti praktinius poreikius. Pagrindiniai bus vystomos elektrokatalizės sistemos, konstruojami jutikliai ir biojutikliai, vystomi organiniai ir hibridiniai saulės elementai bei šviesą emituojantys prietaisai. Bendradarbiaujant su biotechnologinėmis mokslinėmis ir gamybinėmis įmonėmis bus kuriami šioms technologijoms skirti molekuliniai įrankiai. Artėjant link praktinio taikymo ypatingai svarbus tampa medžiagų ir prietaisų ilgalaikis stabilumas, todėl ypatingas dėmesys bus skiriamas medžiagų degradacijos procesų supratimui ir jų prevencijos

metodų paieškai.

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.

**Metodologinis tyrimų pagrindimas** (aprašyti metodus):

Tyrimo metodų vystymas eis keliomis kryptimis:

a) 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 chromatografijas – masių spektrometrijos metodikas. Bus tobulinami skenuojančio zondo bei paviršiaus plazmonų rezonanso metodai paviršių analizei. Bus taip pat naudojami jau įsigyti ir sukomplektuoti kinetinių vyksmų charakterizavimo prietaisiai 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.

b) Bus siekiama įsigyti ir panaudoti pažangiausias 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 ultraspartinė 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 ultraspartinė krūvininkų dreifo tyrimo metodika. Šie prietaisai suteikia galimybę vystyti pažangiausias 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.

c) 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, 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 unikalų preitaisų projektavimo ir konstravimo darbai, kurie išplečia galimybes pasiteisinusius eksperimentinius rezultatus perkelti į prototipų kūrimą ir bandomąją gamybą. Toliau plečiama biomedžiagų sintezės bei mechanobiologinių tyrimų kryptis; plečiama 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 užsakomųjų tyrimų paslaugas toliau reguliariai užsako mažosios ir vidutinės įmonės, tarptautinės kompanijos, klinikos, ir kt. Todėl kito programos etapo uždavinys yra plėsto kompetencijos bazė ir užtikrinti technologinį pranašumą naujausių nanoinžinerijos platformų kūrime, jas pritaikyti molekulinės elektronikos, biofizikos, nanobiotechnologijų tyrimams.

Šie tyrimai priklauso šiuo metu intensyviai pasaulyje vystomoms tyrimų kryptims, kurios tiesiogiai taikytinos kuriant naujas nanobiotechnologijas. Lietuvoje artimų kryptių darbai buvo ir tebėra vykdomi FTMC kamieniniuose padaliniuose, bei kitose mokslo įstaigose, kaip antai Vilniaus universiteto Gyvybės mokslų centre, VU Fizikos ir Chemijos fakultetuose, KTU Cheminės Technologijos fakultete.

### **Tyrimų etapai ir jų charakteristika: detalus įgyvendinimo planas, kuriame numatomas skirtų lėšų preliminarus paskirstymas uždaviniams vykdyti**

#### **Detalus įgyvendinimo planas:**

1. Fizikinių poveikių (temperatūros, elektrinio lauko, šviesos) taikymas modifikuojant chemines medžiagų savybes paviršiuje.
2. Didelės spartos ir ploto paviršiaus tyrimo / modifikavimo sistemos kūrimas, panaudojant pažangias skenuojančio zondo metodikas - vykdymas 1-2 programos metais.
3. Bioimitacinių paviršių sintezė ir tyrimai – vykdymas 1-2 programos metais.
4. Nestandartinių nanolitografijos metodų integravimas – vykdymas 3-5 programos metais.
5. Naujų laidžiųjų ir redoks aktyvių polimerų plonų sluoksnių formavimas, tyrimas ir taikymas elektrocheminiams jutikliams - vykdymas 1-4 programos metais.
6. Elektrodinių ir elektrokatalizės procesų, vykstančių ant modifikuotų elektrodų, tyrimas, ypač siekiant identifikuoti procesus, potencialiai turinčius taikomąją vertę - vykdymas 3-5 programos metais.
7. Jutiklių ir biojutiklių, paremtų procesais, vykstančiais ant modifikuotų elektrodų, kūrimas – vykdymas 1-3 programos metais.
8. Elektrocheminės polimerizacijos ant elektrodų tyrimas, siekiant gauti naujų laidžiųjų ir redoks aktyvių polimerų plonus sluoksnius - vykdymas 1-3 programos metais.
9. Savitvarkių molekulinį ir polimerizuotų sluoksnių savybių tyrimas moderniais elektrocheminiais ir spektriniais metodais – vykdymas 1-5 programos metais
10. Fluorescencinių klampos, ir kitų aplinkos parametrų mikrojutiklių kūrimas ir tobulinimas - vykdymas 1-3 programos metais.
11. Pilnai organinių ir hibridinių saulės elementų kūrimas. Elektroninių procesų saulės elementuose ir joms naudojamose medžiagose tyrimai ir optimizavimo galimybių paieška - vykdymas 2-5 programos metais.
12. Perovskitinių medžiagų skirtų saulės elementams ir šviestukams tyrimai. Perovskitinių prietaisų kūrimas ir tobulinimas, efektyvumo ir ilgalaikio stabilumo gerinimas - vykdymas 1-5 programos metais
13. Biologinių fotojautrių sistemų elektroninių savybių tyrimai ir jų teorinio aprašymo modelių vystymas - vykdymas 1-5 programos metais.

#### **Numatomi rezultatai** (nurodyti kokie laukiami rezultatai):

1. 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 tikras kryptis iš šios programos kamieno, ir trečia, prototipai (pvz, nanojutikliai, organinės elektronikos elementai), kurie gali turėti savąją vietą aukštųjų technologijų pramonės gaminių ir taikymų rinkoje.

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

**Rezultatų sklaidos priemonės** (rezultatų skelbimas, viešinimas ir populiarinimas) Įvertinant programoje dalyvausančių 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 dalyvausančių grupių skaito paskaitas Vilniaus universitete, todėl nauji moksliniai rezultatai papildys esamas studijų programas; studentams bus pasiūlyti nauji, šiuolaikines 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 bei paslaugų centro BALTFAB informacija. Bus organizuojamos tarptautinės konferencijos, ekskursijos į laboratorijas, siekiant supažinti su gautais rezultatais tiek mokslo, tiek plačiąją visuomenę, įskaitant moksleivius.

Programos pradžia 2022 m. sausio mėn., pabaiga 2026 m. gruodžio mėn. (5 metai).

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