

## KONDENSUOTOS MEDŽIAGOS IR ELEKTRONIKOS PRIETAISAI

### 2. Programos tikslai:

2.1. Kurti ir tirti naujas kondensuotas 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 kondensuotų medžiagų ir jų darinių iš feromagnetinių ir metalo oksidų, Heuslerio lydinių, aukštatemperatūrių superlaidininkų, elektrai laidžių ir puslaidininkinių polimerų bei fermentų sluoksnių, organinių-neorganinių perovskitų tyrimo technologijas.

Šio uždavinio vykdymo metu bus sukurtos šių medžiagų bei darinių iš jų gamybos technologijos:

3.1.1. Feromagnetikų nanosluoksnių ( $La_{1-x}Sr_xMn_{1-y}Co_yO_3$  ir kt.), panaudojant impulsinį injekcinį cheminį nusodinimą iš metaloorganinių junginių garų fazės (PI MOCVD) ir

fero(feri)magnetikų/oksidų nanodarinių, panaudojant impulsinį lazerinį nusodinimą (PLD);

3.1.2. Heuslerio lydinių ir metalų oksidų ( $Co_2MnSi$ ,  $MgO$ ,  $TiO_2$ ,  $ZnO$  ir kt.), panaudojant magnetroninį dulkinimą (MS), PLD;

3.1.3. Plonų sluoksnių iš aukštatemperatūrių superlaidininkų, modifikuotų Rb, naudojant PI MOCVD ir impulsinį lazerinį nusodinimą (PLD);

3.1.4. Įvairiatarpių puslaidininkinių darinių ( $A_3B_5$  puslaidininkinių), panaudojant skystinę ir molekulinę pluoštelių epitaksiją;

3.1.5. Elektrai laidžių ir puslaidininkinių polimerų, biologinių struktūrų, atkartojančių dirbtinius analogus (bio-inspired) (tokių kaip polipirolas, polianilinas, polikarbazolas, politiofenas, PEDOT ir kt.), pasitelkiant electro-, cheminę ir biogeninę polimerizaciją;

3.1.6. Organinių-neorganinių perovskitų sluoksnių nusodinimo iš gaminamo prekursorių tirpalo;

3.1.7. Biomolekulių (monosluoksniai ir daugiasluoksniai nanodariniai iš įvairių fermentų ir kitų biostruktūrų) sluoksnių padengimas, panaudojant cheminę imobilizaciją ant nanometrinių metalų ir metalo oksidų sluoksnių, modifikuotų savitvarkiais mono-sluoksniais.

3.1.8. Modelinių baltymų sistemų ir realių mėginių baltymų sąveikos kinetikų tyrimas, panaudojant cheminę imobilizaciją ant nanometrinių metalų ir metalų oksidų sluoksnių ir nanostruktūrų, naudojant pažangius ir inovatyvius optinius ir pjezoelektrinius metodus ir jų kombinaciją.

3.1.9. Bioelektrinių reiškinių tyrimai atliekami skyriuje sukurtais prietaisais, generuojančiais nuo ns iki ms sekundžių trukmės impulsus ir galinčiais apdoroti nuo  $\mu L$  iki L tūrio skirtus mėginius. Taip pat numatoma naudojant minkštąją litografiją gaminti organ-on-a-chip technologijai reikalingus prietaisus.

#### 3.2. Ištirti nanostruktūrizuotų sluoksnių iš fero(feri)magnetinių oksidų, Heuslerio junginių ir lydinių bei tūrinių ir plonasluoksnių aukštatemperatūrių superlaidininkų elektrines ir magnetines savybes, siekiant juos panaudoti magnetinio lauko jutiklių bei matuoklių, šviesos detektorių, magnetinių tunelinių jungčių, elektromagnetinio greitinimo įtaisų 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. Ištirti feromagnetikų nanosluoksnių ( $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Mn}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_3$  ir kt.), fero(feri)magnetikų/oksidų nanodarinių morfologijos bei mikrostruktūros sąryšius su elektrinėmis sluoksnių savybėmis stipriuose impulsiniuose elektriniuose ir magnetiniuose laukuose, ištirti elektrovaržos, magnetovaržos bei magnetovaržos anizotropijos reiškinių ir magnetinės atminties efektų ypatumus, atlikti krūvio pernašos mechanizmų bei fizikinių ir cheminių procesų, vykstančių nanodarinių tarpfazinėse srityse, skaitinį modeliavimą ir eksperimentinių rezultatų analizę; ištirti didelės energijos elementarių dalelių įtaką nanostruktūrizuotų manganitų ir kobaltitų ( $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Mn}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_3$ ) plonųjų sluoksnių magnetovaržos reiškiniui;

3.2.3. Ištirti sluoksnių iš Heuslerio junginių ir metalų oksidų ( $\text{Co}_2\text{MnSi}$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZnO}$  ir kt.) elektrines ir magnetines savybes, jų nanodarinių su dielektrikų ir neferomagnetinių metalų sluoksniais magnetovaržines savybes.

3.2.4. (a) Ištirti superlaidžių Y-Ba-CuO sluoksnių, modifikuotų Rb, morfologiją ir struktūrą, elektrines, optines ir magnetines savybes, nustatyti krizinių srovių ir temperatūrų priklausomybes nuo struktūros bei sluoksnių storio, atlikti piningo centrų sluoksnyje analizę.

(b) Ištirti magnetinio lauko difuziją į tūrinius aukštatemperatūrius superlaidininkus vykstant elektromagnetinio greitinimo procesui;

3.2.5. Greitaveikių skaliarinių magnetinio lauko jutiklių bei matuoklių prototipų kūrimas impulsinio magnetinio suvirinimo ir kitiems taikymams, testavimas laboratorinėse ir eksploatacijos sąlygose, panaudojant plonuosius nanostruktūrizuotus manganitų ir kobaltitų sluoksnius.

3.2.6. Magnetinių biojutiklių iš nanosluoksniuotų Heuslerio lydinių ir kitų feromagnetinių sluoksnių prototipų kūrimas, tyrimas ir testavimas.

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

**3.3. 1) Sukurti naujus mikrobangų registravimo metodus ir sistemas, panaudojant puslaidininkinius nanodarinius iš A3B5 medžiagų ir dvimačių kondensuotų medžiagų.**

**2) Ištirti fotovoltaikos reiškinių ypatumus šiuolaikinėse puslaidininkinėse medžiagose bei jų dariniuose esant krūvininkų generacijai ir kaitimui, siekiant sukurti naujus ir pagerinti esamų fotovoltaikos įtaisų jautrį, spartą, efektyvumą.**

Vykdam uždavinio pirmąją dalį (3.3.1), bus:

a) išnagrinėtos skaitinio modeliavimo ir analitiniais metodais įvairialyčių puslaidininkinių darinių ant dvimačių darinių savybės;

b) sukurtos nanostruktūrizuotų medžiagų įvairialyčių puslaidininkinių darinių ant dvimačių darinių gamybos technologijos;

b) sukonstruotas hibridinis darinys, apjungiant plonasluoksnį nesimetriškai susiaurintą puslaidininkinį darinį su savaime persijungiančiu diodiniu dariniu;

c) sukurta originali mikrobangų dvigubo diodo konstrukcija GaAs ir AlGaAs puslaidininkinių darinių pagrindu;

d) įvertinta puslaidininkinių darinių kokybė neardančiais spektroskopijos metodais plačiame temperatūrų intervale;

e) išmatuotos detektorių savybės nuo kambario iki skystojo helio temperatūrų

f) sukurta skystinės epitaksijos technologija ir išauginti specialūs įvairialyčiai GaAs-AlGaAs dariniai leidžiantys išvengti arba sumažinti neigiamą karštųjų krūvininkų EVJ įtaką įvairių puslaidininkinių prietaisų (pvz. saulės elementų) veikimui.

Vykdamas uždavinio antrąją dalį (3.3.2), bus:

- a) kuriami fotoatsako susidarymo teoriniai modeliai skirtinguose puslaidininkiniuose dariniuose;
- b) tiriami karštųjų krūvininkų reiškiniai įvairios draudžiamųjų energijų tarpo, tarp jų ir plačiatarpiuose GaN bei perovskitų, puslaidininkiniuose;
- c) išanalizuoti fotoįtampos susidarymo ypatumai plačiame temperatūrų ruože esant įvairaus spektro bei intensyvumo žadinančiajai lazerinei spinduliutei;
- d) kuriami modernūs fotovoltaiškos įtaisai, tandeminiai saulės elementai;
- e) kuriami lazerinės spinduliuotės galios ir impulso spartos jutikliai, kurių veika pagrįsta karštųjų krūvininkų reiškiniais, bei krūvininkų generacija perovskitų sluoksniuose..

### **3.4. Ištirti modelinių ir realių mėginių baltymų sistemų, suformuotų ant plonų metalų ir metalų oksidų sluoksnių ir nanostruktūrų, skirtų biologiniams jutikliams, struktūrinės, optinės ir termodinaminės savybės. Ištirti elektrai laidžiu polimerų, skirtų biologiniams jutikliams, struktūrinės, optinės bei elektrinės savybės.**

Šio uždavinio vykdymo metu bus atliekami tokie tyrimai:

- a) Baltymų sąveikos kinetikos tyrimai spektrinės elipsometrijos ir kvarco kristalo mikrogravimetrijos su disipacija metodais ir jų kombinacija (afiniškumo konstantų nustatymas, sluoksnių formavimosi kinetikos modelių kūrimas, viskoelastinių sluoksnių savybių tyrimai) panaudojant spektrinius elipsometrus, kvarco kristalo mikrogravimetriją su disipacija, Ramano spektroskopijos įrangą, moduluota infraraudonojo atspindžio-adsorbcijos poliarizuotoji spektroskopija (Polarization modulation-infrared reflection-adsorption spectroscopy PM-IRRAS);
- b) Suformuotų įvairiais metodais metalų ir metalų oksidų nanometrinių sluoksnių ir nanostruktūrų (nanodalelių, nanodarinių ir kt.), taip pat nanostruktūrų formavimosi kinetikos skirtų optiniams ir pjezoelektriniams jutikliams tyrimai spektrinės elipsometrijos ir kvarco kristalo mikrogravimetrijos su disipacija metodais;
- c) įvairių daugiafunkcinių organinių molekulių savaiminio formavimosi ant metalų ir jų oksidų paviršių teoriniai tyrimai (naudojant tankio funkcionalo ir Monte Karlo metodus) bei feroelektrinių fazinių virsmų metalo organinėse sistemose modeliavimas skaitmeniniais metodais.

### **3.5. Sukurti naujas biologinių nanostruktūrų (ląstelių sienelių, membranų ir baltyminių struktūrų) permeabilizacijos elektriniais ir magnetiniais impulsais technologijas, siekiant išvystyti modernius maisto apdoravimo ir medicinos metodus bei kurti inovatyvius prototipus.**

Šio uždavinio vykdymo metu bus atliekami tokie tyrimai:

- a) vėžinių ląstelių linijų ir mielių bioelektrinių reiškinų tyrimai (sienelių barjerinių savybių atstatymas po permeabilizacijos, netemperatūrinė pasterizacija) panaudojant ms-ns trukmės elektrinių impulsų generatorius, fluorescencinę mikroskopiją, jonų koncentracijos matuoklius;
- b) Elektrinio lauko impulsais sukeltos ląstelių permeabilizacijos panaudojimo krioprotektantų įvedimui į ląsteles tyrimai. Su mielių ląstelėmis optimizuotos šaldymo technologijos pritaikymas žinduolių ląstelių šaldymui. Bus tiriami svarbiausi sėkmingam ląstelių šaldymui reikalingi veiksniai (šaldymo tirpalo sudėtis, ląstelių tipas, elektrinio lauko poveikis), šaldymo bei atšildymo metu susidariusios pažaidos ląstelėse.
- c) Amperometrijos metodo pritaikymo elektrinio lauko sukkelto poveikio įvairioms ląstelėms tyrimas. Panaudojant hidrofilinius, hidrofobinius mediatorius bei įvairius biocheminius kelius slopinančius inhibitorius bus detalizuojamas ląstelių atsaką į permeabilizaciją.

d) Abiotiniais veiksniais sukeltų ląstelių signalų raiškos tyrimai (fotodinaminės terapija, optoporacija programuojama ląstelių žūtis, reaktyvios deguonies formų susidarymo mechanizmai) panaudojant genų inžinerijos metodus, spektrofotometrijos įrangą, mielių ląstelių sienelės elektrinio krūvio įtakos teigiamų jonų absorbcijos metodus ir organ-on-a-chip technologiją;

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

Tyrimams bus naudojama Fizinių ir technologijos mokslų centro mokslinė aparatūra bei unikali įranga ir metodikos:

1. Patobulinta impulsinio injekcinio cheminio nusodinimo iš metaloorganinių junginių garų fazės (PI MOCVD) įranga manganitų, kobaltitų ir aukštatemperatūrių superlaidininkų sluoksnių auginimui.
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.
3. Impulsinio lazerinio nusodinimo (PLD) įrenginys manganitų, kobaltitų bei Heuslerio junginių auginimui.
4. Atominių jėgų mikroskopas nanostruktūrizuotų sluoksnių paviršiaus analizei.
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.
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.
7. Spektriniai elipsometrai, spektrofotometrai, įvertinantys optinio atsako sklaidą, infraraudonosios srities Furje spektrofotometras, moduluotos infraraudonosios atspindžioadsorbcijos poliarizuotosios spektroskopijos įranga plonų metalų ir metalų oksidų sluoksnių ir nanostruktūrų optinio atsako charakterizavimui.
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).
9. Skysto helio kriostatas plonųjų sluoksnių ir darinių iš jų elektrinio laidumo tyrimams 4,2-313 K temperatūroje.
10. Nanosekundinių didelės galios elektrinių laukų generavimo ir registravimo įranga, skirta greitaveikių elektroninių procesų nanostruktūrizuotuose dariniuose tyrimams.
11. Biologinių ląstelių mikrosekundžių trukmės elektrinių impulsų generatoriai kartu su peristaltiniais siurbliais ir FTMC sukurtomis elektroporacijos celėmis.
12. Tetrafenilfosfonio jonų koncentracijos matavimo ir programinė įranga, optinė ir fluorescencinė mikroskopija; mikroorganizmų kultivavimo įranga.
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.
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).
15. Tauriųjų metalų nanostruktūrų formavimas ir padengimas (aukso, sidabro) lazeriniais metodais (Atlieka partneriai Japonijoje).

16. Skystinės epitaksijos įranga, molekulinų pluoštelių epitaksijos įranga puslaidininkinių A3B5 medžiagų ir jų nanodarinių formavimui.
17. Lazerinė nanosekundžių trukmės impulsų tolimosios ir artimosios infraraudonosios spinduliuotės įranga: impulsinis pasyvio kokybės moduliacijos CO2 lazeris, Nd:YAG lazeris (impulso trukmė 25 ns).
18. Unikali puslaidininkinių darinių gamybos (fotolitografija, ėsdinimas) įranga.
19. Spausdinto montažo plokščių projektavimo, elektroninių schemų modeliavimo, mikrovaldiklių programavimo įranga.
20. Spausdinto montažo plokščių greito paruošimo (rapid prototyping) įranga.
21. Spartieji (iki 16 GHz) realaus laiko oscilografai nanostruktūrizuotų medžiagų ir jų darinių dinaminių procesų tyrimams.
22. Kompiuterinės programos įvairių formų molekulių monosluoksnių susitvarkymui skaičiuoti Monte Karlo metodu

Vykdamas programos tikslus ir uždavinius, bus remiamasi ilgamete programos vykdytojų mokslinių tyrimų patirtimi. Vykdamas 3.1 ir 3.2. 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., uždavinius bus laikomasi šios metodologinės tyrimų sekos:

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

Vykdamas programos 3.3.1. uždavinį, bus laikomasi šios metodologinės tyrimų sekos:

- a) modeliuojami kuriamų elektroninių darinių elektriniai parametrai, pasitelkiant tiek analitinius, tiek skaitmeninius šių parametų skaičiavimo metodus;
- b) suprojektuoti dariniai bus auginami, pasitelkiant FTMC turimą skystinės epitaksijos, molekulinų pluoštelių epitaksijos įrangą bei VU turimą MOCVD įrangą; dvimačiai kondensuoti

medžiagų sluoksniai bus išsigyjami aukštųjų technologijų gaminių rinkoje; taip pat planuojama pasinaudoti modernia mikroelektronikos infrastruktūra užsienyje.

c) 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); nuostoviosios vienfotonės fotoluminescencijos metodika - bandinių kokybės ir optinių savybių tyrimai žemose temperatūrose.

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

e) 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.

f) atliekama naujų mikrobangės elektronikos prietaisų pritaikymo serijinės gamybos prietaisuose analizė.

Vykdamas programos 3.3.2. uždavinį, bus vykdomi tyrimai, paremti kompiuteriniu modeliavimu ir eksperimentiniu šių modelių patvirtinimu. Apšvietus puslaidininkinį darinį, susidaro fotoįtampa. Jei fotono energija lygi puslaidininkio draudžiamosios energijos tarpui, sandūroje susidaro įtampa dėl elektronas-skylė porų generavimo ir jų atskyrimo sandūros elektriniame lauke; tokio vyksmo sparta priklauso nuo krūvininkų gyvavimo trukmės. Jei fotono energija didesnė už draudžiamosios energijos tarpą, irgi yra generuojamos elektronas-skylė poros, tačiau perteklinė energija yra panaudojama laisvųjų krūvininkų kaitimui. Jei fotono energija mažesnė už draudžiamosios energijos tarpą, dominuoja laisvųjų krūvininkų sugertis – krūvininkai yra kaitinami, – o sandūroje susidaro karštųjų krūvininkų elektrovara; šiuo atveju vyksmo sparta priklauso nuo fundamentinės krūvininkų energijos relaksacijos trukmės. Visų trijų reiškinų dinamika yra skirtinga. 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:

a) kuriami teoriniai generavimo ir kaitimo fotoįtampos modeliai, lyginami su eksperimentiniais rezultatais;

b) tiriami skirtingo draudžiamosios energijos tarpo kondensuotų medžiagų, – tarp jų ir GaN, perovskitų – dariniai;

c) analizuojami fotoįtampos ypatumai, esant įvairaus spektro bei intensyvumo žadinančiajai lazerinei spinduliutei;

d) tiriamos pusiausvyrinių ir nepusiausvyrinių krūvininkų savybės dinaminės vienfotonės koreliacinės spektroskopijos metodu.

e) tyrimai atliekami įvairiose – nuo kambario iki kriogeninių – temperatūrose;

f) modeliuojami ir kuriami naujos koncepcijos fotovoltaikos įtaisai, organinių neorganinių perovskitų/Si tandeminiai saules elementai.

Vykdamas programos 3.4. uždavinį, taip pat bus vykdomi paieškiniai tyrimai, kadangi baltymų sluoksnių formavimosi ir sąveikos kinetikos ant plonų metalų ir metalų oksidų sluoksnių ir nanostruktūrų anksčiau FTMC nebuvo tiriami. Ploni metalų ir metalų oksidų sluoksniai ir nanostruktūros gali būti labai perspektyvūs kaip reguliuojamo lūžio rodiklio padėklai optiniams biologiniams jutikliams. Šiuo metu tokie nanodariniai yra gaminami Japonijoje (Japan Graduate

School of Engineering Department of Applied Chemistry) naudojant lazerines technologijas, o jų optinės savybės pradėtos tirti FTMC Funkcinių medžiagų ir elektros inžinerijos skyriaus Nanotechnologijų laboratorijoje. Galutinis biologinio jutiklio sukūrimas bus atliekamas FTMC ir VU Chemijos ir geomokslų fakultete, ant plonų metalų ir metalų oksidų sluoksnių ir nanostruktūrų suformuojant funkcines grupes, skirtas baltymų imobilizacijai. Nors yra neblogas pradinis įdirbis, ši tema yra paieškinė, nes plonų metalų ir metalų oksidų sluoksnių ir nanostruktūrų optinių savybių tyrimo rezultatai turi būti panaudoti, kryptingai keičiant ir pritaikant šių darinių gamybos technologiją. Atlikus šiuos tyrimus, bus galima geriau nustatyti tokių biologinių jutiklių privalumus ir taikymo sritis, o ateityje, visą jutiklių technologiją išvystyti FTMC.

Vykdamas programos 3.4. uždavinį, bus laikomasi šios metodologinės tyrimų sekos: 1) vystomos biologinių nanostruktūrų permeabilizacijos elektriniais ir magnetiniais impulsais technologijos; 2) biologinių struktūrų dirbtinių analogų (Bio-inspired) kūrimas ir tyrimas; 3) konkrečių biologinių struktūrų dirbtinių analogų prototipų gamyba ir testavimas.

Vykdamas programos 3.5. uždavinį, bus laikomasi šios metodologinės tyrimų sekos: 1) nanostruktūrizuotų metalinių ir organinių medžiagų ir biologinių struktūrų gamybos technologijos arba auginimo metodų kūrimas ir išvystymas; 2) šių medžiagų ir struktūrų savybių eksperimentinis tyrimas; 3) fizikinių reiškinių naudojamų elektronikos prietaisų kūrimui mechanizmų išaiškinimas ir teorinis modeliavimas; 4) bionanoelektroninių prietaisų elementų ir jų gamybos technologijų kūrimas bei 5) naujų įtaisų, naudojančių šiuos bionanoelektroninius elementus, kūrimas, prototipavimas bei testavimas.

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

5.1. Vykdamas programos **3.1. uždavinį**, bus:

- a) formuojami nanostruktūrizuoti manganitų ir kobaltitų, Co-Mn Heuslerio junginių bei aukštatemperatūrių superlaidininkų sluoksniai, panaudojant skirtingas medžiagas, jų derinius, įvairus padėklus bei sluoksnių užnešimo technologijas;
- b) tiriama technologinių auginimo sąlygų, o taip pat tolimesnių žematemperatūrių atkaitinimų, stabilizuojančių sluoksnių parametrus, įtaką jų cheminei sudėčiai, kristalinei struktūrai, paviršiaus tobulumui, elektrinėms bei magnetinėms savybėms;
- c) atliekama mikroorganizmų ir veiksmų, atliekančių organinių polimerų sintezę, paieška ir tyrimai;
- d) vykdomi biogeninių polimerų cheminės sudėties ir struktūros tyrimai;
- e) vykdomas biologines struktūras atkartojančių dirbtinių analogų (bio-inspired) kūrimas ir tyrimas.
- f) kuriamos biologines struktūras atkartojančių dirbtinių (bio-inspired) medžiagų technologijos;

5.2. Vykdamas programos **3.2. uždavinį**, bus:

- a) 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 reiškiniai ir magnetinės atminties efektų ypatumai, paveikus manganitų, kobaltitų sluoksnius didelės energijos elementariomis dalelėmis, atliekamas krūvio pernašos mechanizmų bei fizikinių ir cheminių procesų, vykstančių nanodarinių tarpfazinėse srityse, skaitinis modeliavimas.
- b) 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;
- c) 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.

d) formuojami spartieji saugikliai iš superlaidžių YBCO plonasluoksnių struktūrų modifikuotų Rb, tiriamos jų charakteristikos ir panaudojimo galimybės;

5.3.1. Vykdamas **3.3.1. uždavinį**, bus suprojektuoti ir pagaminti įvairialyčiai puslaidininkiniai dariniai ant dvimačių kondensuotų darinių.

Kuriant hibridinį darinį, integruojant plonasluoksnį nesimetriškai susiaurintą darinį su auto persijungiančiu diodiniu dariniu, bus: a) sukurta nesimetriškai susiaurinto puslaidininkinio darinio konstrukcija su nanometriniu dydžio savaime persijungiančiu diodiniu dariniu; b) nesimetriškai susiaurinto dvimačio kondensuotos medžiagos sluoksnio konstrukcija su nanometriniu dydžio auto-persijungiančiu diodiniu dariniu; c) mikrobangės spinduliuotės planarinio detektoriaus konstrukcija, apjungiant puslaidininkinius mikrobangų diodus ir mikrobangės spinduliuotės antenas iš dvimačio anglies sluoksnio.

Kuriant originalią dvigubo mikrobangų diodo konstrukciją, bus: a) teoriškai įvertinta diodų metalinių kontaktų asimetrijos įtaka mikrobangio diodo detektuojamos įtampos dydžiui; b) suprojektuotas dvigubas planarinis mikrobangų diodas įvairaus laidumo plonasluoksnių GaAs darinių pagrindu, plonasluoksnių AlGaAs darinių su įvairia AlAs moline dalimi pagrindu; c) sukurta dvigubų planarinių mikrobangų diodų gamybos technologija, siekiant pasiekti kuo mažesnę diodų elektrinių parametrų išsibarstymą, kas įgalintų panaudoti šiuos diodus diodinių masyvų kūrimui.

Bus atlikti pagamintų GaAs/AlGaAs nanometrinių heterodarinių bandinių fotoluminescencijos tyrimai, atliekama gautų eksperimentinių tyrimų rezultatų analizė ir pateikiami siūlymai darinių kokybei gerinti. Išmatuotos detektorių savybės nuo kambario iki skystojo helio temperatūros.

Kuriant specialių įvairialyčių GaAs-AlGaAs darinių, leidžiančių išvengti arba sumažinti neigiamą karštųjų krūvininkų EVJ įtaką, auginimo technologiją bus tiriamos žemesnėse nei įprastinė temperatūrose vykdomo skystinės epitaksijos proceso ypatumai bei gaunamų sluoksnių ir darinių savybės.

5.3.2. Vykdamas **3.3.2. uždavinį**, fotovoltaikos reiškinių ypatumai bus tiriami kondensuotų medžiagų dariniuose, 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:

a) kuriami teoriniai generavimo ir kaitimo fotoįtampos impulsų modeliai, lyginami su eksperimentiniais rezultatais;

b) tiriami skirtingo draudžiamosios energijos tarpo puslaidininkių – GaAs, AlGaAs, GaN, organinių neorganinių perovskitų – dariniai;

c) analizuojami fotoįtampos bei fotoluminescencijos ypatumai, esant įvairaus spektro bei intensyvumo žadinančiajai lazerinei spinduliuotei;

d) tyrimai atliekami įvairiose – nuo kambario iki kriogeninių – temperatūrose.

e) modeliuojami ir kuriami naujos koncepcijos fotovoltaikos įtaisai, organinių neorganinių perovskitų/Si tandeminiai saules elementai.

5.4. Vykdamas programos 3.4. uždavinį, bus kuriami plonų metalų ir metalų oksidų sluoksniai ir nanostruktūros optiniams ir pjezoelektriniams biojutikliams (biomolekulių orientacijos įtaka šviesos poliarizacijos būsenai, viskoelastinės sluoksnių savybės) (TEM, SEM, XRD, spektroskopiniai elipsometrai, spektrofotometrai įvertinantys sklaidą, paviršiaus plazmonų rezonanso biojutikliai, kvarco kristalo mikrogravimetrija su disipacija), teoriškai modeliuojami įvairių molekulinų monosluoksnių susitvarkymai į tvarkingas struktūras. Numatoma tokia darbų

seka:

- a) Plonų metalų ir metalų oksidų sluoksnių ir nanostruktūrų optinė dispersija bei jautrumas bus charakterizuojamas spektrofotometriškai ir pjezoelektriškai, spektrinės elipsometrijos metodu, panaudojant išsamią poliarizacijos būsenų analizę ir kvarco kristalo mikrogravimetrijos su disipacija metodu;
- b) Atlikus nanostruktūrizuotų struktūrų tinkamumo biojutiklių panaudojime įvertinimą, bus atliktas šių padėklų biomodifikavimas specifiniais baltymais bei tolesnis biomolekulinių monosluoksnių tyrimas anksčiau nurodytais metodais;
- c) *In situ* baltymų sąveikos kinetikų tyrimas ant plonų metalų ir metalų oksidų sluoksnių ir nanostruktūrų bei tolesnis susiformavusių biomolekulių monosluoksnių charakterizavimas.
- d) Suvedus sudėtingas organines molekules į „statybinius blokelius“, valdomus cheminėmis sąveikomis, bus vykdomas savitvarkių molekulių struktūrų modeliavimas.

5.5. Vykdamas programos **3.5. uždavinį**, numatoma:

1. Tirti elektrinių impulsų poveikį ląstelių plazminės membranos pralaidumui: a) tirti plazminės membranos pralaidumo poveikį sienelę turinčių mikroorganizmų gyvybingumui; b) tirti plazminės membranos permeabilizacijos poveikį sienelės permeabilizacijai, bei ieškoti šiam tikslui selektyvių tyrimo būdų; c) tirti permeabilizuotos sienelės atsistatymo mechanizmą; d) kurti, vystyti ir diegti elektroporacijos pagrindu sukurtas technologijas kenksmingų mikroorganizmų kontrolei; e) tirti mielių ląstelių sienelės krūvio įtaką teigiamų jonų absorbcijos kinetikai.
2. Tirti itin trumpų (nanoskundžių trukmės) elektrinių ir magnetinių impulsų poveikį viduląsteliniams signalams: a) tirti plazminės membranos pralaidumo poveikį sienelę turinčių mikroorganizmų programuojamai žūčiai - apoptozei; b) tirti elektriniais ir magnetiniais impulsais indukuojamos mikroorganizmų apoptozės mechanizmą; c) genų inžinerijos pagalba kurti genų raiškos iniciatorių (promotorių) sekas, kurias būtų galima valdyti elektriniais ir magnetiniais impulsais; d) kurti, vystyti ir diegti sukonstruotų promotoriaus sekų pagrindu sukurtas technologijas genoterapinių vaistų dozavimui.
3. Tirti abiotinių veiksnių, tokių kaip šviesa, temperatūra, elektrinis ir magnetinis laukas, poveikį ląsteliniams signalams: a) tirti nanostruktūrizuotų paviršių poveikį ląstelių termo- ir optopermeabilizacijai; b) naujų krioprotekcijos mechanizmų kūrimas ir taikymas ląstelių ir audinių šaldymui; c) naujų optiškai skaidrių polimerinių medžiagų kūrimas ir taikymas fotodinaminėje terapijoje; d) organ-on-a-chip technologijos pritaikymas ir vystymas tarpląsteliniam signalo perdavimui.

**Programos trukmė:**

2022 - 2026 metai.

**Programos vadovas:**

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