



Kuriame
Lietuvos ateitį
2014–2020 metų
Europos Sąjungos
fondų investicijų
veiksmų programa



Pranešimas spaudai

2017 m. vasario 3 d.

Spektroskopijos tyrimai leidžia geriau pažinti medžiagas

„Mažosios Nobelio premijos“ laureatas, Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto profesorius dr. Darius Abramavičius, ne vienerius metus dirbęs Ročesterio ir Kalifornijos universitetuose Jungtinėse Amerikos valstijose ir grįžęs į Lietuvą, atlieka teorinius spektroskopinius tyrimus, kad išsiaiškintų įvairių medžiagų sudėtį ir taikymo galimybes. Mokslininko tyrimai itin įvairūs: nuo baltyminių struktūrų iki tokių medžiagų kaip grafenas.

„Spektroskopija – tai mokslas, tiriantis įvairių medžiagų ir skirtingų jų formų elektromagnetinio spinduliavimo arba sugerties spektrus. Tokie tyrimai padeda pažinti medžiagas, kad būtų galima tobulinti esamas ar sukurti naujų“, – sako prof. D. Abramavičius.

Atlikdami spektroskopijos tyrimus, mokslininkai stebi, kaip šviesa medžiagoje perspinduliuojama ir kaip detektoriais matuojami intensyvumai keičiasi pagal krentančios bangos ilgį. Tokių tyrimų reikia kuriant šviestukus ir saulės elementus. Vienas iš mokslininkų tikslų – sukurti saulės elementus iš organinių medžiagų.

Prof. D. Abramavičius daugiausiai dėmesio skiria kvantinėms molekulinėms medžiagų savybėms, išplėtojo atvirų sistemų kvantinės relaksacijos teoriją. Ji paaiškina, kaip elementarūs molekuliniai dariniai, sąveikaudami su aplinka, praranda perteklinę energiją. Tai nėra tik „nuostolių“ įvertinimas: perteklinė energija gali virsti elektra – tereikia sudaryti tam tinkamas sąlygas.

„Vilniaus universitete kuriame medžiagų modeliavimo kompiuterinius algoritmus. „Įdėjus“ į programą medžiagą aprašančius skaičius ir paspaudus mygtuką „vykdyti“, kompiuteris ekrane gali nupiešti įvairius medžiagos spektrus: sugerties, spinduliavimo bei keletą netiesinių keturių bangų maišymo koherentinių spektrų, – pasakoja mokslininkas. – Mūsų sukurtos programos gali būti naudingos ne tik eksperimentus atliekantiems mokslininkams, bet ir prototipus kuriantiems verslininkams, kuriems taip pat reikia atlikti eksperimentus su medžiagomis. Verslo atstovai, naudodami tokias kompiuterines programas, gali „nuspėti“ medžiagos spektrus prieš darant brangų eksperimentą ir šiuos rezultatus naudoti tolesniuose tyrimuose.“

Prof. D. Abramavičius įsitikinęs, kad Lietuva turi puikią mokslinę bazę spektrų skaičiavimams ir minėtiems eksperimentams atlikti. Vilniaus universitete yra net keli superkompiuteriai, kurie nuolat tobulinami, kad neatsiliktų nuo kompiuterių pažangos. Be to, sklandžiai bendradarbiaujama, keičiamasi patirtimi su kolegomis iš eksperimentinių laboratorijų Lietuvoje ir užsienyje. Daug bendraujama tarptautinėse konferencijose ir kituose moksliniuose susitikimuose.

Mokslininkai vis dažniau galvoja apie spektroskopijos tyrimų praktinį pritaikomumą. Spektroskopija turi būti ypač įdomi tiems pramonėms atstovams, kurie sintetina naujas medžiagas, siekdami gauti didesnius, pavyzdžiui, elektronų surinkimo našumus saulės elementuose, didesnę šviesą šviestukuose arba didesnę jautrų jutikliuose.

Prof. D. Abramavičius kartu su bendradarbiais naudodamas modeliavimo metodus parodė, kad dažnai pamiršamos kvantinio supainiojimo savybės molekulinėse medžiagose labai svariai prisideda didindamos efektyvumą moderniuose molekulinuose saulės elementuose. Gali būti, kad šitie atradimai netolimoje ateityje prisidės prie spartesnės organinės elektronikos pramonės plėtros.

Mokslininkas yra vienas iš nominantų 2016 m. Lietuvos mokslo premijai gauti.