

**Institute of Solid State Physics
University of Latvia**



ABSTRACTS
of the 35th Scientific Conference

**February 20– 22, 2019
Riga**

LU Cietvielu fizikas institūta 35. zinātniskā konferences tēzes latviešu un angļu valodā.

Atbildīgais redaktors: Dr. phys. Anatolijs Šarakovskis.

Salikums: Līga Klēbaha.

Salikts LU Cietvielu fizikas institūtā, Ķengaraga ielā 8, Rīgā, LV-1063

Konferencē ir paredzētas 7 sekcijas:

- Spektroskopija
- Fotonika un optiskie materiāli
- Ierīces un tehnoloģijas
- EUROfusion
- Materiāli enerģētikai
- Teorija un materiālu modelēšana
- Stenda referāti

Referātu tēzes sekcijās ir sakārtotas to nolasīšanas secībā.

20. februāris

Laiks	Autors	Nosaukums	Sekcija	
10.00-10.30	Mārtiņš Rutkis	CAMART ² projekts kā rīks LU CFI attīstībai - paveiktais un vēl paveicamais	<i>Spektroskopija</i>	
10.30-10.45	Anatolijs Truhins	α -kvarca kristāla luminiscence ar alumīnija, sārmu un cēlmetālu piemaisījumiem		
10.45-11.00	Laima Trinklere	LiGaO ₂ piroelektriskā un termostimulētā luminiscence		
11.00-11.15	Jānis Čīpa	Rentgenstarojuma izraisītu procesu analīze litiju saturošās tritiju ģenerējošās keramikās		
11.15-11.30	Jānis Brokāns	Baltā fosfora režģa svārstības		
11.30-12.00	Kafija			
12.00-12.15	Jānis Teteris	Tiešā optiskā ieraksta fotorezistu izstrāde un pielietojums	<i>Fotonika un optiskie materiāli</i>	
12.15-12.30	Māra Reinfelde	Fotoinducētā anizotropā gaismas izkliede "mīkstajos materiālos"		
12.30-12.45	Andris Ozols	Vektorieraksta relaksācijas atkarība no polarizācijas azostiklu molekulārajās kārtiņās		
12.45-13.00	Patrīcija Paulsone	Jaunu sintēzes stiklu veidojošu piraniliden atvasinājumu gaismas pastiprināšanas īpašību pētījumi		
13.00-14.00	Pārtraukums			
14.00-14.15	Jānis Kleperis	Metodikas izstrāde spektroskopiskai CO ₂ elektrokatalītiskas reformēšanas reakcijas produktu noteikšanai	<i>Ierīces un tehnoloģijas</i>	
14.15-14.30	Alberts Kristiņš	Autostāvvietu klientu uzskaites sistēma		
14.30-14.45	Paul Annus	Bioloģiskās pretestības mērīšanas iespējas un izaicinājumi. Centrālās aortas spiediena novērtēšana.		
14.45-15.00	Jānis Kleperis	Autonomās sensoru sistēmas izveide graudu kaltes monitoringam: vēlamais pret iespējamo		
15.00-15.30	Kafija			
15.30-16.30	S1-1	Jēkabs Cīrulis	No temperatūras atkarīga Gd ³⁺ jonu iebūvēšanās CaF ₂ nanokristālos	<i>Stenda referāti</i>
	S1-2	Jānis Pudāns Daniels Gorovojs	Brīvo radikāļu daudzuma pētīšana šķīstošajos dzērienos ar elektronu paramagnētisko rezonansi	
	S1-3	Ernests Einbergs	Ar hromu dopēta alfa alumīnija oksīda izmantojamība dozimetrijā	
	S1-4	Krišjānis Roze	Ar fluoru aktivēta un sārmu metāliem leģēta SiO ₂ optisko īpašību izpēte	
	S1-5	Guna Doķe	Ilgstoša pēcspīdēšanas īsviļņu infrasarkanajā spektra apgabalā ar iterbija joniem aktivētā MgGeO ₃ materiālā	
	S1-6	Karīna Taranda	Neaktivētu un F-aktivētu silīcija dioksīda nanodaļiņu sintēze	
	S1-7	Juliāna Kepente	Indija koncentrācijas ietekme uz aktivēto ZnO nanostruktūru un morfoloģiskajām īpašībām	
	S1-8	Agnese Spustaka	Anodizācijas procesā iegūta luminiscenta pārklājuma homogenitātes un luminiscences izpēte	
	S1-9	Krišjānis Auziņš	Ar retzemju elementiem aktivētu luminiscējošu magnija oksīdu pārklājumu iegūšana izmantojot plazmas elektrolītiskās oksidācijas metodi	
	S1-10	Madara Leimane	Sārmmetālu piemaisījumu ietekme uz stiklveida silīcija dioksīda optiskajām īpašībām	
	S1-11	Mareks Senko	Neaktivētā un Al-aktivētā ZnO nanodaļiņu sintēze un to īpašību izpēte	
	S1-12	Faina Muktepāvela	ZnO:Ga, ZnO:In keramikas sagraušanas veida un mehānisko īpašību izpēte ar nanoindentēšanas metodi	
	S1-13	Varis Karitāns	Aberāciju mērīšana, izmantojot Šaka-Hartmana aberometriju un phaselift metodi	

21. februāris

Laiks	Autors	Nosaukums	Sekcija	
10.00-10.30	Andris Šternbergs	Ceļā uz termiskās kodolsintēzes elektroenerģiju	<i>EUROfusion</i>	
10.30-10.45	Aleksejs Gopejenko	Y, Ti, O un V _{Fe} mijiedarbības aprēķini no pirmajiem principiem fcc-Fe režģī lai izskaidrotu ODS daļiņu veidošanos		
10.45-11.00	Arturs Cintiņš	Ar joniem apstaroto tēraudu analīze ar mazā leņķa rentgenabsorbcijas spektroskopiju		
11.00-11.15	Aleksandrs Platonenko	Radiācijas izraisīto defektu strukturālo, elektronisko un vibrācijas īpašību ab initio pētījumi magnija alumīnāta špinelī		
11.15-11.30	Gunta Ķizāne	Kodolsintēzes iekārtas "Apvienotais Eiropas Tors" plazmas saskares materiālos uzkrātā tritija īpatnības		
11.30-12.00	Kafija			
12.00-12.15	Jānis Kleperis	Ūdeņradis kā enerģijas nesējs Latvijas gāzes infrastruktūrā	<i>Materiāli enerģētikai</i>	
12.15-12.30	Kaspars Kaprāns	Veiktspējas pētījumi pielietojot trīs nanostrukturētu materiālu sinerģiju litija jonu baterijās		
12.30-12.45	Jūlija Hodakovska	Grafēna un polimēra tinte membrānas-elektrodu sistēmai		
12.45-13.00	Oskars Bitmets	Elektrovērpšanas metode funkcionālu nanodiegu iegūšanai un to īpašību pētīšana		
13.00-14.00	Pārtraukums			
14.00-14.15	Ēriks Klotiņš	Elektronu procesi cietā vielā: Diraka ietvars	<i>Teorija un materiālu modelēšana</i>	
14.15-14.30	Dmitrijs Bočarovs	No temperatūras atkarīgo Cu ₃ N strukturālo īpašību aprēķini ar molekulāro dinamiku no pirmajiem principiem		
14.30-14.45	Oļegs Lisovskis	2D-ierobežoto modeļu validācija dažāda diametra TiO ₂ nanocaurulēm		
14.45-15.00	Inga Jonāne	Volfrāmātu rezonanses rentgenstaru emisijas spektroskopija		
15.00-15.30	Kafija			
15.30-16.30	S2-1	Guntars Vaivars	Kompozītu poli(ēterētera ketonu)/jonu šķidrums membrānu stabilitāte	<i>Stenda referāti</i>
	S2-2	Pēteris Lesničenoks	Ar slāpekli dopēta grafēna vadītspēja un pielietojumi gāzu sensoros	
	S2-3	Pēteris Lesničenoks	Gāzu difūzijas elektrodu elektroķīmiskajās šūnās pielietošanas raksturojums	
	S2-4	Jānis Kleperis	Jauni materiāli atjaunojamo energoresursu tehnoloģijām LU CFI	
	S2-5	Jānis Kleperis	CO ₂ reformēšanas elektrokatalītiskas reakcijas norises mehānisms uz grafēna/Cu elektroda	
	S2-6	Tatjana Borisova	Aloīna un pretjonu adsorbcija želatīnā kā ekstracelulārās matricas modeļa vielā	
	S2-7	Ingars Lukoševičs	Elektroķīmiska vara izgulsnēšana uz oglekli bāzēta gāzu difūzijas elektroda	
	S2-8	Einārs Sprūģis	Polimēra/cirkonija oksīda kompozītu stiklošanās temperatūru pētīšana	
	S2-9	Mihails Vdovičenko	Stikla šķiedras karbonātu čaulas pētījumi, izmantojot termogravimetriju un diferenciālo termisko analīzi	
	S2-10	Ainārs Knoks	Anodisko TiO ₂ nanocaurulīšu leģēšanas ar grafēna nanodaļiņām ietekme uz fotofizikālām īpašībām	
	S2-11	Maksims Čižikovs	Ar slāpekli funkcionalizēta grafēna sintēze, tā īpašību izpēte un pielietošana NO ₂ gāzu sensorikai	
	S2-12	Daina Riekstiņa	¹³⁷ Cs un ⁹⁰ Sr piesārņojuma noteikšana meža ekosistēmā	
	S2-13	Rolands Grants	Ātro ¹² C jonu radītie struktūras defekti un cietināšanās efekts LiF kristālos ārpus implantācijas zonas	
	S2-14	Mihails Halitovs	JET kodolsintēzes reaktora divertora materiālu analīze, izmantojot temperatūras -QMS metodi	

22. februāris

Laiks	Autors	Nosaukums	Sekcija
10.00-10.15	Vladimirs Pankratovs	Jaunās luminiscences iekārtas attīstība MAX IV laboratorijas Finestbeams sinhrotrona līnijā	<i>Spektroskopija</i>
10.15-10.30	Andris Antuzevičs	Eu ³⁺ sadalījums caurspīdīgā oksifluorīdu stikla keramikā: rentgenstaru difrakcijas un elektronu paramagnētiskās rezonanses pētījums	
10.30-10.45	Guna Krieķe	Augšpārveidotā luminiscence β-NaErF ₄ saturošā stikla keramikā	
10.45-11.15	Kafija		<i>Stenda referāti</i>
S3-1	Andrejs Česnokovs	Defektīvā cinka oksīda struktūras pētījums	
S3-2	Dmitrijs Zablockis	Perovskītu nanokubu slāņu morfoloģija	
S3-3	Andrejs Česnokovs	Ar Tb ³⁺ dopētā CeO ₂ aprēķini no pirmajiem principiem	
S3-4	Dāvis Zavickis	Fe un Co jonu magnētisko stāvokļu raksturošana (Ba,La)(Fe,Co)O ₃ perovskītos	
S3-5	Jurijs Mastrikovs	Titāna piemaisījumu ab initio pētījums ODS tēraudos	
S3-6	Guntars Zvejnieks	Perovskītu cieto šķīdumu un heterostruktūru datormodelēšana no pirmajiem principiem	
S3-7	Vladimirs Kuzovkovs	Defektu anihilācijas modelēšana apstarotajos oksīdos	
S3-8	Vladimirs Kuzovkovs	F-tipa cetru termiskās anihilācijas salīdzinājums neitronu apstarotā un termoķīmiski apstrādātā BeO	
S3-9	Normunds Ralfs Strautnieks	P3HT plāno kārtiņu īpašību pētījumi pielietošanai termoelektrisko ierīču 3D printēšanai	
S3-10	Mārtiņš Zubkins	Plāno kārtiņu uzklāšana ar reaktīvu magnetrono izputināšanu kriogēnās temperatūrās	
S3-11	Halil Arslan	Y _m O _n un ar itriju dopētas ZnO plānās kārtiņas un multislāņi	
S3-12	Miks Jurjāns	Tīra un ar lantanīdiem dopēta NBT elektromehāniskās īpašības	
S3-13	Līga Bikše	Na/Bi nestehiometrija tīrā un leģētā NBT	
S3-14	Sergejs Fomins	Fāzes atgūšanas parametri ar binārām maskām	

20. februāris

SPEKTROSKOPIJA

CAMART² PROJEKTS KĀ RĪKS LU CFI ATTĪSTĪBAI – PAVEIKTAIS UN VĒL PAVEICAMAIS.

Mārtiņš Rutkis

Latvijas Universitātes Cietvielu Fizikas institūts

Jau divus gadus LU CFI sadarbībā ar zviedru partneriem KTH Royal Institute of Technology un RISE (Research Institute of Sweden) EK finansēto Horizon 2020 programmas projektu CAMART². Projekta mērķis ir tālāk attīstīt jau esošo LU CFI Ekselences centru materiālzinātnēs. Lai šo mērķi sasniegtu projektā paredzētas sekojošas aktivitātes:

1. Attīstīt **LU CFI cilvēkresursus**
2. Attīstīt **LU CFI kompetenci**
3. Panākt ciešāku **LU CFI integrāciju Eiropas R&D&I tīklos**
4. Izveidot **inovācijas un komercializācijas sistēmu LU CFI**
5. Attīstīt **LU CFI infrastruktūru**
6. Veikt **LU CFI strukturālu reorganizāciju**
7. Izveidot **LU CFI kā brīvas piekļuves (Open Access) laboratoriju centru**
8. Ieviest **LU CFI pētniecības procesa vadības sistēmas**
9. Pilnveidot un realizēt **LU CFI marketinga aktivitātes**

Referātā tiks apskatīta projekta realizācijas gaita un sasniegtie rezultāti, kā arī parādīta projekta turpmākā realizācijas gaita un analizēti iespējamie riski.

PROJECT CAMART² AS A TOOL FOR ISSP UL DEVELOPMENT - ACCOMPLISHED AND TO BE CARRIED OUT.

Martins Rutkis

Institute of Solid State Physics of University of Latvia

For two years, LU CFI, in cooperation with the Swedish partners KTH Royal Institute of Technology and the RISE (Research Institute of Sweden), Horizon 2020 project CAMART², financed by the EC. The project aims to further develop the existing LU CFI Excellence Centre in Material Sciences. In order to achieve this objective, the project foresees the following activities:

1. Develop **human resources**
2. Building **knowledge at ISSP UL**
3. Strengthen **incorporation** of ISSP UL in **pan European networks** of R&D&I
4. Building an **innovation system at ISSP UL**
5. Develop **ISSP UL infrastructure**
6. Accomplish **Structural reorganization of ISSP UL**
7. Establish **ISSP as Open Access Technology Transfer Centre**
8. Implement **Research management information systems**
9. Upgrade and perform **ISSP marketing, PR and Sales** activities

Proposed report will briefly cover the progress of the project and the results achieved, as well as discuss the way forward with the project and analyse the potential risks.

Project CAMART² has received funding from Horizon 2020 Framework Programme H2020-WIDESPREAD-01-2016-2017-TeamingPhase2 under grant agreement No. 739508-CAMART2

α -KVARCA KRISTĀLA LUMINISCENCE AR ALUMĪNIJA, SĀRMU UN CĒLMETĀLU PIEMAIŠĪJUMIEM

Anatolijs Truhins

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Tika pētīta alumīnija un sārnu jonu vai cēlmetālu fotoluminiscence α -kvarca kristāliem. Zilā luminiscence pie ~ 400 nm atbilst centram, kas satur vairāk nekā vienu alumīniju un sārnu jonu kā kompensatoru. Luminiscence, kas pakļauta termiskai dzesēšanai no 180 K, tiek konstatēta arī augstās temperatūrās virs 700 K. Termiskā dzesēšanas enerģija ir 0,15 eV un frekvences koeficients ir $3 \cdot 10^7$ s⁻¹. Alumīnija-sudraba centra luminiscences josla ~ 260 nm ar laika konstanti ~ 37 μ s pie 80 K un vara gadījumā PL josla ir ~ 360 nm ar laika konstante ~ 50 μ s pie 80 K). Cēlo jonu luminiscence dzīst 700 K. Termiskās dzesēšanas enerģija ir $\sim 0,7$ eV ar frekvenču koeficientu 10^{14} s⁻¹, kas attiecināma uz iekšējo jonu. Tātad, sārnu un cēlu jonu jonu dzesēšanas procesi ir atšķirīgi. Centram ar sārnu joniem piemīt sarežģīts dzesēšanas process, kas modelēts ar diviem procesiem. Viens no tiem ir zemas temperatūras (200 K) dzesēšanas process, kas attiecināms uz procesu, kas ir analogs aulokalizēta eksitona (STE) luminiscences dzesēšanai, kas ir saistīts ar STE stiprības skābekļa-skābekļa saiti. Šajā procesā tiek dzēsts galvenais alumīnija un sārnu ierosinātāju centru skaits. Tomēr ir iespējams mazāk varbūtīgs process. Elektrons paliek uz sārma, kas stimulē skābekļa cauruma stabilitāti.

LUMINESCENCE OF α -QUARTZ CRYSTAL WITH ALUMINUM, ALKALI AND NOBLE IONS IMPURITIES

Anatolij Trukhin

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The photoluminescence of aluminum and alkali ions or noble metals in α -quartz crystals was studied. Blue luminescence at ~ 400 nm corresponds to a luminescence center containing more than one aluminum and alkaline ion as a compensator. The luminescence subjected to thermal quenching from 180 K is also found at high temperatures above 700 K. The thermal quenching energy is 0.15 eV and the frequency coefficient is $3 \cdot 10^7$ s⁻¹. Aluminum-silver center luminescence band ~ 260 nm with time constant ~ 37 μ s at 80 K and in copper case PL band is ~ 360 nm, time constant ~ 50 μ s at 80 K. Noble ion luminescence quenched above 700 K. The thermal quenching energy is ~ 0.7 eV with a frequency coefficient of 10^{14} s⁻¹ attributable to the intra-ion. So, alkaline and noble ion ion quenching processes are different. The center with alkali ions has a complex quenching process simulated by two processes. One is the low-temperature (200 K) process, which is related to a process analogous to the self-trapped exciton (STE) luminescence removal associated with oxygen-oxygen bond. In this process, the main quantity of aluminum and alkaline excited centers is quenched. However, a less probable process is possible. The electron remains on the alkali, which stimulates the stability of the hole on oxygen.

The financial support of the Latvian Science Council Grant No Izp-2018/1-0289 is greatly acknowledged.

LiGaO₂ PIROELEKTRISKĀ UN TERMOSTIMULĒTĀ LUMINISCENCE

Laima Trinklere, Anatolijs Truhins, Jānis Čipa, Baiba Bērziņa, Valdis Korsaks
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Litija metagallāta kristālā LiGaO₂ (LGO) pirmo reizi ir novērota piroelektriskā luminiscence (PEL). Tā ir spontāna gaismas emisija no kristāla ar necentrisku kristāliskā režģa simetriju, un tā rodas, ja mainās kristāla temperatūra. LGO piroelektriskais efekts tika novērots kā atkārtoti ātri starojuma uzliesmojumi, kas parādās parauga temperatūrai pieaugot vai pazeminoties 60-400 K intervālā. Šī pētījuma novitāte, salīdzinājumā ar jau zināmiem pētījumiem citos PEL materiālos ar necentrisku kristāliskā režģa simetriju, ir spontānās luminiscences kinētikas un starojuma spektru mērījumi. Tika konstatēts, ka PEL starojuma dzišanas laiks ir mērāms milisekunžu intervālā, un šo starojumu veido tās pašas fotoluminiscences (PL) joslas, kas rodas paraugu ierosinot ar UV gaismu, bet šo joslu intensitāšu sadalījums dažādiem PLE uzliesmojumiem ir dažāds.

Termoluminiscence (TL) tika pētīta LGO materiālā pēc tā apstarošanas ar 193 nm lāzera gaismu pie 10 K. Temperatūru apgabalā no 30 līdz 400 K tika novērotas vairākas TL joslas. PEL īpašību salīdzinājums ar UV gaismas radītas PL un TL īpašībām ļauj atklāt spontānās PEL mehānismus, kā arī spriest par nevienmērīgu luminiscences centru izvietojumu LGO kristālā.

PYROELECTRIC AND THERMOSTIMULATED LUMINESCENCE OF LiGaO₂

Laima Trinkler, Anatolij Trukhin, Janis Cipa, Baiba Berzina, Valdis Korsaks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

In lithium metagallate LiGaO₂ (LGO) crystal for the first time there has been observed the pyroelectric luminescence (PEL) - spontaneous light emission from a crystal with the noncentrosymmetric lattice, which occurs when the crystal temperature is varied. In LGO the pyroelectric effect was observed in the form of repeated fast pulses both at increase and decrease of temperature in the 60-400 K temperature range. The novelty of the current study compared to the known PEL investigations of other noncentrosymmetric crystals concerns kinetic and spectral measurements of the spontaneous luminescence pulses. It was found that the decay time of a PEL pulse is in the range of milliseconds, while the spectral distribution corresponds to emission bands observed in the UV light induced photoluminescence (PL) with relative yield of particular bands varied from pulse to pulse.

Thermostimulated luminescence (TL) of LGO was observed in the 80-400 K temperature range after irradiation with the 193 nm laser at 10 K as a sequence of several TL peaks. Comparison of PEL characteristics with those of UV-induced PL and TL allows proposal of the mechanism of the spontaneous PEL, as well as estimation of nonuniform distribution character of the luminescence centres in the LGO crystal.

The present research is sponsored from the Latvian Sciences Council Grant No. lzp-2018/1-0361.

RENTGENSTAROJUMA IZRASĪTU PROCESU ANALĪZE LITIJU SATUROŠĀS TRITIJU ĢENERĒJOŠĀS KERAMIKĀS

Jānis Čipa^{1,2}, Artūrs Zariņš^{1,3}, Aleksejs Zolotarjovs², Laima Trinklere²,
Larisa Baumanē^{1,4}, Gunta Ķizāne¹

¹Latvijas Universitātes Ķīmiskās fizikas institūts

²Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

³Daugavpils Universitātes Dabaszinātņu un matemātikas fakultāte

⁴Latvijas Organiskās sintēzes institūts

Pašlaik viens no perspektīvākajiem cieta veida materiāliem tritija ģenerēšanai kodoltermiskās sintēzes reaktoros ir modificētās litija ortosilikāta (Li_4SiO_4) minilodītes ar litija metatitanāta (Li_2TiO_3) piedevām. Šajā pētījumā, izmantojot rentgenstarojuma ierosinātas luminiscences (XRL) metodi, analizēta radiācijas defektu veidošanās un uzkrāšanos Li_4SiO_4 minilodītēs ar dažādu Li_2TiO_3 daudzumu. Rentgenstarojuma ietekmē Li_4SiO_4 minilodītēs ar Li_2TiO_3 piedevām novēro luminiscences emisiju ar viļņa garumu no 350 nm līdz 900 nm, ko var attiecināt uz E' centru ($\equiv\text{Si}\cdot$), Ti^{3+} centru, HC_1 un HC_2 centru ($\equiv\text{Si-O}\cdot$) veidošanos un rekombināciju. XRL komplementāro metožu - elektronu paramagnētiskās rezonances, termostimulētās luminiscences un absorbcijas spektrometrijas - rezultāti apstiprina un papildina informāciju par iepriekš minēto centru veidošanos un uzkrāšanos. Izmantojot TSL metodi noteikts, ka uzkrātie radiācijas defekti Li_4SiO_4 minilodītēs rekombinē temperatūru intervālā no 300 K līdz 700 K.

ANALYSIS OF X-RAY INDUCED PROCESSES IN TRITIUM BREEDING CERAMICS

Janis Cipa^{1,2}, Arturs Zarins^{1,3}, Aleksejs Zolotarjovs², Laima Trinkler²,
Larisa Baumanē^{1,4}, Gunta Kizāne¹

¹University of Latvia, Institute of Chemical Physics

²University of Latvia, Institute of Solid State Physics

³Daugavpils University, Faculty of Natural Sciences and Mathematics

⁴Latvian Institute of Organic Synthesis

Presently, one of the most promising solid-state candidates for the tritium breeding in nuclear fusion reactors is advanced lithium orthosilicate (Li_4SiO_4) pebbles with additions of lithium metatitanate (Li_2TiO_3). In this research, X-ray luminescence (XRL) method was used to analyze the formation and accumulation of radiation-induced defects in Li_4SiO_4 pebbles with different amounts of Li_2TiO_3 . Under exposure to X-rays luminescence emission for Li_4SiO_4 pebbles with Li_2TiO_3 additions was detected with wavelengths ranging from 350 nm to 900 nm and can be attributed to the formation and recombination of E' centers ($\equiv\text{Si}\cdot$), Ti^{3+} centers, HC_1 and HC_2 centers ($\equiv\text{Si-O}\cdot$). XRL complementary methods - electron spin resonance (ESR), thermostimulated luminescence (TSL), and absorption spectrometry - confirms and compliments results of the formation and accumulation of the previously mentioned centers. Using TSL method, it was determined that the accumulated radiation-induced defects in the Li_4SiO_4 pebbles recombine in the temperature range from 300 K to 700 K.

The authors greatly acknowledge the technical and experimental support of O. Leys, M. H. H. Kolb, and R. Knitter (Karlsruhe Institute of Technology, Germany).

BALTĀ FOSFORA REŽĢA SVĀRSTĪBAS

Jānis Brokāns¹, Georgijs Čikvaidze², Jevgēņijs Gabrusenoks²

¹*Daugavpils Universitātes*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Brīvā veidā fosforam ir zināmas trīs alotropiskās formas: baltais fosfors, sarkanais fosfors un melnais fosfors. Balto fosforu parastos apstākļos (α forma) veido P₄ tetraedriskas molekulas, kuras ir sakārtotas tilpumā centrētā kubiskajā kristāliskajā režģī.

Mūsu darbā ir veikti baltā fosfora kristāliskā režģa svārstību pētījumi. Režģa svārstību aprēķiniem tika izmantota molekulārās dinamikas aprēķinu programma GULP. Fosfora atomu mijiedarbības parametru noteikšanai tika izmantoti eksperimentālie IS un Ramana spektri, kā arī teorētiski aprēķinātās režģa svārstību frekvences. Teorētiski baltā fosfora svārstību frekvences tika aprēķinātas, izmantojot programmu CRYSTAL14. Ir noteikti svārstību spektra raksturīgie apgabali: P₄ molekulas iekšējās svārstības pie 360 cm⁻¹, 460 cm⁻¹ un 600 cm⁻¹ un režģa un librācijas svārstības zem 120 cm⁻¹.

LATTICE VIBRATIONS OF WHITE PHOSPHORUS

Janis Brokans¹, George Chikvaidze², Jevgenijs Gabrusenoks²

¹*Daugavpils University*

²*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

Phosphorus exist as white, black and red allotropes at ambient conditions. White phosphorus at ambient conditions (α form) consists of P₄ tetrahedra arranged in the body centered cubic crystalline lattice.

In our work, the dynamics of the crystalline lattice of white phosphorus is studied. The calculations of the crystal lattice vibrations were made using the molecular dynamics calculation program GULP. The parameters for the interaction of phosphorus atoms were obtained using the experimental IR and Raman spectra and the theoretically calculated lattice vibration frequencies. Theoretical vibration frequencies were obtained in DFT calculations using the CRYSTAL14 program. There are several characteristic areas in the spectrum of variations: the internal vibrations of the P₄ molecule at 360 cm⁻¹, 460 cm⁻¹ and 600 cm⁻¹ and the lattice and libration vibrations below 120 cm⁻¹.

20. februāris

**FOTONIKA UN OPTISKIE
MATERIĀLI**

TIEŠĀ OPTISKĀ IERAKSTA FOTOREZISTU IZSTRĀDE UN PIELIETOJUMS

Jānis Teteris

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Šinī darbā tiks apskatīts *tiešā* ieraksta fotorezistu izpētes un tehniskās izstrādes patreizējais stāvoklis, kuru darbības princips pamatojas uz fotoinducētas virsmas reljefa veidošanos amorfās plānās plēvēs. Šis pētījums tika veikts ar plānām amorfā halkogenīdu (As-S, As-S-Se un Ge-S, -Se sistēmām) un azobenzola saturošo organisko savienojumu plēvēm.

Tika parādīts, ka virsmas reljefa režģa (SRG) augšanas līkņu gaitu var iedalīt trīs attīstības stadijās: fotoinducētās dubultlaušanas indukcijas periods, SRG lineārā augšanas stadija un SRG veidošanās procesa piesātinājums. Tika novērtēta fotoinducētas dubultlaušanas ietekme uz reljefa veidošanās procesu amorfajos As-S un As-S-Se plēvēs un salīdzināta ar mērījumiem azo-benzolu saturošās organiskās plēvēs. Parādīts, ka SRG veidošanās piesātinājums ir atkarīgs no ieraksta materiāla virsmas spraiguma [1].

Tiks apspriestas amorfo materiālu virsmas strukturēšanas praktiskās izmantošanas iespējas, izmantojot fotoinducēto masas pārvietošanas parādību.

1. J. Teteris, Journ. Optoelectronics and Advanced Materials, 20 (2018) 229-234.

DEVELOPMENT OF PHOTORESISTS FOR *DIRECT* OPTICAL RECORDING

Janis Teteris

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

This review covers the present state of research and technical development of *direct* recording photoresists based on the formation of photo-induced surface relief in amorphous thin films. This research was performed on the thin films of amorphous chalcogenide (As-S, As-S-Se and Ge-S, -Se systems) and azobenzene containing organic compounds.

It was shown that the course of surface relief grating (SRG) growth curves can be divided in three development stages: an induction period of photo-induced birefringence, linear growing of SRGs and saturation of SRG inscription process. The influence of the photo-induced birefringence on the relief formation process in amorphous As-S and As-S-Se films was evaluated and compared with the measurements on azo-benzene containing organic glass films. It is shown that the saturation of SRG formation depends on the surface tension of recording material [1]. The practical application possibilities of amorphous film patterning via photoinduced mass displacement phenomenon will be discussed.

1. J. Teteris, Journ. Optoelectronics and Advanced Materials, 20 (2018) 229-234.

FOTOINDUCĒTĀ ANIZOTROPĀ GAISMAS IZKLIEDE “MĪKSTAJOS” MATERIĀLOS

Māra Reinfelde, Jānis Teteris, Jeļena Miķelsone
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Sākotnēji fotoinducētā anizotropā polarizētas gaismas izkliede tika novērota LiNbO₃ kristālos pie hologrāfiskā (HG) ieraksta ar diviem stariem, taču tika konstatēts, ka tā novērojama arī paraugu apgaismojot ar vienu koherentas gaismas staru. Tika uzskatīts, ka šo efektu izraisa krītošā gaismas stara difrakcija uz tā sauktām „trokšņa” HG, kas veidojas krītošās un uz materiāla nevienādībām izkliedētās gaismas interferences rezultātā.

Šāda veida izkliede tika pamanīta As-S-Se plēvītēs un AAB:BADGE azo-epoksīda kārtiņās atsevišķos HG virsmas reljefa ieraksta gadījumos. Tā, piemēram, pētot hologrāfisko pašpastiprināšanos (SE) AAB:BADGE azo-epoksīda kārtiņās, gan difragētā, gan cauri paraugam izgājušā stara virzienā, tika novērota virziena un laika atkarīga izkliede. Tā kā SE pamatā ir divstaru ieraksta pastiprināšana ar vienu staru, tad šī stara „uzvedība” materiālā ir būtiska. Tādejādi, apstākļos, kā pie SE, tika veikts ieraksts ar vienu staru. Lai saprastu, vai minētā izkliede ir virsmas vai tilpuma efekts, šāds ieraksts tika izdarīts gan no plēvītes, gan arī no stikla puses: 1) tika novērota no laika atkarīga izkliedētās gaismas indikātrise; 2) mikroskopiski virsmas pētījumi parādīja, ka abos gadījumos ir izveidojies virsmas reljefs. Pie tam, gan difragētās gaismas izkļiedes, gan prevalējošais virsmas reljefa HG režģa virziens atkarīgs no ierosinotā stara polarizācijas.

PHOTOINDUCED ANISOTROPIC LIGHT SCATTERING IN SOFT MATERIALS

Mara Reinfelde, Janis Teteris, Jeļena Miķelsone
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Initially, anisotropic polarized light scattering (APGI) was observed in the LiNbO₃ crystals during the holographic (HG) recording with two beams. It was also found under illumination by one coherent light beam. This effect was believed to be caused by the diffraction on so-called "noise" HG which was formed by interference of the incident and scattered by material heterogeneities light.

During special recording conditions such kind of light scattering in As-S-Se films and in AAB: BADGE azo-epoxy films were noticed as well. For example in AAB: BADGE azo - epoxy films, such a scattering was observed during the studies of holographic self-enhancement (SE), both in direction of diffracted and transmitted light beams. As it is known, HG self-enhancement (SE) is based on a single-beam amplification of low efficiency HG recorded by two beams. Therefore, the behavior of this single beam in the material becomes essential. So, under the same conditions such as in the case of SE, a single-beam recording was made. To understand whether that is a surface or volume effect, such a recording was made from both the film and the glass side. For both cases 1) a time-dependent diffuse light scattering was observed and 2) microscopic surface relief structure was formed. In addition, both diffracted scattered light "stretching" and prevailing surface relief grid directions depends on the polarization of the excitation beam.

VEKTORIERAKSTA RELAKSĀCIJAS ATKARĪBA NO POLARIZĀCIJAS AZOSTIKLU MOLEKULĀRAJĀS KĀRTIŅĀS

Pēteris Augustovs, Andris Ozols, Kaspars Traskovskis, Valdis Kokars, Lauma Laipniece,
Armands Rudušs, Kārlis Balodis
Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte

Eksperimentāli noskaidrota tādu hologrāfisko režģu relaksācija, kas ir ierakstīti ar ortogonāli cirkulāri polarizētiem (L un R) 532 nm lāzera stariem molekulāro azostiklu kārtiņās un nolasīti ar cirkulāri polarizētu (R vai L) 632.8 nm lāzera staru. Tika pētīti arī paraugi "sendviču" (stikls-kārtiņa-stikls) izpildījumā. Konstatētas sekojošās relaksācijas īpatnības: pēc difrakcijas efektivitātes (DE) maksimuma sasniegšanas dzišana nenotiek; pēc tās ekspozīcijām, nolasot ar R -polarizētu staru, notiek DE dzišana līdz kādai konstantai vērtībai, bet, nolasot ar L -polarizētu staru, dzišana nenotiek; DE ar R polarizāciju vienmēr bija lielāka nekā nolasot ar L polarizāciju; "sendvičos" DE, nolasot ar R polarizāciju, relaksēja līdz nullei, bet, nolasot ar L polarizāciju, DE bija nulle. Relaksācijas laiki bija robežās no 4 līdz 44 minūtēm, un tie galvenokārt samazinājās, ja palielināja režģa periodu. Novērotās relaksācijas īpatnības kļūst saprotamas, ja pieņem, ka sākotnēji ierakstās fotoinducētās dubultlaušanas režģis, tad virsmas reljefa režģis (VRR). R polarizācija "jūt" abus režģus, bet L polarizācija - tikai VRR. Pie lielām ekspozīcijām dominē VRR. Šie rezultāti apstiprina J.Miķelsones 2018.gada promocijas darbā izteikto tēzi, ka dubultlaušanas režģa ieraksts ir nepieciešams nosacījums VRR izveidei.

RELAXATION POLARIZATION DEPENDENCE OF VECTOR RECORDING IN AZOBENZENE MOLECULAR GLASSY FILMS

Pēteris Augustovs, Andris Ozols, Kaspars Traskovskis, Valdis Kokars, Lauma Laipniece,
Armands Rudušs, Karlis Balodis
Faculty of Material Science and Applied Chemistry, Riga Technical University

Holographic grating relaxation is studied in azobenzene molecular glassy films recorded by circularly orthogonally polarized 532 nm laser beams L and R . The readout was made by circularly polarized (R or L) 632.8 nm laser beam. Sandwich-type samples (glass-film-glass) were also studied. The following relaxation features have been found: after reaching diffraction efficiency (DE) maximum no DE decay takes place; DE read out by R -polarized beam was always higher than that by L -polarized beam; in sandwich type samples DE decayed until zero when read out by R -polarization whereas DE was zero when read out by L -polarization. FWHM relaxation times varied from 4 to 44 minutes, and they mainly decreased when grating period was increased. The observed relaxation peculiarities can be understood if one assumes that photoinduced birefringence grating is recorded followed by surface relief grating (SRG) recording. R -polarization "feels" both gratings whereas L -polarization only SRG. At large exposures SRG dominate. These results confirm the conclusion made by J.Mikelsone in her 2018 PhD thesis that birefringence grating recording in azobenzene materials is a necessary condition for SRG appearance.

The financial support of Joint Latvian-Ukrainian project (2017-2018) is greatly acknowledged.

JAUNU SINTĒZES STIKLU VEIDOJOŠU PIRANILIDEN ATVASINĀJUMU GAISMAS PASTIPRINĀŠANAS ĪPAŠĪBU PĒTĪJUMI

Patricija Paulsone¹, Elmārs Zariņš², Kristine Lazdoviča², Valdis Kokars² un Aivars Vembris¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Lietišķās ķīmijas institūts*

Viena no populārākām sarkanās gaismas organisko lāzeru aktīvām vielām ir 6-(terc-butil)-4H-pirān-4-ilidēnmalonitrils (DCM). Galvenā DCM molekulu problēma ar ir to kristalizācija, kas ierobežo vielas pieļaujamo koncentrāciju plānajā kārtiņā. Telpisko grupu pievienošana šādai molekulai dotu iespēju izveidot gaismas pastiprinošo sistēmu no neatšķaidītām plānām kārtiņām.

Šajā darbā tiks apskatītas optiskās un gaismas pastiprinājumu īpašības divpadsmit piraniliden atvasinājumiem. Tām ir četras dažādas elektronu akceptoru grupas kombinācijā ar trīs dažādām stiklu veidojošām telpiskām grupām. Plānās kārtiņas tika izveidotas no dihlormetāna šķīduma ar rotējošā diska metodi. Paraugiem tika mērīts absorbcijas spektrs un pastiprinātā spontānā emisija (ASE). Plānajās kārtiņās ASE tika ierosināta ar nanosekunžu impulsu lāzeri pie gaismas viļņa garuma, kas atbilst konkrētās vielas absorbcijas maksimuma viļņa garumam.

Prezentācijā tiks analizēts elektronu akceptoru un telpisko grupu ietekme uz vielas optiskām un gaismas emisijas īpašībām.

INVESTIGATION OF LIGHT AMPLIFICATION PROPERTIES OF NEW SYNTHESISED GLASS FORMING PYRANILIDEN DERIVATIVES

Patricija Paulsone¹, Elmars Zarins², Kristine Lazdovica², Valdis Kokars² and Aivars Vembris¹

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Institute of Applied Chemistry, Riga Technical University*

One of the most popular red light emitting organic laser dye is 6-(tert-butyl)-4H-pyran-4-ylidene malononitrile (DCM). DCM molecules can be used in the thin film at low concentration due to their crystallization. Such effect could be reduced by adding bulky groups to these molecules. It would benefit in creation of light amplifying system from the neat thin films.

In this work optical and light amplifying properties of twelve pyraniliden derivatives will be investigated. They have four different electron acceptor groups in combination with three glass forming bulky groups. Thin films from dichloromethane solution were prepared by spin coating method and its absorption spectra and amplified spontaneous emission (ASE) were measured. ASE in thin films was excited by nanosecond pulse laser at the particular compound absorption maximum wavelength.

In presentation will be analyzed the affect of electron acceptor and bulky groups on the optical and light emission properties of the compound.

This work was supported by European Regional Development Fund within the Project No. Nr.1.1.1.1/16/A/046.

20. februāris

IERĪCES UN TEHNOLOĢIJAS

METODIKAS IZSTRĀDE SPEKTROSKOPISKAI CO₂ ELEKTROKATALĪTISKAS REFORMĒŠANAS REAKCIJAS PRODUKTU NOTEIKŠANAI

Jānis Kleperis, Georgijs Čikvaidze, Ainārs Knoks, Laimonis Jēkabsons, Pēteris Lesničenoks,
Artis Volkovs, Mārtiņš Vanags
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Viens no ceļiem zema oglekļa ekonomikas attīstībā pasaulē ir samazināt ogļūdeņražu un CO₂ emisijas tautsaimniecībā gan rūpniecības, gan enerģētikas, gan transporta sektoros. To var veikt, gan samazinot oglekli saturošu fosilo degvielu izmantošanu, gan attīrot izplūdes gāzes no ogļūdeņražiem un CO₂. Attīrīšanas process ir efektīvs, ja piesārņotājgāzes tiek reformētas par derīgiem produktiem atkārtotai izmantošanai tautsaimniecībā. Pēdējās desmitgadēs popularitāti iekarojusi ražotnēs atmosfērā izmestā CO₂ reformēšana par degvielu – sintētisko dabas gāzi, metanolu, etilēnu, ko dēvē par “power to gas” tehnoloģiju.

Lai pārraudzītu reakcijas produktus, kas veidojas uz katoda CO₂ elektrokatalītiskas reformēšanas procesā, pētniecībā mazāk izmantota ir infrasarkanās spektroskopijas metode. Mūsu darbā bez parastās gāzu kivetes IR caurlaidības spektroskopijas tiek likts priekšā izmantot arī pilnās iekšējās atstarošanas (ATR – *attenuated total reflection*) FTIR spektroskopijas metodi kopā ar speciāli konstruētu elektroķīmisko šūnu. Šūna tiek konstruēta tieši virs ATR kristāla, kas ļauj sekot elektroķīmiskajām reakcijām uz izvēlēta elektroda (katods vai anods) virsmas procesa laikā.

DEVELOPMENT OF METHODOLOGY FOR THE SPECTROSCOPIC DETECTION OF CO₂ ELECTROCATALYTIC REFORMATION PRODUCTS

Jānis Kleperis, Georg Chikvaidze, Ainars Knoks, Laimonis Jekabsons, Peteris Lesnicenoks,
Artis Volkovs, Martins Vanags
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

One of the paths for the low carbon economy in the world is to reduce the emissions of hydrocarbons and CO₂ in the industrial, energy and transport sectors. This can be done both by reducing the use of carbon-containing fossil fuels and by purifying the exhaust gases from hydrocarbons and CO₂. The purification process is effective if the pollutant gases are reformed as useful products for re-use in the economy. Over the last decades, the reformation of CO₂ emissions from the industrial plants into synthetic methane, methanol, ethylene – the technology called “power to gas” - has gained popularity.

Between researchers the infrared spectroscopy is less used to monitor reaction products formed by the cathodic CO₂ electrocatalytic reformation process.

In our work together with conventional gas cell IR transmittance spectroscopy, the FTIR spectroscopy method of attenuated total reflection (ATR) is also used in conjunction with a specially designed electrochemical cell. The cell is constructed just above the ATR crystal, which allows to follow the electrochemical reactions on the surface of the selected electrode (cathode or anode) in situ.

Funding from European Union`s Horizon 2020 Research and Innovation Program project under grant agreement No 768789 is greatly acknowledged.

AUTOSTĀVVIETU KLIENTU UZSKAITES SISTĒMA

Irina Gvardina, Pjotrs Kaļiņikovs, Alberts Kristiņš, Jānis Melderis, Juris Veinbergs,
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Paredzēta autostāvvietām, kuras aprīkotas ar iebraukšanas/izbraukšanas barjerām, klientu identifikācijas karšu lasītājiem un citām ierīcēm, kuras nodrošina korektu klientu pārvietošanos caur kontrolpunktu.

Klienti var būt "pastāvīgie" un "pagaidu".

Dati par visiem klientiem glabājas datu bāzē (mašīnas marka, valsts numurs, klienta vārds, tālruņa numurs, noteiktā vieta stāvvietas teritorijā un tās statuss (brīva/aizņemta), maksājuma periods). Ne visi lauki ir obligāti aizpildāmi.

Pastāvīgie klienti veic samaksu atbilstoši tarifam reizi mēnesī vai biežāk. Iebraukšana/izbraukšana ar karti tiek reģistrēta pie barjerām. Programmatūra neļauj iebraukt vai izbraukt divas reizes pēc kārtas.

No pagaidu klientiem pirms iebraukšanas stāvvietā tiek iekasēta maksa par vienu diennakti. Ja klients izbrauc apmaksātā laika ietvaros, sistēmas operators to izlaiž ar virtuālas pogas palīdzību. Ja laiks ir nokavēts, tad klients tiek izlaists pēc papildus samaksas veikšanas.

Pēc pagaidu klienta izbraukšanas visi dati par tā uzturēšanos autostāvvietā saglabājas datu bāzē, bet atbrīvotā vieta tiek uzskatīta par brīvu.

Visas klientu iemaksas summējas līdz inkasācijas brīdim.

Administrators var mainīt fiksētos un pagaidu tarifus, administratora paroli, autostāvvietas vietas statusu (aizņemts / brīvs), abonēšanas derīguma termiņu, abonementā norādīto novietošanas vietu, identifikācijas kartes un veikt inkasāciju.

CAR PARK CUSTOMERS TRACKING SYSTEM

Irina Gvardina, Pjotrs Kaļiņikovs, Alberts Kristiņš, Jānis Melderis, Juris Veinbergs.
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The customers tracking system is designed for car parks equipped with entry / exit barriers, customers identification cards readers, and other devices that ensure correct customers movement through the checkpoint.

Customers can be "permanent" and "temporary".

Data for all customers are stored in the database (cars mark, country number, customer name, telephone number, location the parking place in the car park and its status (free / busy), payment period). Not all fields are required to be filled in.

Permanent customers pay monthly or more frequently. Check-in / check-out is recorded at the barriers. The software does not allow you to enter or leave twice sequentially in the same direction.

Temporary customers are charged one day before entering the car park. If the customer leaves within the paid time, the system operator releases it with the help of a virtual button. If the time is too late, the customer is released after an extra payment. After leaving of the temporary client, all the data on his stay in the car park was retained in the database, but the vacancy is considered free.

All payments of the customers are added up on the time of cash collection. Administrator can change fixed and temporary tariffs, administrator's password, parking space status (busy / vacant), subscription validity period, the location indicated in the subscription, identification cards and provide cash collection.

BIOLOĢISKĀS PRETESTĪBAS MĒRĪŠANAS IESPĒJAS UN IZAICINĀJUMI. CENTRĀLĀS AORTAS SPIEDIENA NOVĒRTĒŠANA.

Paul Annus¹, Alberts Kristiņš²

¹ Tallinas Tehnoloģiskās universitātes Tomasa Johana Zēbeka elektronikas nodaļa.

² Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Pierādījumi liecina, ka centrālās aortas spiediena (CAS) novērtēšana ir būtiska, lai precīzi analizētu sirds un asinsvadu saslimšanas gadījumus un pieņemtu lēmumus par ārstēšanu. Tiešā invazīvā CAS mērīšana ir vislabākā iespējamā tā iegūšanas iespēja un to izmanto klīniskajā vidē. Tomēr to izmanto piesardzīgi, tikai kā pēdējo līdzekli, ņemot vērā tās izmaksas un saistīto risku.

Tāpēc CAS neinvazīvais novērtējums ir būtisks un to izmanto jau vairākus gadus. Parasti ārējais spiediena sensors tiek izmantots aplanācijas tonometrijā, un šī metode lielā mērā balstās uz O'Rourke un citu autoru pētījumiem. Spiediena sensors tiek novietots uz radiālās artērijas, un centrālās aortas spiediens tiek novērtēts, izmantojot reģistrētās viļņu formas vispārējo matemātisko transformāciju. Lai gan plaši izmantota kā izvēles metode un dažreiz pat apzīmēta par zelta standartu centrālās aortas spiedienu, impulsa viļņu ātruma un sirds darbības mainīguma neinvazīvai novērtēšanai, tai ir arī nopietns trūkums - liela atkarība no operatora prasmēm. Labas perspektīvas ir elektriskās bioimpedances mērīšanas metodei, jo tā ir ar labāku atkarīgumu. Tomēr arī tai ir dažādas problēmas. Tiek lēsts, ka 85% bioimpedances mērījumu problēmu ir saistītas ar elektrodiem un to savienojumu ar ķermeni. Ir arī neskaidrības par procesa cēloņsakarībām. Ir veikti eksperimenti, lai novērtētu elektrisko kontaktu - saskarni starp mērīšanas aparātu un dzīvajiem audiem. Radiālajai artērijai tika izmantotas dažādas elektrodu konfigurācijas no dažādiem elektrodu materiāliem, ir izdarīti daži secinājumi, tomēr daži jautājumi paliek neatbildēti.

BIO-IMPEDANCE MEASUREMENT OPPORTUNITIES AND CHALLENGES.ASSESSMENT OF THE CENTRAL AORTIC PRESSURE

Paul Annus¹, Alberts Kristiņš²

¹ Thomas Johann Seebeck Department of Electronics, Tallinn University of Technology

² Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Evidence suggests that assessment of the central aortic pressure (CAP) is vital for accurate detection of cardiovascular events and for making treatment decisions.

Direct invasive CAP measurement is the best acquisition option possible and is used in clinical environment. It is used sparingly, only as a last resort, due to the cost and associated risk.

Non-invasive assessment of the CAP is therefore essential, and it has been around for several years already. Typically, external pressure sensor is used in applanation tonometry, and the method is largely based on the research by O'Rourke et al. Pressure sensor is placed on the radial artery, and central aortic pressure is estimated by generalized mathematical transformation of the recorded waveform. While widely used, almost method of choice and sometimes even described as gold standard for non-invasive assessment of central pressures, pulse wave velocity and heart rate variability it has also serious drawback – strong dependence on operator skills. For measurement method with better repeatability an electrical bioimpedance holds a strong promise. Nevertheless, it has different set of associated problems. It is estimated that 85% of the problems in bioimpedance measurement can be tracked down to electrodes and their connection with the body. There is also uncertainty behind the causality of the process. Experiments have been conducted for the assessment of the electrical interface between measurement apparatus and the living tissue. Different electrode configurations were used over the radial artery along with different electrode materials. Some conclusions are drawn, some questions remain unanswered.

AUTONOMAS SENSORU SISTĒMAS IZVEIDE GRAUDU KALTES MONITORINGAM: VĒLAMĀIS PRET IESPĒJAMO

Alberts Kristiņš, Juris Veinbergs, Irina Gvardina, Jānis Kleperis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Mūsdienu elektronikas iespējas autonomā vides monitoringā ar bezvadu datu pārraidi un uzkrāšanu ir daudzveidīgas un ļauj monitoringa tīkla veidotājam zināmu brīvību, realizējot jebkuru uzdevumu.

Lauksaimniecībā arvien populārākas paliek tehnoloģijas, kuras atstāj vismazāko iespaidu uz vidi. Tas attiecas arī uz tik tradicionālu un konservatīvu jomu kā graudkopība. Epizodiski parādās pētījumi par ozona ietekmi uz graudiem – izrādās, ka ozons var gan aizvietot nezāļu apkarotājus, gan graudaugu kodinātājus, gan arī uzlabo graudu kvalitāti žāvēšanas procesā. Pierādīts, ka ozonam piemīt antibakterioloģiskas īpašības, turklāt ozona molekulai apkārtējā vidē ir mazs dzīves laiks – tas ātri sadalās. Šī pētījuma uzdevums ir izveidot sensoru sistēmu tādas graudu kaltes monitoringam, kur ozonu izmanto kā piedevu gaisam graudu žāvēšanas procesā. Apskatīts vēlamais un minimālais monitoringa parametru skaits, prasības sensoriem, to optimālais izvietojums kaltē, datu savākšana, pārraide un uzglabāšana, datu apstrādes un attēlošanas iespējas.

Pateicība Lauku Atbalsta Dienesta projektam Nr.18-00-A01620-000003 "Tehnoloģijas izstrāde graudu kaltēšanai ar aktīvo vēdināšanu pielietojot ozonu" par finansējumu.

CONSTRUCTION OF THE AUTONOMOUS SENSOR SYSTEM FOR GRAIN DRYING MONITORING: WANTING AND OPPORTUNITIES

Alberts Kristiņš, Juris Veinbergs, Irina Gvardina, Jānis Kleperis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Modern electronics capabilities for autonomous environmental monitoring with wireless data transfer and storage are diverse and allow the network maker some freedom in performing any task.

Technologies that leave the least impact on the environment are increasingly popular in agriculture. This also applies to such a traditional and conservative area as grain cultivation. Occasionally, studies on the impact of ozone on grains appear - it turns out that ozone can both replace chemicals for weed control and grain etching, as well as improve grain quality during the drying process. Ozone has been shown to have antibacterial properties, and the ozone molecule in the environment has a low life span - it decomposes rapidly. The purpose of this study is to create a sensor system for monitoring grain dryers, where ozone is used as an additive for air drying of grains. Desired and minimum number of monitoring parameters, sensors requirements, their optimal placement in the dryer, data collection, transmission and storage, data processing and display capabilities will be discussed.

The financial support of Rural Support Service project Nr.18-00-A01620-000003 "Technology development of grain drying with active ventilation using ozone" is greatly acknowledged.

20. februāris

STENDA REFERĀTI

NO TEMPERATŪRAS ATKARĪGA Gd^{3+} JONU IEBŪVĒŠANĀS CaF_2 NANOKRISTĀLOS

Jēkabs Cīrulis, Andris Antuzevičs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Ar retzemju joniem aktivētiem fluorīta tipa kristāliem ir potenciāli pielietojumi optikā. Optiskās īpašības ir saistītas ar piejaukuma jona tiešo apkārtējo struktūru. Gd^{3+} jonu struktūra ir vairāk pētīta makroizmēra kristāliem. Šajā darbā mēs pētījām, kā Gd^{3+} iebūvējas nano-izmēra kristālos.

CaF_2 paraugi tika izgatavoti ar dažādām metodēm – nogulsnešanu un hidrotermisko sintēzi. Izmantojot rentgenstaru difrakciju, tika noteikts, ka iegūtais paraugs ir kubisks CaF_2 un aprēķināts, ka daļiņu vidējais izmērs ir ar kārtu 70 nm.

Kubiskā simetrijā trīsvērtīga piejaukuma lādiņš nav optimāli nokompensēts, taču struktūra ir istabas temperatūrā stabila. Lai notiktu Gd^{3+} lokālās struktūras izmaiņas, paraugi tika karsēti dažādās temperatūrās gaisa atmosfērā. Izmantojot elektronu paramagnētiskās rezonanses (EPR) metodi, tika pētītas Gd^{3+} valences elektronu un tuvākās apkārtnes mijiedarbības izmaiņas.

Nogulsnētajam paraugam tika novēroti tikai kubiskas simetrijas Gd^{3+} centri, bet hidrotermiski apstrādātajam – gan kubiski, gan tetragonāli. Gaisā karsētajos paraugos tika novēroti papildus EPR signāli. Iegūto spektru aina visdrīzāk atbilst vienai noteiktai konfigurācijai, kuras EPR spektru nulles lauka sašķelšanās parametri tika iegūti, modelēšanā izmantojot iterāciju metodi.

TEMPERATURE DEPENDENT Gd^{3+} ION CENTRE INCOORPORATION IN CaF_2 NANOCRYSTALS

Jekabs Cirulis, Andris Antuzevics
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Rare earth ion doped fluorite type crystals have potential uses in the field of optics. Optical properties depend on the dopant interaction with its direct surroundings. Gd^{3+} doped CaF_2 has been previously studied in macroscopic crystals. In this study we have investigated Gd^{3+} doped CaF_2 nanocrystals.

CaF_2 samples were prepared with the following methods – precipitation and hydrothermal synthesis. X-ray diffraction results showed that the obtained samples were cubic CaF_2 and the calculated nanocrystal size was approximately 70 nm

In cubic CaF_2 charge of a trivalent activator is not optimally compensated, however the structure is stable at room temperature. To cause changes in Gd^{3+} local structure the samples were annealed at different temperatures in air atmosphere. Interactions of Gd^{3+} valence electrons and their surroundings were investigated by the electron paramagnetic resonance (EPR) method.

Cubic symmetry Gd^{3+} centres were observed for the precipitated sample, but for the hydrothermal – cubic, as well as tetragonal. Additional EPR signals appeared in the annealed samples. EPR spectra zero field splitting parameters were calculated from simulations of the spectra using the iteration method.

BRĪVO RADIKĀĻU DAUDZUMA PĒTĪŠANA ŠĶĪSTOŠAJOS DZĒRIENOS AR ELEKTRONU PARAMAGNĒTISKO REZONANSI

Daniels Gorovojs¹, Jānis Pudāns¹, Pēteris Bricis¹, Andris Antuzevičs²

¹*Rīgas Valsts 1. ģimnāzija*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Kafija ir 3. izplatītākais dzēriens pasaulē, un tā sastāvā ir vairāk nekā 1000 dažādu ķīmisko savienojumu, tai skaitā brīvie radikāļi. Vairākas publikācijas norāda uz to, ka brīvie radikāļi var izraisīt sirdsdarbības traucējumus, bojāt organismam vitāli svarīgus savienojumus, tai skaitā lipīdus, olbaltumvielas un nukleīnskābes, kā arī paātrināt novecošanu.

Vairāki pētījumi apskata brīvo radikāļu koncentrāciju kafijās, tējās un citos šķīstošajos dzērienos, taču nav atrasti darbi, kuros brīvo radikāļu koncentrācija tiktu salīdzināta šajos dzērienos, kā arī tiktu apskatīti tādi retāk sastopami dzērieni kā kakao un cigoriņš.

Zinātniski pētnieciskā darba ietvaros tika sagatavoti un apskatīti 16 dažādu dzērienu paraugi, izmantojot elektronu paramagnētiskās rezonanses (EPR) metodi. Darbā tika salīdzināti iegūtie EPR signāli katram dzērienam, kas atbilst brīvo radikāļu skaitam uz tilpuma vienību, un tika noteikts, ka no apskatītajiem dzērieniem vislielākā brīvo radikāļu koncentrācija ir maltajās kafijās, bet vismazākā – ātri pagatavojamajās kafijās.

INVESTIGATION OF FREE RADICALS IN SOLUBLE BEVERAGES USING ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE

Daniels Gorovojs¹, Janis Pudans¹, Peteris Bricis¹, Andris Antuzevics²

¹*Riga State gymnasium No. 1*

²*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

Coffee is the 3rd most common beverage in the world and contains over 1,000 different chemical compounds, including free radicals. Several publications indicate that free radicals can cause heart problems, damage vital compounds of the body, including lipids, proteins and nucleic acids and accelerate aging.

Several studies examine the concentration of free radicals in coffee, tea and other soluble beverages, but no work has been found to compare free radicals in these beverages and to examine more exotic beverages, such as cocoa and chicory.

In the framework of the scientific research project samples of 16 different beverages were prepared and reviewed using the electron paramagnetic resonance (EPR) method. The obtained EPR signals of each beverage, which correspond to the number of free radicals per volume unit were compared and it was determined that the highest concentration of free radicals from the beverages examined was in ground coffee, while the smallest – in instant coffee.

AR HROMU DOPĒTA ALFA ALUMĪNIJA OKSĪDA IZMANTOJAMĪBA DOZIMETRIJĀ

Ernests Einbergs, Aleksejs Zolotarjovs, Krišjānis Šmits, Ivita Bite
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Alumīnija oksīdu aktīvi pēta tā fizikālo un ķīmisko īpašību dēļ. Īpašā uzmanība tiek pievērsta tieši nano mēroga daļiņu pētīšanai to augstās cietības, ķīmiskās stabilitātes, elektriskās un termālās vadītspējas un noturības pret dilšanu dēļ. Bezdefektu un bezpiejaukumu trigonālajam alumīnijam novērojama arī laba caurspīdība redzamajā diapazonā. Trigonāla alumīnija nano daļiņas laboratorijas apstākļos ir iespējams iegūt ar vairākām metodēm un šajā pētījumā tiks apskatīta sol-gel metodes pieejamība vēlamo apstākļu iegūšanai. Darbā tiek plānots izpētīt hroma iebūvēšanos kristālā ar rentgena vai lāzera luminiscences metodi novērojot piejaukumu emisijas joslas spektra redzamajā daļā. Papildus tam ir plānots apskatīt defektu vai piejaukuma jonu iebūvēšanos kristāla režģī spektra redzamajā diapazonā, reģistrējot termāli stimulēto luminiscenci virs istabas temperatūrās. Tiks secināts, vai ir iespējams lietderīgi izmantot $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Cr}$ nanomateriāla dozimetriskās īpašības.

WITH CHROME DOPED ALUMINA USABILITY IN DOSIMETRY

Ernests Einbergs, Aleksejs Zolotarjovs, Krisjanis Smits, Ivita Bite
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Aluminium oxide is being actively researched due to its physical and chemical properties. Especially nano sized alumina particles due to their hardness, chemical stability, electrical and thermal conductance and high resistance to abrasion. Undoped and pure trigonal aluminium has good transparency in the visible spectral region. Trigonal alumina nanoparticles can be obtained in laboratory conditions using sol-gel method and in this study we are planning to detect the quantity of chrome in our samples and its incorporation in crystal lattice. Also to observe emission spectra in the visible spectrum and observe defect or doped ion incorporation in our crystals by registering thermally stimulated luminescence signal above room temperature in the visible region. We will conclude if it is possible to use with chrome doped alumina dosimetric characteristics in a meaningful way.

Financial support provided by Scientific Research of Luminescence Mechanisms and Dosimetric Properties in Perspective Nitrates and Oxides with TL and OSL Methods Nr. LZP-2018/1-0361 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.

AR FLUORU AKTIVĒTA UN SĀRMU METĀLIEM LEGĒTA SiO₂ OPTISKO ĪPAŠĪBU IZPĒTE

Krišjānis Roze, Madara Leimane, Karīna Taranda, Ivita Bite, Katrīna Laganovska,
Krišjānis Šmits, Linards Skuja.
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Silīcija dioksīds (SiO₂) ir sastopams dabiskos apstākļos, visbiežāk smilts un citu minerālu veidā, taču tas tiek aktīvi sintezēts arī laboratorijās. Mākslīgi ražotam un dabiskam SiO₂ ir novērojamas atšķirības, jo, sintezējot SiO₂, ir iespējams novērst tā dabiskās nepilnības.

SiO₂ izmantošana tādās nozarēs kā optika, elektronika, nanotehnoloģijas, medicīna, bioķīmija, pārtikas ķīmija pierāda tā plašās pielietojuma iespējas. Piemēram, SiO₂ sintēze ar fluoru vai sārnu metālu piemaisījumiem dažādās koncentrācijās maina vielas fizikālās, ķīmiskās un optiskās īpašības.

Cietvielu fizikas institūta Cietvielu radiācijas fizikas laboratorijā šobrīd tiek aktīvi sintezēti SiO₂ nanokristāli. Darba gaitā SiO₂ nanodaļiņu hidroksilgrupas tika aizvietotas ar fluora grupām un sārnu metālu piemaisījumiem. Pētījumā tika apskatītas nanodaļiņu sintēzes un piemaisījumu ietekme uz optiskajām īpašībām. SiO₂ daļiņas, kas aktivētas ar fluoru, palielina gaismas caurlaidību ultravioletajā un tuvajā infrasarkanajā gaismas diapazonā, izturību pret radiāciju un samazina gaismas laušanas koeficientu. SiO₂ daļiņas, kas sintezētas ar sārnu metālu piemaisījumiem, veicina kristalizāciju centru rašanos un samazina temperatūru, kas nepieciešama SiO₂ nanodaļiņu pārkausēšanai stiklā.

Iegūto SiO₂ paraugu optiskās īpašības tika raksturotas, izmantojot Ramans spektroskopijas, FTIR spektroskopijas un fotoluminiscences metodes.

OPTICAL PROPERTIES OF SiO₂ ACTIVATED WITH FLUORINE AND ALLOYED ALKALI METALS

Krišjānis Roze, Madara Leimane, Karīna Taranda, Ivita Bite, Katrīna Laganovska,
Krišjānis Šmits, Linards Skuja.
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Silicon dioxide (SiO₂) is found in natural conditions, most often in the form of sand and other minerals, but it is also actively synthesized in laboratories. There are differences in the artificially produced and natural SiO₂, as it is possible to eliminate its natural imperfections by synthesizing SiO₂.

The use of SiO₂ in sectors such as optics, electronics, nanotechnologies, medicine, biochemistry, food chemistry demonstrates its extensive application. For example, the synthesis of SiO₂ with fluorine or alkali impurities at different concentrations changes the physical, chemical and optical properties of the substance.

In the Institute of solid state physics laboratory of solid-state radiation physics are active synthesize SiO₂ nanocrystals. At this work SiO₂ nanoparticles contain hydroxyl groups (-OH), which, when substituted with fluorine, increases lights permeability in UV and close IR range, resistance to radiation and decreases light refractive index. SiO₂ particles which sintesyzed with alkali metals promotes crystallization center emergence and decrease alloying temperature.

Optical properties of SiO₂ were identified with Raman spectroscopy, FTIR spectroscopy and photoluminescence.

ILGSTOŠA PĒCSPĪDĒŠANA ĪSVIĻŅU INFRASARKANAJĀ SPEKTRA APGABALĀ AR ITERBIJA JONIEM AKTIVĒTĀ MgGeO_3 MATERIĀLĀ

Guna Doke, Guna Kriķe, Māris Sprinģis, Anatolijs Šarakovskis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Materiāli, kuros novērojama ilgstoša pēcspīdēšana jau gadu desmitiem ir izraisījuši plašu interesi zinātnieku un industriju pārstāvju vidū. Šobrīd ir plaši pieejama informācija par ilgspīdošiem materiāliem, kuru emisija novērojama redzamajā un tuvajā infrasarkanajā spektra apgabalā, savukārt publikācijas par materiāliem, kuros ilgstoša pēcspīdēšana ir novērojama tā saucamajā īsviļņu infrasarkanajā spektra apgabalā (900 nm – 1700 nm), par spīti augstajam pielietojumu potenciālam, ir ļoti nelielā skaitā.

Darba gaitā, LU CFI Spektroskopijas laboratorijā, izmantojot cietfāzu sintēzi, ir iegūts ar iterbija joniem aktivēts MgGeO_3 materiāls ar iterbija koncentrāciju 0,1 mol%.

Paraugam ir veikta struktūras izpēte, izmantojot rentgendifrakcijas analīzi un tādi optiskās spektroskopijas mērījumi kā ierosmes un emisijas spektru iegūšana, termiski stimulētās luminiscences mērījumi, luminiscences kinētiku mērījumi.

Apkopojot rezultātus tiks izdarīti secinājumi par ilgstošās pēcspīdēšanas procesiem ar iterbija joniem aktivētā MgGeO_3 materiālā.

SHORT-WAVE INFRARED LONG PERSISTENT LUMINESCENCE OF YTTERBIUM DOPED MgGeO_3 MATERIAL

Guna Doke, Guna Kriķe, Maris Springis, Anatolijs Sarakovskis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Materials with long persistent luminescence have caused widespread interest among scientists and industry for decades. Right now there is widely available information on long persistent luminescence materials with emission within visible and near infrared spectral range, however publications on materials with long persistent luminescence within so-called short-wave infra-red spectral range (900 nm – 1700 nm) despite the high potential in applications are in very small numbers.

In the course of this work MgGeO_3 material doped with ytterbium ions were produced in UL ISSP Laboratory of Spectroscopy using solid-state reaction synthesis with ytterbium concentration of 0,1 mol%.

The sample has undergone a structure study using X-ray diffraction analysis and optical spectroscopy measurements like excitation and emission spectra, thermally stimulated luminescence measurements, luminescence kinetics measurements.

Based on the obtained experimental results conclusions about the long persistent luminescence processes of ytterbium doped MgGeO_3 material will be drawn.

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZS/2018/6 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.

NEAKTIVĒTU UN F-AKTIVĒTU SILĪCIJA DIOKSĪDA NANODAĻIŅU SINTĒZE

Karīna Taranda, Ivita Bite, Krišjānis Roze, Linards Skuja
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Silīcija dioksīda materiāliem ir plašs pielietojums elektronikā, medicīnā, kosmosa izpētē u.c. SiO₂ nanodaļiņas satur hidroksilgrupas (-OH), kuru aizvietošana ar fluoru dažādās koncentrācijās rada iespējas palielināt materiāla gaismas caurlaidību, caurspīdīgumu, izturību pret radiāciju un samazināt gaismas laušanas koeficientu. Ar fluoru aktivētas SiO₂ nanodaļiņas var izmantot optiski izturīgu materiālu izveidei, optisko šķiedru vadus, lāzerus u.c.

Darba laikā tika sintezēti neaktivēti un F-aktivēti SiO₂ nanodaļiņu paraugi, kuru reakcijas maisījumam tika pievienots HF ar dažādām koncentrācijām: 1.0 mol%, 5.0 mol%, 10.0 mol%, 15.0 mol% un 20.0 mol%. Lai iegūtu mazas nanodaļiņas, SiO₂ nanodaļiņu paraugi tika sintezēti izmantojot sola-gēla metodi.

Iegūto SiO₂ nanodaļiņu paraugu optisko īpašību raksturošanai tika izmantotas spektroskopiskās analīžu metodes - luminiscence, Ramana spektroskopija. Savukārt, SiO₂ nanodaļiņu sastāva, struktūru un morfoloģisko īpašību raksturošanai tika izmantotas rentgenstaru difraktometrija, elektronu mikroskopija un enerģijas dispersīvā rentgenfluorescence.

SYNTHESIS OF INACTIVATED AND F-ACTIVATED SILICON DIOXIDE NANOPARTICLES

Karina Taranda, Ivita Bite, Krisjanis Roze, Linards Skuja
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

SiO₂ materials have a wide range of applications in electronics, medicine, space research, etc. SiO₂ nanoparticles contain hydroxyl groups (-OH), which, when substituted with fluorine in different concentrations, have the potential to increase the light transmittance, material transparency, radiation resistance, and to decrease the light refractive index. The SiO₂ nanoparticles activated by fluorine can be used to create optically durable materials, optical fiber waveguides, lasers, etc.

During the work, inactivated and F-activated SiO₂ nanoparticle samples were synthesized with starting materials containing HF in concentrations: 1.0 mol%, 5.0 mol%, 10.0 mol%, 15.0 mol% and 20.0 mol%. To obtain tiny nanoparticles, the samples of SiO₂ nanoparticles were synthesized using the sol-gel method.

Spectroscopic methods of analysis - luminescence, Raman spectroscopy - were used to characterize the optical properties of the obtained SiO₂ nanoparticle samples. X-ray diffractometry, electron microscopy and energy-dispersive X-ray fluorescence were used to characterize the elemental content, structure and morphological properties of SiO₂ nanoparticles.

This work was supported by the project No. Izp-2018/1-0289 "Optical properties of advanced silicon dioxide-based materials for ultraviolet and high-power photonics".

INDIJA KONCENTRĀCIJAS IETEKME UZ AKTIVĒTO ZnO NANOSTRUKTŪRU UN MORFOLOĢISKAJĀM ĪPAŠĪBĀM

Juliāna Kepente, Ivita Bite, Larisa Grigorjeva, Agnese Spustaka, Krišjānis Šmits
Latvijas Universitātes Cietvielu Fizikas Institūts

Materiālus uz ZnO bāzes mūsdienās plaši izmanto optoelektroniskiem pārveidotājiem, scintilātoriem un bioloģiskajiem sensoriem. Cinka oksīdu aktivē lai palielinātu tā lādiņu nesēju koncentrāciju. Biežāk izmantotie aktivātori ir III grupas elementi (Al, Ga un In), no kuriem šī darba ietvaros tika aplūkots indijs. Izvēlētais aktivātors no teorētiskās puses ir labāk piemērots ZnO daļiņu mazu izmēru veidošanai.¹ Darba gaitā ar hidrotermālo metodi tika sintezēti ar indiju aktivēti ZnO nanokristālu paraugi koncentrācijās no 0,5 - 5 at. %.

Iegūto paraugu fizikālo un morfoloģisko īpašību noteikšanai tika izvēlētas vairākas metodes: pulvera rentgendifraktometrija (XRD), skenēšā elektronu mikroskopija (SEM), enerģijas dispersijā rentgenspektroskopija (EDX), Furjē-infrasarkanā spektroskopija (FTIR), Ramana spektroskopija (RAMAN) un fotoluminiscence (PL).

INFLUENCE OF INDIUM CONCENTRATION ON DOPED ZnO NANOSTRUCTURE AND MORPHOLOGICAL PROPERTIES

Juliana Kepente, Ivita Bite, Larisa Grigorjeva, Agnese Spustaka, Krisjanis Smits
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Zinc oxide (ZnO) is widely used in different applications – optoelectronic adapters, scintillators and biological sensors. To increase the carrier charge concentration, ZnO is activated. With the III group elements (Al, Ga, In) are usually used as typical activators. In the following research as an activator was chosen indium. Indium is better suited from the theoretical point of view to maintain smaller particles of ZnO.¹ The present research, activated ZnO was synthesized using with hydrothermal method indium from 0,5 at% to 5 at% and non-doped ZnO.

To detect physical and morphological properties several methods were chosen – X-ray powder diffraction (XRD), scanning electron microscope (SEX), energy dispersive X-ray spectroscopy (EDX), Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), Raman spectroscopy (RAMAN), photoluminiscence (PL).

The financial support of research grants ERA.NET RUS_ST20170-051.

¹ Тихомирова Е.Л., Савельева Ю.А., Громов О.Г., Синтез нанопорошков оксида цинка, легированного галлием, индием, алюминием

ANODIZĀCIJAS PROCESĀ IEGŪTA LUMINISCENTA PĀRKLĀJUMA HOMOGENITĀTES UN LUMINISCENCES IZPĒTE

Agnese Spustaka, Virgīnija Vītola, Ivita Bite, Krišjānis Auziņš
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

$\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Eu,Dy}$ un citi ar eiropiju aktivēti alumināti ir ļoti efektīvi luminofori, kam raksturīga ilga pēcspīdēšana (fosforescence) redzamajā spektrā, istabas temperatūrā. Šiem materiāliem ir plašas pielietojumu iespējas – energoefektīvos apgaismojums un norādēs, pulksteņu ciparnīcās, luminiscentās krāsās, u.c.

Darbā apskatīta fosforescējoša $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Eu,Dy}$ pārklājumu iegūšana izmantojot plazmas elektrolītiskās oksidācijas (PEO) metodi. Tā kā PEO procesa izmantošana stroncija alumināta pārklājuma ieguvei tiek izmantota ļoti nesen, tad ir vēl jāveic sistemātiski sintēzes parametru pētījumi pārklājuma ilgās pēcspīdēšanas efektivitātes palielināšanai. Praktiskiem pielietojumiem PEO procesā iegūtu pārklājumu pēcspīdēšanai jābūt līdzvērtīgai stroncija aluminātu pulveru pēcspīdēšanai ilguma un intensitātes ziņā. Tādēļ veikti pētījumi, elektrolītā esošo jonu iebūvēšanās efektivitātes noteikšanā. Iegūtajiem paraugiem apskatīta pārklājuma homogenitāte un luminiscentās īpašības dažādos tā slāņos, dodot ieskatu par stroncija, eiropija un disprozija iebūvēšanās procesiem PEO pārklājumā. Novērtēta arī dažādas pārklājuma pēcapstrādes metožu ietekme uz pārklājuma luminiscentajām īpašībām. Pārklājumu slāņu izpēte veikta ar spektroskopijas un elektronu mikroskopijas metodēm.

RESEARCH OF LUMINESCENCE AND HOMOGENEITY OF PHOSPHORESCENT COATING OBTAINED BY ANODIZATION PROCESS

Agnese Spustaka, Virgīnija Vītola, Ivita Bite, Krišjānis Auziņš
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

$\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Eu,Dy}$, as well as other aluminates doped with europium, are very efficient luminophores characterized by long afterglow (phosphorescence) in the visible spectrum, room temperature. These materials have a wide range of possible applications – in energy efficient lighting, watch dials, luminous paints, etc.

This study is based on obtaining phosphorescent $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Eu,Dy}$ coating by plasma electrolytic oxidation (PEO) method. As obtaining a strontium aluminate coating by PEO is a new method, it is necessary to make systematic measurements of parameters to improve the efficiency of long afterglow. The practical applications of the afterglow of coatings obtained using the PEO method need to be equivalent to the luminescence of powders of strontium aluminates in terms of duration and intensity. Therefore, research is being done to determine the incorporating efficiency of electrolyte ions. The homogeneity and luminescence in different layers of the coating is evaluated in the obtained samples to get information about strontium, europium and dysprosium incorporation process in the PEO coating. Furthermore, the effect of various post-processing methods of the coating on its luminescent properties has been determined. The research on the layers of coatings is done using spectroscopy and electron microscopy methods.

AR RETZEMJU ELEMENTIEM AKTIVĒTU LUMINISCĒJOŠU MAGNIJA OKSĪDU PĀRKLĀJUMU IEGŪŠANA IZMANTOJOT PLAZMAS ELEKTROLĪTISKĀS OKSIDĀCIJAS METODI

Krišjānis Auziņš¹, Krišjānis Šmits¹, Aleksejs Zolotarjovs¹, Ivita Bite¹, Carsten Blawert²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Helmholtz – Zentrum Geesthacht, Centre for Materials and Coastal Research*

Magnija sakausējumi ir vieni no plašāk izmantotajiem materiāliem autobūves, aviācijas un citās inženiertehniskajās nozarēs pateicoties to labajām mehāniskajām īpašībām un salīdzinoši mazajam svaram. Normālos apstākļos uz magnija virsmas izveidojas plāns oksīda slānis, kurš nav ķīmiski stabils un ir pakļauts pastiprinātai korozijai. Viens no problēmas risinājumiem ir plazmas elektrolītiskā oksidācija (PEO), kura ļauj izveidot biezu oksīda aizsargslāni uz materiāla virsmas. Pateicoties PEO procesa īpatnībām, pārklājumu ir iespējams iegūt ar dažādām vielām. Retzemju elementu aktivatoru jonu iekļaušana magnija aluminātu vai silikātu matricās var tikt izmantota luminiscences īpašību uzlabošanai.

Šajā pētījumā tika veikta magnija pārklājumu sintēze izmantojot PEO metodi. Galvenais mērķis bija iegūt ar retzemju elementiem (Eu, Dy, Nd, Tm) leģētus magnija aluminātu ($MgAl_2O_4$) un silikātu ($MgSiO_3$, $MgAl_2Si_2O_8$) pārklājumus uz magnija substrāta un izpētīt to luminiscences īpašības. Lai pārlicinātos par iegūto savienojumu struktūru un sastāvu, tika veikti XRF un XRD mērījumi, kas parādīja, ka ir iegūta sagaidāmā $MgAl_2O_4$ fāze, un fotoluminiscences mērījumi, kuri apstiprināja Eu jona klātbūtni.

PREPARATION OF LUMINESCENT RARE EARTH DOPED MAGNESIUM OXIDE COATINGS USING PLASMA ELECTROLYTIC OXIDATION METHOD

Krisjanis Auzins¹, Krisjanis Smits¹, Aleksejs Zolotarjovs¹, Ivita Bite¹, Carsten Blawert²

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Helmholtz – Zentrum Geesthacht, Centre for Materials and Coastal Research*

Magnesium alloys are one of the most widely used materials in automotive, aerospace and other engineering fields due to their great mechanical characteristics and light weight. In normal conditions a thin chemically unstable oxide layer is formed on the surface of magnesium which is prone to excessive corrosion. One of the solutions for this problem is plasma electrolytic oxidation (PEO) treatment which allows to produce a thick protective oxide layer on the surface of material. Thanks to the characteristics of PEO process, coatings can be doped with different elements. The incorporation of rare earth dopant ions in magnesium aluminate or silicate matrixes can be used to enhance luminescent properties of the coatings.

In this research the synthesis of magnesium coatings using PEO method was performed. The aim was to produce rare earth (Eu, Dy, Nd, Tm) doped magnesium aluminate ($MgAl_2O_4$) and silicate ($MgSiO_3$, $MgAl_2Si_2O_8$) coatings and examine their luminescent properties. XRF and XRD measurements were carried out to examine the structure and composition of the acquired coatings. The results showed that $MgAl_2O_4$ phase was indeed achieved. Measurements of photoluminescence were also carried out and proved that Eu was incorporated into the coatings.

SĀRMMETĀLU PIEMAIŠĪJUMU IETEKME UZ STIKLVEIDA SILĪCIJA DIOKSĪDA OPTISKAJĀM ĪPAŠĪBĀM

Madara Leimane, Linards Skuja, Ivita Bite, Krišjānis Roze
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Silīcija dioksīds (SiO_2) ir viens no nozīmīgākajiem materiāliem optikā, nanotehnoloģijās, mikroelektronikā. Stiklveida SiO_2 ir pamata materiāls lieljaudas lāzeroptikā un optiskajiem elementiem darbam radiācijas vidē. Tā optiskā īpašības pasliktina punktdifektu veidošanās. Īpaši nozīmīgs ir t.s. netiltna skābeklis (skābekļa norautā saite), kas ir galvenais inducētās absorbcijas cēlonis redzamajā un ultravioletajā spektra daļās. Literatūrā to apzīmē ar NBOHC (non-bridging oxygen hole center).

NBOHC var veidoties pašvielas procesos, saraujot Si-O saites, vai arī no priekšteču defektiem, sagraujot silanolgrupas (Si-O-H). Šie procesi ir daudz pētīti. Maz pētīts ir cits alternatīvs process – iespējama NBOHC veidošanās, saraujot Si-O-M saiti, kur M – sārmmetālu jons (Li, Na, K). Šī darba mērķis ir iegūt SiO_2 stiklus, leģētus ar nelielām sārmmetālu koncentrācijām un izpētīti to ietekmi uz NBOHC veidošanos.

Sintezēt ar sārmmetālu piemaisījumiem viegli leģētu SiO_2 stiklu ir sarežģīti to augstās iztvaikošanas dēļ pie SiO_2 stiklu parastās kausēšanas temperatūras (≈ 1800 °C). Taču izmantojot amorfu SiO_2 nanodaļiņas kā izejmateriālu, ir iespējams izveidot stiklu, tās sacepinot pie daudz zemākas temperatūras (1200 °C).

Darbā tika sintetētas tīras un ar dažādām sārmmetālu koncentrācijām (0.1 – 1.0 mol%) leģētas SiO_2 nanodaļiņas pēc sola-gēla metodes. Elementu sastāvs tika pētīts ar rentgenfluorescences mikroanalīzi, struktūru un morfoloģisko īpašību noteikšanai izmantoja XRD, SEM, un Ramana izkliedi. Optisko īpašību raksturošanai un NBOHC ģenerācijas procesu analīzei lietotas luminiscences metodes. Sākotnējie rezultāti uzrāda to, ka piemērotākā metode silīcija dioksīda nanodaļiņu ieguvē ir sintēze bāziskā vidē, izmantojot reaģentu 5% CTAB.

INFLUENCE OF ALKALI METALS ON THE OPTICAL PROPERTIES OF GLASSY SILICON DIOXIDE

Madara Leimane, Linards Skuja, Ivita Bite, Krisjanis Roze
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Silicon dioxide (SiO_2) is one of the most important materials in the optics, nanotechnologies, and microelectronics. Glassy SiO_2 is the basic material for high-power laser optics and for optics used in radiation environment. Its optical properties are degraded by the generation of point defects. Of particular importance is the oxygen dangling bond, the so called non-bridging oxygen hole center (NBOHC), which is the main absorbing species in the visible and near UV range.

NBOHCs are created in intrinsic processes or from precursors, by destruction of a bound silanol (Si-O-H) group. An alternative process, destruction of Si-O-M (M=Li, Na, K) group is much less studied. The aim of this study is to obtain SiO_2 glass, slightly doped by alkali ions and to study their role as precursors of NBOHC.

Obtaining of alkali doped SiO_2 glass is complicated due to the high volatility of alkali at the glass melting temperature (~ 1800 °C). However, the temperature can be lowered to 1200 °C, when the glass is obtained by the sintering of SiO_2 nanoparticles.

Nominally pure and 0.1 – 1.0 mol% alkali-doped SiO_2 nanoparticles were synthesized by sol-gel technique. The elemental content was determined by XRF microanalysis, the structure and morphology was studied by XRD, SEM and Raman scattering. The generation of NBOHC was monitored by luminescence spectroscopy. Preliminary data show that the most appropriate method to obtain SiO_2 nanoparticles is synthesis in basic conditions with reagent 5% CTAB.

This work was supported by the project No. lzp-2018/1-0289 "Optical properties of advanced silicon dioxide-based materials for ultraviolet and high-power photonics".

NEAKTIVĒTĀ UN Al-AKTIVĒTĀ ZnO NANODAĻIŅU SINTĒZE UN TO ĪPAŠĪBU IZPĒTE

Mareks Senko¹, Ivita Bite¹, Anzelms Zukuls², Agnese Spustaka¹, Larisa Grigorjeva¹,
Krišjānis Šmits¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu Fizikas Institūts*

²*Rīgas Tehniskā Universitāte*

Cinka oksīds (ZnO) ir materiāls, kas piesaista lielu interesi ar plašajām un potenciālajām pielietojuma iespējām vairāku industriju nozarēs. Augsta ķīmiskā un fizikāla izturība, zema vadītspēja, optiskās īpašības, salīdzinošs netoksiskums, intensīva un ātra luminescence padara ZnO par interesantu pētīšanas materiālu. ZnO pielietojumā lielu lomu spēlē aktivātori, savukārt, īpašības var ietekmēt izvēlēta sintēzes metode. Kā viens no aktivātoriem tiek izmantots alumīnijs (Al), kas, balstoties uz literatūras avotiem - iebūvējas ZnO kristālrežģī. Šāds materiāls tiek uzskatīts par alternatīvu caurspīdīgo un vadītspējīgo oksīdu izmantošanā saules baterijās un LED ierīcēs.

Darba mērķos ietilpst, neaktivētā un Al-aktivētā (2 un 4 mol%) ZnO nanodaļiņu sintēze, izmantojot hidrotermālo un sola-gela sintēžu metodes, kā arī salīdzināt iegūtos rezultātus un novērtēt sintēžu metodes ietekmi uz ZnO nanodaļiņu īpašībām.

Lai noteiktu un raksturotu paraugu īpašības, tika izmantotas vairākas metodes: pulvera rentgendifraktometrija (XRD), skenējošais elektronu mikroskops (SEM), rentgenstaru fluorescences spektrometrija (EDX), fotoluminescence (PL), infrasarkanā furjē spektroskopija (FTIR) un Ramana spektroskopija (RAMAN).

NON-DOPED AND Al-DOPED ZnO NANOPARTICLES SYNTHESIS AND PROPERTIES

Mareks Senko¹, Ivita Bite¹, Anzelms Zukuls², Agnese Spustaka¹, Larisa Grigorjeva¹, Krišjānis Šmits¹

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Riga Technical University*

Zinc Oxide (ZnO) is a material that attracts a great deal of interest with a wide range of potential applications in multiple industries. High chemical and physical stability, low conductivity, optical properties, comparative non-toxicity, intense and rapid luminescence make ZnO an interesting research material. Activators play a large role in applications of ZnO. The properties can be influenced by the chosen synthesis method also Aluminum (Al) is used as one of the activators, which, based on scientific literature, incorporates itself in the crystal lattice of ZnO, which is considered as an alternative to the use of transparent and conductive oxides (TCO) in solar cells and LED devices.

The objectives of the thesis include the synthesis of non-doped and Al-doped (2 and 4 mol%) ZnO using hydrothermal and sol-gel synthesis methods. Compare the results obtained and evaluate the impact of the synthesis method on the properties of ZnO nanoparticles.

Several methods were used to determine and characterize the properties of samples: X-ray diffractometry (XRD), scanning electron microscopy (SEM), energy dispersive x-ray spectroscopy (EDX), photoluminescence (PL), fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) and Raman spectroscopy (RAMAN).

The financial support of research grants ERA.NET RUS_ST20170-051

ZnO:Ga, ZnO:In KERAMIKAS SAGRAUŠANAS VEIDA UN MEHĀNISKO ĪPAŠĪBU IZPĒTE AR NANOINDENTĒŠANAS METODI

Faina Muktepāvela¹, Roberts Zabels¹, Rolands Grants¹, Elena Gorokhova², Kārlis Kundziņš¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Zinātniskās ražošanas asociācija S.I.Vavilova Valsts optiskais institūts, Krievija*

ZnO keramikas pētījumu izstrāde parādīja, ka dopēšana ar Ga un In uzlabo ZnO scintilācijas īpašības [1]. Vienlīdzs varīga loma šo keramiko tehniskā izmantošanā ir mehānisko īpašību kopumam, to skaitā cietībai (H, GPa), elastības modulim (E, GPa) kā arī plaisu veidošanas pretestībai.

Šajā darbā ar nanoindentēšanas (NI), SEM un AFM metodēm tika pētītas ZnO:0,1 % Ga un ZnO:0,1 % In %, keramikas, iegūtas, karstās presēšanas laikā vakuumā pie 1100°C. Rezultātu salīdzinošā analīze parādīja, ka ZnO:In keramikai raksturīgs ir transkristālais lūzums, fasetētās graudu robežas (GBs), H = 3,8-4,0 GPa graudu iekšpusē, kā arī In un Zn klātbūtne GBs, kas novērota SEM+EDS datos. Savukārt, ZnO:Ga keramika demonstrēja starpgraudainu trauslo lūzuma veidu, H = 2,8 GPa, E = 170 GPa un zemu pretestību plaisāšanai NI procesā. Plastiskās deformācijas darba aprēķini no NI sloģošanas datiem norāda, ka ZnO:In keramikai ir lielāka spēja mehānisko spriegumu relaksācijai. Rezultāti tiek apspriesti saistībā ar atšķirībām In³⁺ un Ga³⁺ mijiedarbībā ar ZnO režģi.

NANOINDENTATION STUDY OF ZnO:Ga, ZnO:In CERAMICS MECHANICAL PROPERTIES AND FRACTURE MODE

Faina Muktepāvela¹, Roberts Zabels¹, Elena Gorokhova², Karlis Kundzins¹, Rolands Grants¹

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Scientific and Production Association S.I.Vavilov State Optical Institute, Russia*

The development of ZnO ceramics investigations has shown that doping with Ga and In enhances the scintillation properties of ZnO [1]. For perspective technical use of these doped ceramics no less important role is played by the mechanical properties, including the hardness (H, GPa) and modulus of elasticity (E, GPa).

In this research, the ZnO: 0.1 wt.%, In and ZnO: 0.1 wt.% Ga doped ceramics, obtained by hot pressing in vacuum at 1100 °C have been investigated by nanoindentation (NI), SEM and AFM methods. Comparative analysis of the results showed that ZnO:In ceramics is characterized by faceted grain boundaries (GBs), transcrystalline fracture mode, H= 3,8-4,0 GPa inside grains and with the presence of In and Zn excess at the GBs, that is shown by the SEM +EDS data. On the contrary, ZnO:Ga ceramics showed intergranular brittle fracture mode, H= 2,8 GPa, E= 170 GPa and low crack resistance (toughness) by NI. Calculations of the work of plastic deformation during NI give evidence, that ZnO:In has a greater stress relaxation potential than ZnO:Ga ceramics. The results are discussed in terms of the differences in the interaction of In³⁺ and Ga³⁺ with the ZnO lattice.

This work has been supported by the Project ERANET RUS_ST#2017-051(Latvia) and #18-52-76002 (Russia)

ABERĀCIJU MĒRĪŠANA, IZMANTOJOT ŠAKA-HARTMANA ABEROMETRIJU UN PHASELIFT METODI

Varis Karitāns^{1,2}, Edgars Nitišs¹, Māris Ozoliņš^{1,2}, Sergejs Fomins^{1,2}

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*LU Fizikas un Matemātikas, un Optometrijas fakultāte*

Populārākā optisko aberāciju mērīšanas metode līdz šim bijusi Šaka-Hartmana aberometrija. Šaka-Hartmana aberometros tiek izmantota mikrolēcu matrica, kas viļņu fronti sadala vairākos apgabalos. Izmērot fokālo punktu nobīdes, iespējams aprēķināt viļņu frontes formu. Pēdējā laikā populāras kļuvušas metodes, kas, izmantojot gaismas intensitātes mērījumus un skaitliskus algoritmus, aprēķina objekta fāzi. Jauna metode fāzes aprēķināšanai ir tā saucamā PhaseLift metode, kas objekta fāzi aprēķina, izmantojot nelielu skaitu masku un zemā ranga Rīmaņa optimizācijas metodes. Šajā pētījumā salīdzināta Šaka-Hartmana aberometrija un PhaseLift metode, kurā izmantotas četras rotētas vienas maskas versijas.

Rezultāti parāda gan vizuālu abu viļņu fronšu līdzību, gan arī vidējās kvadrātiskās kļūdas (RMS) samazināšanos un Strēla attiecības pieaugumu, viļņu frontes atņemot vienu no otras. PhaseLift aprēķinātās viļņu frontes RMS ir 1.10 rad, bet ar Šaka-Hartmana aberometriju – 0.61 rad. Šīs RMS vērtības atbilst Strēla attiecībai attiecīgi 0.30 un 0.69. Viļņu fronšu starpības RMS ir 0.86 rad, bet Strēla attiecība 0.48.

MEASURING WAVEFRONT ABERRATIONS WITH A SHACK- HARTMANN ABERROMETER AND PHASELIFT

Varis Karitans^{1,2}, Edgars Nitiss¹, Maris Ozolins^{1,2}, Sergejs Fomins^{1,2}

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Faculty of Physics and Mathematics, and Optometry, University of Latvia*

Up to now the most popular method for measuring wavefront aberrations has been Shack-Hartmann aberrometry. In the Shack-Hartmann aberrometers a microlens array is used splitting the wavefront in several subregions. Measuring the deviations of the focal spots allows to calculate the shape of the wavefront. In the last years, methods recovering phase of an object from intensity measurements using numerical algorithms have become popular. A novel phase retrieval method is PhaseLift recovering phase from a few masks based on the low-rank Riemannian optimization methods. In this study, the Shack-Hartmann aberrometry is compared PhaseLift using four rotated versions of a single mask.

The results show both visual similarity between both wavefronts and decrease in the root-mean-square (RMS) and increase in the Strehl ratio as a result of subtraction of both wavefronts. The RMS value of the wavefront calculated with PhaseLift is 1.10 rad while that calculated with the Shack-Hartmann aberrometer – 0.61 rad. These RMS values correspond to the Strehl ratio 0.30 un 0.69, respectively. The RMS value of the difference between both wavefronts is 0.86 rad while the Strehl ratio is 0.48.

The authors are supported by the postdoctoral project #1.1.1.2/16/I/001 (project application #: 1.1.1.2/I/16/199).

ZNO AND ZNO:Ga KERAMIKU RADIOLUMINISCENCE

Larisa Grigorjeva¹, Aleksejs Zolotarjovs¹, Donats Millers¹, Piotr Rodnyi², Ivan Venevtsev²,
Elena Gorokhova³

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

³*Scientific and Production Association S.I. Vavilov State Optical Institute*

Polikristāliskie keramiskie materiāli ZnO un ZnO:Ga (0.1 wt.%) tiek pētīti ar mērķi iegūt keramikas ātrajiem scintilātoriem. Keramikas izgatavotas St.Peterburgā izmantojot vienass karstās presešanas metodi [1]. Keramikas atšķiras ar dažādiem izejas pulveriem, presēšanas temperatūru, presēšanas atmosferu. Paraugi uzrāda gaismas caurlaidību un optiskās īpašības, kas ir atkarīgas no izgatavošanas tehnoloģijas. Galvenā uzmanība tiek veltīta intensitātes un scincilāciju luminiscences joslas novietojumam izgatavotās keramikās. Novērotas luminiscences intensitātes un joslas novietojuma izmaiņas plašā intervālā (3.13-3.18 eV) atkarībā no keramiku iegūšanas tehnoloģijas. Labākais rezultāts iegūts ar Ga dopētā paraugam sacepinātā gaisā. Sacepināšana skābekļa atmosferā uzrāda ievērojami zemāku scintillācijas intensitāti.

RADIOLUMINESCENCE of ZnO and ZnO:Ga CERAMICS

Larisa Grigorjeva¹, Aleksejs Zolotarjovs¹, Donats Millers¹, Piotr Rodnyi², Ivan Venevtsev²,
Elena Gorokhova³

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

³*Scientific and Production Association S.I. Vavilov State Optical Institute*

ZnO polycrystalline ceramic materials were studied with goal to obtain the fast scintillators. The undoped and gallium doped (0.1 wt.%) ceramics were prepared by uniaxial hot pressing in air and oxygen atmosphere in St. Petersburg [1]. The ceramics differs by the starting powders, pressing temperature and atmosphere. The samples show the transparency and optical properties depending on ceramic sintering conditions. In the present investigation we focus on study of intensity and band position of near band luminescence most interesting from the point of view of scintillation process. There is a large variation in scintillation luminescence peak position (3.13-3.18 eV) and radioluminescence intensity. The best result was obtained for Ga doped ceramic sintered in air. The ceramics sintered in oxygen atmosphere shows significantly less intensity of scintillation peak.

I.K.Chernenko, et al., Structural, optical and luminescent properties of ZnO:Ga and ZnO:In ceramics. IEEE Transaction on Nuclear Science, TNS-00113-2018

The financial support of research grants ERA.NET RUS_ST20170-051. This work was partly supported by the Russian Foundation for Basic Research, project no. 18-52-76002

21. februāris

EUROfusion

CEĻA UZ TERMISKĀS KODOLSINTĒZES ELEKTROENERĢIJU

Andris Šternbergs

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

2018. gada beigās EUROfusion konsorcijs publicēja pārskatīto kodolsintēzes pētniecības plānu. Tā ir sākotnējā plāna attīstība, saglabājot būtiskās astoņas Misijas. Plāns koncentrējas uz galvenajām ierīcēm - ITER, DEMO un DONES. Taču, atjauninot ceļu uz kodolsintēzes enerģiju, tiek uzsvērts DEMO un ITER projektu relatīvais izpildes laiks, lai panāktu kodolsintēzes elektroenerģijas demonstrēšanu pēc iespējas ātrāk. Enerģiju no fosilā kurināmā jāaizstāj ar CO₂ brīvu enerģiju. Pastāv milzīgi pasaules mēroga centieni galveno atjaunojamās enerģijas avotu, piemēram, vēja un saules enerģijas attīstībā, apvienojot enerģijas iegūšanu ar tās uzglabāšanu ezeros, baterijās un ķīmiskajās šūnās. Kodolsintēze līdz 2050. gadam tiešā veidā neveicinās CO₂ izslēgšanu, bet, ņemot vērā kodolsintēzes būtiskākās priekšrocības (drošība, bagātīga degvielas pieejamības), tai ir potenciāls, lai nodrošinātu svarīgu pasaules enerģijas vajadzību daļu ap gadsimta beigām. Latvijas EUROfusion pētniecības apvienībai ir dziļas zināšanas materiālu un plazmas pieskarošu elementu jomā. ISSP UL pētnieki ir iesaistīti: (i) teorētiskajā modelēšanā, kā, piemēram, ODS tēraudu eksperimentālajā raksturojumā in iegūšanas receptes izstrādē, izmantojot rentgenstaru absorbcijas spektroskopiju (XAS); (ii) radiācijas efekta modelēšana funkcionālos materiālos; (iii) optisko un dielektrisko materiālu radiācijas defektu evolūcijas eksperimentālā un teorētiskā analīzē.

THE ROAD TO FUSION ELECTRICITY

Andris Sternberg,

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

At the end of 2018, EUROfusion has published its revised Fusion Research Roadmap. It is an evolution of the first roadmap preserving the unshakeable elements such as the eight missions. It focuses on the main devices ITER, DEMO and DONES. But in updating the path to fusion energy, the relative timing of the DEMO and ITER projects to achieve the demonstration of fusion electricity as fast as possible is emphasised. Energy from fossil fuels must be replaced by CO₂ free energy. There is tremendous and worldwide effort in the development of renewables as wind and solar, in combination with storage in lakes, batteries and chemical fuels. Fusion will not contribute to the CO₂ transition by 2050, but given its inherent advantages (safe, low physical footprint, abundant availability of fuel) it has potential to deliver an important part of the world's energy need around the turn off the century. Latvian EUROfusion Research Unit has a deep expertise in the field of materials and in plasma facing components. Researchers of ISSP UL are involved: (i) in theoretical modelling as well as experimental characterization of ODS steels and using x-ray absorption spectroscopy (XAS); (ii) in multiscale modelling of radiation effects in functional materials and oxide materials; (iii) in advanced experimental and theoretical analysis of defect evolution and structural disordering in optical and dielectric materials for fusion applications.

Y, Ti, O un V_{Fe} MIJIEDARBĪBAS APRĒĶINI NO PIRMAJĪEM PRINCIPIEM *fcc*-Fe REŽĢĪ, LAI IZSKAIDROTU ODS DAĻIŅU VEIDOŠANOS

Aleksejs Gopejenko¹, Jurijs Žukovskis¹, Yuri A Mastrokov¹, Sergei Piskunov¹, Pavel V. Vladimirov², Eugene A Kotomin¹ un Anton Möslang²

¹Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

²Karlsruhe Institut für Technologie, Institut für Angewandte Materialien,

Oksīdu stiprināti tēraudu materiāli ar samazināto aktivācijas spēju ir uzskatāmi par daudzsoļošiem strukturāliem materiāliem nākotnes termiskās sintēzes reaktoriem. ODS tēraudu pielietošana ļauj paaugstināt nākotnes kodolsintēzes reaktoru darbības temperatūru par 100°C līdz 650°C, kas palielina reaktoru efektivitāti. Kā viens no stabilākajiem oksīdiem, kuru kušanas temperatūra ir augstāka par tēraudu kušanas temperatūru, Y_2O_3 ir visbiežāk izmantotais materiāls samazinātas aktivitātes ferīta-martensīta tēraudu stiprināšanai.

ODS tēraudu eksperimentālie un teorētiskie pētījumi ir plaši veikti, lai izskaidrotu ODS daļiņu veidošanās principus, kas vēl nav pilnībā izprasti.

YT_2O_5 un $Y_2Ti_2O_7$ pielietošana ODS tēraudu ražošanā rada ievērojamu nodaļiņu izmēra samazināšanu, kā arī ietekmē ODS daļiņu sadalījuma viendabīgumu tērauda matricā.

Y, Ti, O un vakancu mijiedarbības aprēķini ir veikti izmantojot plakānu viļņu blīvuma funkcionālu teorijas (DFT) metodi, kuri ir pielietoti VASP datora kodā. Saites enerģijas ir novērtētas visām aprēķinātajām konfigurācijām. Starp defektiem, kad O atoms ir novietots O oktaedriskās pozīcijās, nav konstatētas saites enerģijas, bet saites enerģijas ir novērtētas visām konfigurācijām, kad O piemaisījums atrodas V_{Fe} vakances pozīcijā.

THE FIRST PRINCIPLE CALCULATIONS OF THE Y, Ti, O, AND V_{Fe} INTERACTIONS INSIDE THE *fcc*-FE LATTICE IN SUPPORT OF ODS PARTICLE FORMATION

Aleksejs Gopejenko¹, Yuri F Zhukovskii¹, Yuri A Mastrokov¹, Sergei Piskunov¹, Pavel V. Vladimirov², Eugene A Kotomin¹, and Anton Möslang²

¹Institute of Solid State Physics, University of Latvia

²Karlsruhe Institut für Technologie, Institut für Angewandte Materiale,

Oxide dispersed strengthened steels are considered as promising structural materials for future thermal synthesis reactors. Implementation of the ODS steels allows increasing the operating temperature of the future fusion and advanced fission reactions by 100°C up to 650°C, which improves reactor efficiency. As one of the most stable oxides with the melting temperature higher than the melting temperature of the steels Y_2O_3 is the most commonly used material for the strengthening of the reduced activation ferritic-martensitic steels.

Both experimental and theoretical studies of the ODS steels are extensively performed in order to explain the formation principles of the ODS particles, which are not fully understood yet.

YT_2O_5 and $Y_2Ti_2O_7$ implementation in the manufacturing of the ODS steels results in the significant reduction of the size of the nanoparticles as well as it affects the homogeneity of the ODS particle distribution in the steel matrix.

The calculations of Y, Ti, O, and vacancies interactions have been performed using the plane wave density functional theory implemented in the VASP computer code. The binding energies have been assessed for all the calculated configurations. No binding energies have been found between the defects when O atom has been positioned in octahedral interstitial site, while the binding energies have been assessed for all configurations when O impurity has been located in V_{Fe} vacancy position.

AR JONIEM APSTAROTO TĒRAUDU ANALĪZE AR MAZĀ LEŅĶA RENTGENABSORBCIJAS SPEKTROSKOPIJU

Arturs Cintiņš, Andris Anspoks, Aleksejs Kuzmins, Juris Purāns
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Kodolsintēzes un tradicionālo kodoldalīšanās reaktoru ekspluatācijas laikā tērauds kristāla struktūra tik bojāta ar augstas enerģijas neitronu starojumu. Šajā darbā pētījumi tika veikti ar virsmas jutīgu metodi – mazā leņķa rentgenabsorbcijas spektroskopiju (glancing incidence X-ray absorption spectroscopy - GIXAS) pārbaudot tērauda struktūras evolūciju dzelzs un hroma K-absorbcijas malai. Fe un Cr K-malas rentgenabsorbcijas spektru piemalas sīkstruktūras un rentgenabsorbcijas spektra sīkstruktūru datus, veicām lokālas struktūras analīzi un koordinācijas sfēras rekonstrukciju ar ideju noteikt radiācijas defektu sadalījumu no dziļuma.

A GLANCING INCIDENCE X-RAY ABSORPTION SPECTROSCOPY STUDY OF THE IRRADIATION EFFECT IN STEELS

Arturs Cintins, Andris Anspoks, A. Kuzmin, J. Purans
The Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Under fusion and fission reactor operating conditions, the steel crystal structure is damaged by high energy neutron radiation. In this study, we performed surface sensitive glancing incidence X-ray absorption spectroscopy (GIXAS) method to understand the local structure evolution of the steel using the Fe K-edge and Cr K-edge absorption edge. The use of GI technique allowed us to understand radiation damage defects as a function of sample depth.

The analysis of the Fe and Cr K-edge X-ray absorption near edge structure (XANES) and extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) spectra allowed us to obtain information on the local structure parameters and to reconstruct radial distribution functions with the idea to detect distribution of radiation defects.

KODOLSINTĒZES IEKĀRTAS “APVIENOTAIS EIROPAS TORS” BERILIJA LIMITEROS UZKRĀTĀ TRITIJA ĪPAŠĪBAS

Gunta Kizāne¹, Aigars Vītiņš^{1,2}, Līga Avotiņa¹, Elīna Pajuste¹,
Andris Leščinskis¹

¹*Latvijas Universitātes Ķīmiskās fizikas institūts*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Pašlaik aktuāls jautājums ir novērtēt kodolsintēzes iekārtu vakuuma kameras pirmās sienas aizsargmateriālos uzkrātā tritija īpašības, lai prognozētu šo materiālu izturēšanos eksperimentālā kodolsintēzes reaktora ITER deiterija-tritija plazmas darbības apstākļos, lai novērtētu attīrīšanas iespējas no ūdeņraža radionuklīda tritija un materiālu radiācijas izturību. Kopš 2009. gada iekārtā “Apvienotais Eiropas tors” (JET) vakuuma kameras oglekļa siena ir aizvietota ar metālisku materiālu sienu ar berilija virsmu, bet divertoram ir volframa virsma [1]. Šāda JET vakuuma kameras siena ir analoga ITER vakuuma kameras pirmajai sienai.

Pētījumā analizētas tritija uzkrāšanās, izdalīšanās un sadalījums 2011.-2012. un 2013.-2014. gada JET kampaņu vienādu atrašanās pozīciju berilija limitera ķieģeļiem ar termodesorbciju He + 0.1% H₂ plūsmā, 4.8 K/min, 290-1030 K apgalā, un šķīdināšanas metodi. 2013.-2014. gada kampaņā iekšējās sienas ķieģeļos uzkrātā tritija daudzums ir 2,7-2,9 reizes mazāks par 2011.-2012. gadā uzkrāto, jo šinīs abās kampaņās JET vakuuma kamerā tritījs netika ievadīts, tas mazos daudzumos tajā palicis no agrāko gadu kampaņā, radies deiterija kodolu saplūšanā vai neitronu kodolreakcijās. Termodesorbcijas spektri ir atšķirīgi, kopumā 2013.-2014. gada paraugiem salīdzinājumā ar 2011-2012. gada paraugiem ir par 30 K augstāka tritija frakcionālā izdalīšanas temperatūra, bet visi paraugi tritija izdalīšanos 50% apmērā sasniedz 697-811 K temperatūru intervālā, savukārt 90% — 1176 K temperatūrā.

PROPERTIES OF TRITIUM ACCUMULATED BY BERYLLIUM LIMITERS OF THE THERMONUCLEAR FACILITY “JOINT EUROPEAN TORUS”

Gunta Kizāne¹, Aigars Vītiņš^{1,2}, Līga Avotina¹, Elīna Pajuste¹,
Andris Leščinskis¹

¹*University of Latvia, Institute of Chemical Physics*

²*University of Latvia, Institute of Solid State Physics*

The current issue is to assess properties of tritium accumulated in the first wall materials of fusion device JET (Joint European Torus) in order to predict the behaviour of these materials in the deuterium-tritium plasma operation of the experimental fusion reactor ITER, to assess the possibilities of decontamination from hydrogen radionuclide tritium as well as to estimate a material radiation resistance. Since 2009, the JET vacuum chamber carbon wall has been replaced with a metal wall that is analogous to the first wall of ITER and has beryllium surface in the main chamber and tungsten surface in the divertor [1]. The study analyses properties of tritium accumulation, release and distribution of samples of beryllium limiter tiles of the same positioning for the 2011-2012 and 2013-2014 campaigns with thermal desorption in a He + 0.1% H₂ flow at 4.8 K/min, 290-1030 K, and dissolution method. In general, the total tritium is by a factor of 2.7-2.9 higher in the inner wall beryllium limiter tiles of the 2011-2012 campaign than that of the 2013-2014 campaign as tritium was not introduced into the JET vacuum chamber in both the campaigns. Thermal desorption spectra are different. In general, the 2013-2014 samples had tritium fractional release temperature by 30 K higher than that of the 2011-2012 samples, while 50% detritiation was at 697-811 K, and 90% detritiation — at 1176 K. [1] L. Horton, EFDA-JET Contributors, Fusion Engineering and Design, 2013, 88, 434-439.

21. februāris

MATERIĀLI ENERĢĒTIKAI

ŪDEŅRADIS KĀ ENERĢIJAS NESEĪJS LATVIJAS GĀZES INFRASTRUKTŪRĀ

Jānis Kleperis¹, Laila Zemīte², Pēteris Lesničenoks¹, Ilze Dimanta¹, Ainārs Knoks¹

¹Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

²Rīgas Tehniskās Universitātes Enerģētikas institūts

LU CFI piedalās Valsts pētījumu programmas “Enerģētika” projekta „Latvijas dabasgāzes infrastruktūras attīstības tendences, izaicinājumi un risinājumi (LAGAS)” (vadošais partneris – RTU EI) īstenošanā, izvērtējot ūdeņraža iespējas atjaunojamo energoresursu saražotās enerģijas transportēšanā un uzglabāšanā. Ūdeņradis ir tāds pats enerģijas nesējs kā elektrība – lai to iegūtu, tas vispirms jāsarāžo. Un resursi tā ražošanai ir praktiski jebkurā vietā uz zemeslodes – ūdens, biomasas, zemes dzīles. Iegūtais ūdeņradis būs tik *zaļš*, cik *zaļa enerģija* tiks izmantota tā ražošanai. Pasaule pamazām pāriet uz atjaunojamo energoresursu (saule, vējš, ūdens upēs, biomasas) tehnoloģijām siltuma un elektrības ieguvei, kas pamatā ir *viszaļākā enerģija*. Daļa šo resursu, kā vējš, saule nav pieejami nepārtraukti, tādēļ enerģija no tiem vispirms jāuzkrāj ūdeņraža formā un lietotājam jānovada tad, kad vajadzīgs. Visvienkāršāk būtu izmantot jau esošo dabasgāzes infrastruktūru, kas Latvijā ir ļoti attīstīta gan uzkrāšanai pazemē, gan sadales tīklos, bet vai ar ūdeņradi tas ir iespējams? Pētījumos tiks analizēta citu valstu pieredze un plāni ūdeņraža tehnoloģiju ieviešanā un izmantošanā, kā arī attīstīt ūdeņraža ieviešanas plānus Latvijai nākotnē.

Pateicība VPP “Enerģētika” projektam LAGAS Nr.VPP-EM-INFRA-2018/1-0003 par atbalstu.

HYDROGEN AS ENERGY CARRIER IN LATVIAN GAS INFRASTRUCTURE

Janis Kleperis¹, Laila Zemite², Peteris Lesnicenoks¹, Ilze Dimanta¹, Ainars Knoks¹

¹Institute of Solid State Physics, University of Latvia

²Institute of Energetics, Riga Technical University

ISSP UL participates in the implementation of the project “Development tendencies, challenges and solutions of Latvian natural gas infrastructure” (LAGAS) of the National Research Program “Energetics” (leading partner IE RTU). The main task of team from ISSP is evaluation of the possibilities of hydrogen transportation and storage of energy produced from renewable energy resources. Hydrogen is the same energy carrier as electricity - to produce it, it must first be produced. And resources for its production are practically anywhere on the globe - water, biomass, subterranean depths. The resulting hydrogen will be as *green* as *green energy* will be used for its production. The World is gradually shifting to renewable energy technologies (sun, wind, water in rivers, biomass) for heat and electricity generation what is the base of the greenest energy. Part from these resources, like the wind and the sun is not available continuously, so the energy from them must first be collected in the form of hydrogen and should be led to end-user when needed. The easiest way would be to use the existing natural gas infrastructure, which is very developed in Latvia for both underground storage and distribution networks, but is it possible with hydrogen? The research will analyze the experience and plans of other countries in introducing and using the hydrogen technologies, as well as develop hydrogen implementation plan for Latvia.

VEIKTSPĒJAS PĒTĪJUMI PIELIETOJOT TRĪS NANOSTRUKTURĒTU MATERIĀLU SINERĢIJU LITIJA JONU BATERIJĀS

Kaspars Kaprāns, Jānis Mateuss, Gunārs Bajārs, Jānis Kleperis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Litija jonu baterijas efektivitātes uzlabošana ir būtisks faktors portatīvo elektronisko ierīču un elektroautomobiļu izplatībā. Tādējādi ir augusi nepieciešamība pēc ekspluatācijā drošām baterijām ar augstu enerģijas blīvumu, uzlabotu ātrumspeju izlādes-uzlādes stabilitāti, kurās izmantoti videi draudzīgi materiāli kā arī zemām ražošanas izmaksām. Darbā ir pētīts $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{TiO}_2/\text{rGO}$ nanostrukturēts kompozītmateriāls kā anods litija jonu baterijām. Anoda materiāla plānās kārtiņas tika iegūtas izmantojot izsmidzināšanas pirolīzes metodi, mainot metāla oksīda masas daļas paraugos.

Veikta elektrodu elektroķīmisko īpašību izpēte, iegūti gravimetriskās lādiņietilpības rezultāti, novērtēta ātrumspeja, izpētītas lādiņietilpības izmaiņas pēc vairākiem uzlādes izlādes cikliem. Kompozītmateriālu plānajām kārtiņām veikta struktūras analīze izmantojot SEM, XRD un Ramana spektroskopiju. Iegūtais triju materiālu anods ar materiāla proporcijām attiecīgi 70 % Fe_2O_3 , 20 % TiO_2 un 10 % rGO uzrādīja labākos rezultātus pielietojumam litija jonu baterijās.

RESEARCH OF ELECTROCHEMICAL PERFORMANCE DERIVED FROM SYNERGISTIC EFFECT IN TERNARY NANOSTRUCTURED MATERIAL FOR LITHIUM-ION BATTERIES

Kaspars Kaprāns, Janis Mateuss, Gunars Bajars, Janis Kleperis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Lithium-ion batteries (LIBs) and improvement of their effectivity have obtained much attention in the manufacturing of portable electronic devices. It is essential that the future LIBs can display the properties of high energy density, excellent charge - discharge stability, high safety, environmental friendly and low cost. As the core of energy storage equipment, anode materials directly determine the electrochemical performance of the LIBs.

We report an $\text{rGO}/\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{TiO}_2$ ternary nanocomposite with a various proportions of Fe_2O_3 and TiO_2 obtained via spray pyrolysis method. Electrochemical properties of all samples were studied by chronopotentiometry, cyclic voltammetry and electrochemical impedance spectroscopy. Structure and morphology investigations were performed by SEM, XRD and Raman spectroscopy. The results indicates that the $\text{rGO}/\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{TiO}_2$ ternary nanocomposite with stoichiometric ratios 70 % Fe_2O_3 , 20 % TiO_2 un 10 % rGO holds great promise as a high performance anode material for Li-ion batteries.

GRAFĒNA UN POLIMĒRA TINTE MEMBRĀNAS-ELEKTRODU SISTĒMAI

Jūlija Hodakovska¹, Ingars Lukoševičs¹, Pēteris Lesničenoks^{1,2}, Ainārs Knoks¹,
Jānis Kleperis¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un Lietišķās ķīmijas fakultāte*

Membrānas-elektrodu sistēma (MES) ir centrālā daļa protonu apmaiņas membrānu elektrolīzēros (PAME) un degvielas šūnās (PAMDS). Katalizatora slānis ir MES sastāvdaļa, kas pilda vairākas funkcijas: savieno membrānu un elektrodus, ar katalizatoru kontrolē reakcijas procesus, nodrošina izejvielu un reakcijas produktu transportu, elektronu un jonu pārneš, kā arī temperatūras regulēšanu (siltuma pievadi un atvadīšanu). Katalizatora slāni veido no specifiskas tintes, kas sastāv no katalizatora, katalizatora nesēja (tipiski, oglekļa nanodaļiņas), polimēra (kā saistviela un jonu vadītājs) un šķīdinātāja.

Šajā darbā ir apskatītas literatūrā aprakstītas metodes, kurās kā oglekļa nanodaļiņas ir izmantots grafēns, un noteikta to atbilstība uzdevumam izveidot katalizatora tinti priekš izmantošanas PAME etilēna ražošanā no oglekļa dioksīda. Prezentēti arī pirmie eksperimentālie dati, kas ļauj precizēt izmantoto metožu vērtēšanas kritērijus un modificēt tos atbilstoši savām vajadzībām.

PERCULARITIES OF PRODUCING GRAPHENE/ POLYMER INK

Julija Hodakovska¹, Ingars Lukosevics,¹ Peteris Lesničenoks^{1,2}, Ainars Knoks¹,
Janis Kleperis¹

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Faculty of Materials Science and Applied Chemistry, Riga Technical University*

The heart of proton exchange membrane electrolyzers (PEME) and fuel cells (PEMFC) is the membrane electrode assembly (MEA) who determines their performance and durability. Catalyst layer is a part of MEA that has several functional tasks: it connects membrane and electrodes, due to catalyst presence controls reaction processes, secures transport of fuel and reaction products, both electron and ion transfer, and also temperature regulation (heat transport inside system). Catalyst layer is prepared from special ink that consists of catalyst, catalyst support (typically carbon nanoparticles), polymer (as binder and ion transporting component) and solvent.

In this work different producing methods that are described in publications and use graphene are reviewed and compared to determine their suitability for MEA in PEME with electrocatalytically active cathode for ethylene production from carbon dioxide. First experimental data is also presented that allows narrowing methods' evaluation criteria and modify them according to the own requirements.

Funding from European Union's Horizon 2020 Research and Innovation Program project under grant agreement No 768789 is greatly acknowledged.

ELEKTROVĒRPŠANAS METODE FUNKCIONĀLU NANODIEGU IEGŪŠANAI UN TO ĪPAŠĪBU PĒTĪŠANA

Oskars Bitmets, Kaspars Pudžs, Andrejs Tokmakovs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Nanodiegiem ir augsta virsmas laukuma pret tilpuma attiecība, kas tos padara par perspektīviem funkcionāliem materiāliem. Viena no metodēm organisku nanodiegu iegūšanai ir elektrovērpšana (electrospinning). Nanodiegu īpašības ir iespējams modificēt un pielāgot nepieciešamajām vajadzībām, pievienojot dažādas aktīvās vielas vai izmantojot citus bāzes polimērus.

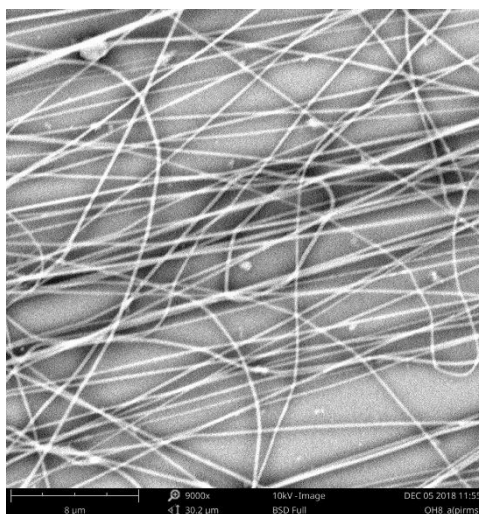
Šajā darbā ir pilnveidota elektrovērpšanas iekārta un ir iegūti nanodiegi, izmantojot PEO un H₂O šķīdumu. Šķīdumam papildus ir pievienots elektrovadošs polimērs PEDOT:PSS (PH1000), kas uzlabo iegūto nanodiegu elektrisko vadītspēju. Nanodiegu raksturošanai ir izmantota skenējošā elektronu mikroskopija, ar kuru ir noteikts arī diegu diametrs. Iegūtajiem nanodiegiem ir izmērīts Zēbeka koeficients un noteikta summārā vadītspēja.

ELECTROSPINNING METHOD FOR FUNCTIONAL NANOWIRES FABRICATION AND STUDY OF THEIR PROPERTIES

Oskars Bitmets, Kaspars Pudžs, Andrejs Tokmakovs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Nanowires have a high surface area to volume ratio, which makes them a perspective functional material. One of methods for acquiring organic nanowires is electrospinning. It is possible to modify properties of nanowires as necessary, by adding various active substances or using a different base polymer.

In this case the electrospinning equipment has been further improved. Nanowires have been acquired using PEO and H₂O solution. Additionally an electrically conductive polymer PEDOT:PSS (PH1000) has been used to improve electrical conductivity of nanowires. Scanning electron microscope was used to study properties of nanowires and to determine diameter of nanowires. Coefficient of Seebeck and overall conductivity of acquired nanowires has been measured.



Nanodiegu attēls, iegūts izmantojot skenējošo elektronu mikroskopu.
Picture of nanowires, acquired using scanning electron microscope.

21. februāris

**TEORIJA UN MATERIĀLU
MODELĒŠANA**

ELEKTRONU PROCESI CIETĀ VIELĀ: DIRAKA IETVARS

Ēriks Klotiņš

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Pētījums veltīts kanoniskās Diraka teorijas paplašinājumam ar pāreju no brīvas relativistiskas daļiņas apraksta uz elektronu procesiem cietā vielā. Konceptuāli tas panākts aizvietojojt Einšteina enerģijas - momenta sakarību brīvai Diraka daļiņai ar enerģijas – momenta aprakstu, kurā tiek ņemta vērā gan atomārā struktūra, gan mainīgs fotoierosināto daļiņu skaits. Formāli nepieciešamā pāreja no Diraka daļiņu fizikas uz fotoierosinātu elektriski lādētu daļiņu kinētiku cietā vielā izveidota kā vienota matemātiska struktūra, kurā ietilpst savstarpēji saistīti Hilberta telpas, kvantu lauka, un speciālās relativitātes pielietojumi. Nozīmīgs teorijas starprezultāts ir vienādojumu sistēma daļiņu dzimšanas un anihilācijas operātoriem, kuri ietver sistēmas makroskopiskos parametrus un vienlaicīgi ir piemēroti ietilpināšanai sadalījuma funkcijas un tam sekojošā kvantu kinētiskā aprakstā.

ELECTRONIC PROCESSES IN SOLID STATE: DIRAC FRAMEWORK

Eriks Klotins

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The research proposes canonical Dirac framework adapted for application to the electronic processes in solid state. The concern is a spatially periodic structure of atoms distinguished by birth and annihilation of particle states excited due to interaction with the electromagnetic field. This implies replacing the conventional Einstein energy-momentum relation specific of the canonical Dirac framework and permissible for particle physics by a case specific relation available for the solid state. The advancement is a unified and consistent mathematical framework incorporating the Hilbert space, the quantum field, and the special relativity. Essential details of the birth and annihilation of the particle states are given by an illustrative two-band model obeying basic laws of quantum mechanics, special relativity, and symmetry principles maintained from the canonical Dirac framework as a desirable property and as a prerogative for the study of the particle coupling and correlation.

The present research has been supported by the Institute of Solid State Physics, the University of Latvia in the frames of the ERA-NET HarvEnPiez project (No. ES RTD/2016/15).

NO TEMPERATŪRAS ATKARĪGO Cu_3N STRUKTURĀLO ĪPAŠĪBU APRĒĶINI AR MOLEKULĀRO DINAMIKU NO PIRMĀJIEM PRINCIPIEM

Dmitrijs Bočarovs¹, Jānis Timoshenko², Andris Anspoks¹, Aleksandrs Kalinko³,
Aleksejs Kuzmins¹, Matthias Krack⁴

¹ *Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

² *Materiālzinātnes un ķīmijas inženierijas katedra, Stony Brook Universitāte*

³ *Padebornas Universitāte, Ķīmijas departaments*

⁴ *Paula Šerera institūts*

Vara nitrīdam (Cu_3N) ir kubiskā anti- ReO_3 tipa struktūra, kuru veido NCu_6 oktaedri, savienotie ar stūriem. Tā režģa dinamiskās īpašības nosaka vara atomu anizotropās termiskās vibrācijas, kurām ir spēcīgāka svārstību amplitūda perpendikulāri lineārajām N-Cu-N atomu ķēdēm. Tā rezultātā Cu_3N ir zema sadalīšanās temperatūra aptuveni ap 300-470 °C.

Šajā pētījumā tika veiktas Cu_3N molekulārās dinamikas (AIMD) aprēķini temperatūras diapazonā no 300 K līdz 700 K, lai noskaidrotu savienojuma režģa dinamiku un Cu-N un Cu-Cu saišu anharmoniskumu.

Lai verificētu iegūtos teorētiskos rezultātus, mēs veicām aprēķinu rezultātu tiešo salīdzinājumu ar Cu K-malu EXAFS, izmantojot MD-EXAFS pieeju, kas tika aprakstīta atsaucē [1]. Mēs demonstrējam MD-EXAFS pieejas efektivitāti kombinācijā ar AIMD metodi teorijas validācijai un temperatūras atkarīgo strukturālo īpašību aprakstam Cu_3N savienojumā.

Pētījums, realizēts Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūtā un ir finansiāli atbalstīts „Pēcdoktorantūras pētījumi” programmā projekta Nr. 1.1.1.2/VIAA/I/16/147 (1.1.1.2/16/I/001) ietvaros.

AB INITIO MOLECULAR DYNAMICS CALCULATIONS OF Cu_3N TEMPERATURE DEPENDENT STRUCTURAL PROPERTIES

Dmitry Bocharov¹, Janis Timoshenko², Andris Anspoks¹, Aleksandr Kalinko³,
Alexei Kuzmin¹, Matthias Krack⁴

¹ *Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

² *Department of Materials Science and Chemical Engineering, Stony Brook University*

³ *Universität Paderborn, Naturwissenschaftliche Fakultät, Department Chemie*

⁴ *Paul Scherrer Institute, Villigen, Switzerland*

Copper nitride (Cu_3N) has a cubic anti- ReO_3 -type structure composed of NCu_6 octahedra joined by corners. The dynamic properties of its lattice are determined by the anisotropic thermal vibrations of copper atoms, having stronger amplitude perpendicular to linear N-Cu-N atomic chains. As a result, Cu_3N has low decomposition temperature of about 300-470 °C.

In this study, we performed *ab initio* molecular dynamics (AIMD) simulations of Cu_3N in the temperature range from 300 K to 700 K in order to elucidate the details of lattice dynamics and anharmonicity of the Cu-N and Cu-Cu bonding.

To validate the obtained theoretical results, we performed a direct comparison with the Cu K-edge EXAFS using the MD-EXAFS approach developed in [1]. We demonstrate the efficiency of the MD-EXAFS approach in combination with AIMD method for theory validation and temperature dependent structural properties description in Cu_3N .

Financial support provided by project No. 1.1.1.2/VIAA/I/16/147 (1.1.1.2/16/I/001) under the activity "Post-doctoral research aid" realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.

[1] A. Kuzmin and R. A. Evarestov, Quantum mechanics-molecular dynamics approach to the interpretation of X-ray absorption spectra, *J. Phys.: Condens. Matter* 21 (2009) 055401.

2D-IEROBEŽOTO MODEĻU VALIDĀCIJA DAŽĀDA DIAMETRA TiO₂ NANOCAURULĒM

Oļegs Lisovskis^{1,2}, Sergejs Piskunovs¹, Dmitrijs Bočarovs¹,
Stephane Kenmoe² un Eckhard Spohr²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Duisburgas-Esenes Universitātes Teorētiskās ķīmijas departaments*

Fotokatalizatoru simulēšana ūdens molekulu fotokatalītiskai šķelšanai pašlaik ir viens no svarīgākajiem virzieniem zinātnē. Īpaša uzmanība tiek pievērsta 1D nanostruktūrām, tai skaitā nanocaurulēm. Ir vēlams simulēt ūdens adsorbcijas procesu uz lielo, reāla izmēra nanocauruļu virsmas ar sarežģītām un datorlaika ietilpīgām metodēm (piemēram, *ab initio* molekulārā dinamika), bet limitējošais faktors ir pieejamie skaitļošanas resursi. Tādēļ lielo nanocauruļu reducēto 2D modeļu attīstīšana ir svarīga, lai dabūtu ieskatu ūdens šķelšanas procesos, kas notiek reālās sistēmās.

Agrāk mēs parādījām uz kvantu mehāniskā līmeņa (Density Functional Theory), ka dopētas (001) un (101) TiO₂ nanocaurules izrāda uzlabotas fotokatalītiskās īpašības. Mēs jau bijām izstrādājuši trīs dažādus šo nanocauruļu virsmu 2D modeļus, kuri parādīja, ka pastāv tiešs sakars starp modeļos pielietotiem nosacījumiem un nanocauruļu vienības šūnu (unit cell) konfigurāciju.

Šajā darba posmā modeļi tika validēti tikai attiecībā uz viena konkrēta izmēra nanocaurulēm. Lai sasniegtu šo modeļu derīguma visparēju apstiprinājumu, tiek pētīta modeļu atbilstība plašam nanocauruļu spektram, sākot no vismazākām iespējamām līdz ~6.5 nm diametram.

VALIDATION OF 2D CONSTRAINED MODELS FOR TiO₂ NANOTUBES OVER A BROAD RANGE OF DIAMETERS

Oleg Lisovski^{1,2}, Sergei Piskunov¹, Dmitry Bocharov¹,
Stephane Kenmoe², and Eckhard Spohr²

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Department of Theoretical Chemistry, University of Duisburg-Essen*

Simulation of photocatalysts for water splitting is presently one of the most prominent research fields. In particular, 1D nanostructures, e.g. nanotubes, are considered to be promising. Application of advanced, computationally expensive methods, such as *ab initio* Molecular Dynamics, for simulation of water adsorption on large, real-size nanotubes is desirable, but the limiting factor is the insufficient computational power currently available. Hence, development of reduced 2D models of large nanotubes for cost-efficient calculations is important for getting insights into processes related to water splitting which occur in real systems.

Previously we have shown, at the quantum mechanical density functional theory (DFT) level, that doped (001) and (101) TiO₂ nanotubes exhibit improved photocatalytic properties. We have already developed three different 2D models of these nanotubes' surfaces, which show that there is a clear connection between nature of the applied constraints and configuration of a nanotubular unit cell.

At that stage the 2D models were validated against only one specific nanotube diameter. In order to provide comprehensive confirmation of the models' efficiency, we study their performance with respect to a broad range of nanotube sizes, from the smallest possible up to ~6.5 nm in diameter.

VOLFRAMĀTU REZONANSES RENTGENSTARU EMISIJAS SPEKTROSKOPIJA

Inga Jonāne¹, Aleksandrs Kalinko², Aleksejs Kuzmins¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Pāderbornas Universitāte*

Materiālu lokālās struktūras pētījumiem plaši tiek izmantota rentgenabsorbcijas spektroskopija (XAS), tomēr ir gadījumi, kad šī metode dod ierobežotu informāciju iekšējās čaulas elektronu līmeņa dabiskās paplašināšanās dēļ ($W L_3$ malai $\Gamma \sim 4.7$ eV). Izmantojot rezonanses rentgenstaru emisijas spektroskopiju (RXES), iespējams netiešā veidā (divpakāpju procesā) detektēt XAS analogus spektrus, bet jau ar daudz augstāku izšķirtspēju (<1 eV). Izšķirtspēja tiek būtiski uzlabota beigu stāvokļa mazākas paplašināšanās dēļ. Šo metodi sauc arī par augstas-izšķirtspējas caur fluorescenci detektētu (HERFD) XAS [1].

Izcils piemērs, kad HERFD XAS ir priekšrocības, ir volframāti (MWO_4), kuros volframs var būt gan ar oktaedrisku ($ZnWO_4$), gan tetraedrisku ($CaWO_4$, $BaWO_4$) koordināciju. Atšķirībā no XAS, HERFD XAS var noteikt $5d(W)$ joslas sašķelšanos $5d(t_{2g}/t_2)$ un $5d(e_g/e)$ līmeņos kristāliskā lauka dēļ. Tas ļauj viennozīmīgi identificēt oktaedrisku un tetraedrisku koordināciju. HERFD XAS metode ir perspektīva $CuMo_{1-x}W_xO_4$ cieto šķīdumu pētījumiem, lai noskaidrotu volframa ietekmi uz materiāla lokālo struktūru un funkcionālajām īpašībām.

RESONANT X-RAY EMISSION SPECTROSCOPY STUDY OF TUNGSTATES

Inga Jonane¹, Aleksandr Kalinko², Alexei Kuzmin¹

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Paderborn University*

X-ray absorption spectroscopy (XAS) is widely used to probe the local structure of materials, but there are cases where this method provides limited information due to the natural broadening of the core state ($\Gamma \sim 4.7$ eV for the $W L_3$ -edge). Resonant X-ray emission spectroscopy (RXES) allows one to detect indirectly (through second-order process) XAS-analogues spectra but with much higher resolution (<1 eV). The resolution is significantly increased due to smaller broadening of the final state. This method is called the high energy-resolution fluorescence detected (HERFD) XAS [1]. An excellent example when HERFD XAS has advantage over a conventional XAS is the case of tungstates (MWO_4), in which tungsten atoms have octahedral ($ZnWO_4$) or tetrahedral ($CaWO_4$, $BaWO_4$) coordination. Unlike XAS, HERFD XAS can detect crystal-field splitting of the $5d(W)$ band into $5d(t_{2g}/t_2)$ and $5d(e_g/e)$ levels. This allows one to distinguish between octahedral and tetrahedral coordinations. HERFD XAS method is promising for investigations of $CuMo_{1-x}W_xO_4$ solid solutions to understand tungsten induced effects on the local structure and functional properties of the material.

[1] M. Rovezzi and P. Glatzel, *Semicond. Sci. Technol.* 29 (2014) 023002.

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2018/1 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.

21. februāris

STENDA REFERĀTI

KOMPOZĪTU POLI(ĒTERĒTERA KETONU)/ JONU ŠĶIDRUMU MEMBRĀNU STABILITĀTE

Guntars Vaivars^{1,2}, Marta Kāne^{1,2}

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Latvijas Universitātes Ķīmijas fakultāte*

Oglekļa dioksīds tiek uzskatīts par nelietderīgu blakus produktu, kura nokļūšana apkārtējā vidē nav vēlama. Tas ir piesaistījis pētnieku uzmanību atrast ekonomiski izdevīgu paņēmieni, lai to pārvērstu par ķīmiskajai rūpniecībai noderīgu izejvielu, piemēram, etilēnu vai metānu. Elektroenerģijas pārpalikums ārpus intensīvā patēriņa stundām ir noderīgs elektroķīmiskajai oglekļa dioksīda reducēšanai. Selektīvai etilēna iegūšanai ar pietiekoši augstu efektivitāti ir piemēroti vara nanokatalizatori.

Labākā reaktora konstrukcija joprojām ir pētīšanas stadijā. Ja izmanto klasisko elektroķīmisko šūnu, tad anodtelpu no katodtelpas atdala membrāna, kuras stabilitāte ietekmēs reaktora ilgdarbību. Šajā darbā tika pētīta poli(ēterētera ketona)/ jonu šķidrums kompozītās membrānas stabilitāte šķidrā vidē. Tika noteiktas membrānas biezuma un masas izmaiņas, kā arī difūzijas produkti un membraāns sastāvs.

COMPOSITE POLY(ETHER ETHER KETONE)/ IONIC LIQUID MEMBRANE STABILITY

Guntars Vaivars^{1,2}, Marta Kāne^{1,2}

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Faculty of Chemistry, University of Latvia*

Carbon dioxide is a waste product and a source of environmental pollution. Researchers all around the world are looking for financially viable route to produce valuable products, such as ethylene, methane, etc. Electrochemical CO₂ reduction is attracting attention due to the possibility to utilize the off-peak hour's electricity. Cu-based nanocatalysts have demonstrated to be applicable for selective ethylene production with reasonably high efficiency.

However, the most efficient cell construction should still be developed. In a classical electrochemical approach, the anode and cathode chamber is separated by membrane, which should be stable for long term applications. In thi work, the composite poly(ether ether ketone)/ ionic liquid membrane is tested in a liquid environment. The membrane weight and thickness is controlled as well as diffusion products and the membrane composition.

Funding from European Union`s Horizon 2020 Research and Innovation Programme project under grant agreement No 768789 is greatly acknowledged.

AR SLĀPEKLI DOPĒTA GRAFĒNA VADĪTSPĒJA UN PIELIETOJUMI GĀZU SENSOROS

Pēteris Lesničenoks^{1,2}, Ainārs Knoks¹, Ingars Lukoševičs¹, Kaspars Kaprāns¹, Līga
Grīnberga¹, Laimonis Jēkabsons¹, Jānis Kleperis¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un Lietišķās ķīmijas fakultāte*

Daudzslāņu grafēns (GSS) ir materiāls ar labu elektrisko vadītspēju, pielietojams gāzu sensoros, superkondensatoru elektrodos, elektrovadošās tintēs. Tā īpašības ietekmē sintēzes apstākļi, kā arī struktūras defektu un piemaisījumu sastāvs. Priekšapstrādē iespējams veikt grafēna reducēšanu, aizvadot sintēzes blakusproduktus, kā arī sintēzes nākamajos soļos ievadīt dažādas jaunas, specifiskiem pielietojumiem nepieciešamas komponentes, piemēram, slāpekli, no urīnvielas vai citiem amīdiem. Apskatot šādas materiālu sistēmas, iespējams plānot materiāla īpašību izmaiņas un pielietojamību baterijās, superkondensatoros, sensoros un citās ierīcēs.

NITROGEN DOPED GRAPHENE: CONDUCTIVITY AND GAS SENSOR PROPERTIES

Peteris Lesnichenoks^{1,2}, Ainars Knoks¹, Ingars Lukosevics¹, Kaspars Kaprans¹, Liga
Grinberga¹, Laimonis Jekabsons¹, Janis Kleperis¹

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Faculty of Materials Science and Applied Chemistry, Riga Technical University*

Multilayer graphene (GSS) is a material with good electrical conductivity ~0,23 Ohm/square. It is usable in various devices such as sensors, supercapacitors, electroconductive inks etc. Its electrical conductivity mainly is determined by the conditions of the synthesis, structural defects and dopant composition in the material. Control of properties is possible by GSS pre-conditioning through synthesis of a reduced form. During reduction unwanted synthesis byproducts are purged and enabling nitration of samples. In this research we are investigating systems for use in batteries, supercapacitors and sensors.



The financial support of Latvian Science Council project No. 2018/1-0194 is greatly acknowledged.

GĀZU DIFŪZIJAS ELEKTRODU ELEKTROĶĪMISKAJĀS ŠŪNĀS PIELIETOŠANAS RAKSTUROJUMS

Pēteris Lesničenoks^{1,2}, Ainārs Knoks¹, Ingars Lukoševičs¹, Kaspars Kaprāns¹, Līga Grīnberga¹, Laimonis Jēkabsons¹, Jānis Kleperis¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un Lietišķās ķīmijas fakultāte*

Gāzu difūzijas elektrodi (GDE) ir plaši pielietoti membrānu elektrodu konstrukcijās elektrolīzeros, degšūnās kā arī cita lietojuma elektroķīmiskajās šūnās, kurās vienlaicīgi nepieciešams kontakts starp elektrolītu, elektrodu un gāzes plūsmu. GDE nozīmīga sastāvdaļa ir uz tā porainās elektrovadošās virsmas izsēdinātais katalizators. Šādās elektroķīmiskajās šūnās produktu un efektivitātes nodrošināšanai tiek izmantotas noteiktajā vidē stabilas daļiņas ar lielu virsmu, piemēram, dārgmetālu nanodaļiņas uz nesēja ar lielu virsmas laukumu.

CO₂ elektroķīmiskajā reformēšanā par etilēnu īpaši vēlams Cu kristalītu, nanodaļiņu vai nanostruktūru pielietojums. Šādu daļiņu klājums uz GDE ļauj pabīdīt elektrolīzes procesu vēlamo produktu virzienā. Papildus šai tehnoloģijai iespējams integrēt pārklājumos vadošas daļiņas, kuras nedod tiešu pienesumu elektrolīzes procesos, taču palīdz elektronu novadīšanai līdz katalizatoram. Pētījumā apskatīta grafēna tipa materiālu izmantošana GDE/katalizatora pārklājumos.

GAS DIFFUSION ELECTRODES IN ELECTROCHEMICAL CELLS – APPLICATION CHARACTERIZATION

Pēteris Lesničenoks^{1,2}, Ainārs Knoks¹, Ingars Lukoševičs¹, Kaspars Kaprāns¹, Līga Grīnberga¹, Laimonis Jēkabsons¹, Jānis Kleperis¹

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Faculty of Materials Science and Applied Chemistry, Riga Technical University*

Gas diffusion electrodes (GDE) are widely used in the Membrane Electrode Assembly (MEA) in electrolyzers, fuel cells as well as in other electrochemical cells in which the contact of electrode, electrolyte and gas flow for electrochemical processes.

GDE is unique with its high surface volume – porosity for electrochemical reactions and the catalyst on its surface. This catalyst can vary from precious metal nanoparticles to specific partially-inert materials for specific reactions seated on large surface volume base material.

For CO₂ electrochemical conversion to ethylene especially useful is copper in its crystalline form as a nanoparticle, microparticle or with exposed nanostructures. Coating of such particles on the GDE allows to push reactions towards greater yield of required compound. Additionally, to this technique it is possible to integrate particles with high conductivity, which remain coated in binder and inert to electrochemical processes yet act as current collector for the catalyst particles. In this research we explore graphene-like materials for their use with GDE/catalyst coatings.

Funding from European Union's Horizon 2020 Research and Innovation Program project under grant agreement No 768789 is greatly acknowledged.

JAUNI MATERIĀLI ATJAUNOJAMO ENERGORESURSU TEHNOLOĢIJĀM LU CFI

Jānis Kleperis, Mārtiņš Rutkis, Līga Grīnberga, Guntars Vaivars, Juris Purāns, Gunārs Bajārs,
Ēriks Birks, Andris Anspoks
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Stratēģijas “Latvijas oglekļa mazietilpīga attīstība līdz 2050. gadam” mērķis ir samazināt Latvijas tautsaimniecības radītās SEG emisijas par 80%, salīdzinot ar 1990. gadu, un palielināt oglekļa piesaisti, pilnībā nosedzot Latvijas antropogēno SEG emisiju apjomu un sasniedzot oglekļa neitralitāti. Mērķi var sasniegt tikai ieviešot tehnoloģijas, kas izmanto vietējos atjaunojamus energoresursus (saule, vējš, ūdens upēs, biomasas, zemes dziļu siltums) ne tikai enerģijas iegūšanai, bet arī uzkrāšanai dažādu energonesēju (sintētiskais metāns, ūdeņradis) veidā, un attīstot energoefektivitāti, piemēram, savācot neizmanto siltumu.

Jauni materiāli atjaunojamo enerģiju tehnoloģijām tiek sintezēti un pētīti vairākās LU CFI laboratorijās, piemēram, Enerģijas iegūšanas un uzkrāšanas materiālu laboratorijā (J.Kleperis), Organisko materiālu laboratorijā (M.Rutkis), Ķīmijas tehnoloģiju laboratorijā (G.Vaivars), Plāno kārtiņu laboratorijā (J.Purāns), Segnetoelektrisko materiālu laboratorijā (E.Birks). Tādi ir organisko materiālu/nanodaļiņu kompozīti termoelektriskajiem ģeneratoriem neizmanto siltuma savākšanai, metālu-organisko perovskītu materiāli Saules fotovoltiskajiem paneļiem, fotokatalītiski materiāli gan CO₂ reformēšanai derīgā produktā oglekļa piesaistes veicināšanai, gan ūdens sadalīšanai saules gaismā ūdeņraža ražošanai, nanostrukturēti oglekļa-metāla kompozīti un polimēru membrānas ūdeņraža tehnoloģijām, gan bezsvina pjezoelektriskās keramikas enerģijas ievākšanai, kā arī uzlaboti materiāli elektrodiem un elektrolītam litija akumulatoros.

NEW MATERIALS FOR RENEWABLE ENERGY TECHNOLOGIES

Janis Kleperis, Martins Rutkis, Liga Grinberga, Guntars Vaivars, Juris Purans, Gunars Bajars,
Eriks Birks, Andris Anspoks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The goal of strategy “Low Carbon Development of Latvia up to 2050” is to reduce the GHG emissions by 80% compared to 1990, and to increase carbon sequestration, fully covering the anthropogenic GHG emissions of the country and reaching carbon neutrality. This can only be achieved by introducing technologies that work with local renewable energy sources (solar, wind, water in the rivers, biomass, subsoil heat) not only for energy harvesting but also for storage in the form of various energy carriers (synthetic methane, hydrogen), and energy efficiency.

New materials for renewable energy technologies are synthesized and studied in several laboratories of ISSP UL, such as Laboratory of Materials of Energy Harvesting and Storage (J.Kleperis), Laboratory of Organic Materials (M.Rutkis), Laboratory of Chemical Technologies (G.Vaivars), Thin Films Laboratory (J.Purans), Laboratory of Ferroelectric Materials (E.Birks). These include organic material/nanoparticle composites for thermoelectric generators to collect unused heat, metal-organic perovskite material for solar photovoltaic panels, photocatalytic materials for both CO₂ reformation in a carbon-efficient product, and for water splitting under sunlight for hydrogen production, nanostructured carbon-metal composites and polymer membranes for hydrogen technologies, lead free piezoceramics for energy harvesting, as well as improved materials for electrodes and electrolyte in lithium batteries.

CO₂ REFORMĒŠANAS ELEKTROKATALĪTISKAS REAKCIJAS NORISES MEHĀNISMS UZ GRAFĒNA/Cu ELEKTRODA

Janis Kleperis, Jurijs Žukovskis, Sergejs Piskunovs, Maksims Sokolovs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Dabā viss ir līdzsvarā, līdz cilvēks neiejaucas. Kad šis līdzsvars ir izjaukts, cilvēkiem jāpieliek pūles, lai līdzsvaru mākslīgi atjaunotu. Daudz ko daba pasaka priekšā, piemēram, kā samazināt CO₂ daudzumu atmosfērā, - augi to absorbē, un fotosintēzes procesā pārvērš biomasā – derīgā izejvielā. Zinātnieki atraduši, ka arī elektrokatalītiski iespējams CO₂ reformēt par derīgu izejvielu – spirtu vai etilēnu.

Izrādās, varš ir vienīgais katalizators šai reakcijai, pārējie metāli vai nu labprātāk elektrolīzē izdala ūdeņradi, vai arī sadala CO₂ par CO tikai. Bet vara nano un mikrokristāliskās struktūras elektrolīzes procesā ātri degradējas. Viens no veidiem, kā palielināt tā stabilitāti, ir “piešūt” vara kristāliskās nanostruktūras pie stabilas elektrovadošas pamatnes, un viena tāda pamatne var būt viens no oglekļa paveidiem – grafīta atomu 2D slānis - grafēns.

Mūsu darbā tiek pētīts elektrods, ko veido grafēna plāksnes, kuras satur vara nanostruktūras – gan teorētiski modelējot šādas struktūras stabilitāti un elektrona lādiņa pārdalīšanos no oglekļa uz varu, gan praktiski. Tiek skaidrots arī CO₂ molekulas elektrokatalītiskās reformācijas reakcijas mehānisms.

THE MECHANISM OF THE ELECTROCATALYTIC REACTION OF CO₂ REFORMATION ON GRAPHENE/Cu ELECTRODE

Janis Kleperis, Jurijs Žukovskis, Sergejs Piskunovs, Maksims Sokolovs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

In nature everything is in balance until people intervenes. When this balance is disrupted, people must make an effort to restore the balance artificially. Much of the nature tells us, for example, how to reduce the amount of CO₂ in the atmosphere, - the carbon sequestration is process where plants absorb CO₂ and turn it into biomass - a useful raw material. Scientists have found that electro-catalysis process can also reform CO₂ to useful fuel - alcohol or ethylene. It turns out that copper is the only catalyst for this reaction, the other metals are more likely to evolve hydrogen in electrolysis, or split CO₂ into CO only. But copper nano- and microcrystalline structures are not stable it degrade rapidly during electrolysis. One way to increase its stability is to "sew" copper crystalline nanostructures on a stable conductive substrate, and one such substrate may be of the carbon types – graphite`s atomic 2D layer - graphene.

In our work, we study the electrode formed by graphene plates containing copper nanostructures - both theoretically modeling the stability of such a structure and the redistribution of the electron charge from carbon to copper, and in practice. The mechanism of the electrocatalytic reformation reaction of the CO₂ molecule is also explained.

Funding from European Union`s Horizon 2020 Research and Innovation Program project under grant agreement No 768789 is greatly acknowledged.

ALOĪNA UN PRETJONU ADSORBCIJA ŽELATĪNĀ KĀ EKSTRACELULĀRĀS MATRICAS MODEĻA VIELĀ

Tatjana Borisova

Profesionālā vidusskola Beauty school

Darba mērķis ir sniegt pierādījumus mūsu hipotēzei par to, ka onkoloģija ir šūnu dubulto elektrisko slāņu (DES) difūzo daļu pārklāšanās.

Želatīns bija izmantots kā šūnas ekstracelulārās matricas (EM) modelis. EM pamata viela ir kolagēns II, kuram piemīt koloidāli-ķīmiskas īpašības. Želatīns tika iemērķts alvejas sulā un LiCl, NaCl, KCl, NH₄Cl sāļu šķīdumos pie 18-19 °C temperatūras uz 24 stundām. Uzbriešanas pakāpe, elektrovadītspēja, dielektriskā caurlaidība tika izmērīti.

Pretjonu-kaŕjonu un aloīna adsorbciija tika saskaitīta pēc Gibbsa vienādojuma.

Alvejas sula satur apmēram 2 % antrahinonus. Galvenie no tiem ir aloīns un aloemodīns, kas ir tās sadalīšanas produkts. Aloīns ir virsmas aktīvs.

Aloīna adsorbciija želatīnā tiek aprakstīta ar sekojošu izotērmu: $-B_1 \cdot \lg C = Q_{zap}$ (1), kur B_1 ir konstanta, C ir aloīna molāra koncentrācija. $B_1=242.85$ ($\lg B_1=2.39$). $B_2=129.7$ ($\lg B_2=2.11$) HepG2 šūnām un $B_2=111.3$ ($\lg B_2=2.05$) vēža HeLa šūnām Henri izotermai $-B_2 \cdot C = Q_{zap}$ (2).

Daudzi augi ir mazhidratētu kaŕjonu Ag, Au, Rb, Co, Ni, Mn, Cu avots, dažreiz – kompleksa formā.

Secinājums. Mazhidratētie kaŕjoni tieši iedarbojas uz DES virsmas potenciālu karcinomas gadījumā un samazina EM uzbriešanas pakāpi sarkomas gadījumā.

ADSORPTION OF ALOIN AND COUNTER-IONS ON GELATIN AS MODEL OF EXTRACELLULAR MATRIX

Tatjana Borisova

Professional school Beauty school

Aim of the work is to present evidences of our hypothesis – oncology is crossing of diffusion parts of double electrical layers (DELs) of cells.

Gelatin was used as the model of extracellular matrix (EM) of a cell. The main compound of EM is collagen II, which possesses colloidal-chemical properties. Gelatin was swollen in aloe latex and solutions of salts LiCl, NaCl, KCl, NH₄Cl at 18 - 19 °C during 24 h. The degree of swelling, electroconductivity, dielectric permeability were measured.

Adsorption of counter-ions (cations) and aloin was calculated on Gibbs's equation.

Aloe latex contains about 2% antraquinones. The main of them are aloin and aloemodin as its degradation product. Aloin is surface-active substance.

Adsorption of aloin on gelatin is described by isotherm $-B_1 \cdot \lg C = Q_{zap}$ (1), where B_1 is constant, C is molar concentration of aloin. $B_1=242.85$ ($\lg B_1=2.39$).

$B_2=129.7$ ($\lg B_2=2.11$) for HepG2 cells and $B_2=111.3$ ($\lg B_2=2.05$) for cancer HeLa cells for Henry isotherm $-B_2 \cdot C = Q_{zap}$ (2).

Many plants are sources of less-hydrated cations Ag, Au, Rb, Co, Ni, Mn, Cu, sometimes in complex form.

Conclusions. Less-hydrated cations have clear action on surface potential of DEL in the case of carcinoma and decrease degree of swelling of EM in the case of sarcoma.

ELEKTROĶĪMISKA VARA IZGULSNĒŠANA UZ OGLEKLI BĀZĒTA GĀZU DIFŪZIJAS ELEKTRODA

Ingars Lukoševičs, Ainārs Knoks, Pēteris Lesničenoks, Jānis Kleperis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Viens no katalizatoriem CO₂ elektroķīmiskas reducēšanas par etilēnu reakcijai ir varš, kura kristāliskā forma būtiski ietekmē reakcijas galaproduktus. Zināmas vairākas metodes, kā šo metāla katalizatoru strukturēt, un viena no tām ir elektroķīmiska vara izgulsnēšana.

Darba gaitā varš tiek elektroķīmiski izgulsnēts uz gāzu difūzijas elektroda no dažādiem vara jonu saturošiem elektrolītiem un to kombinācijām atkarībā no pieliktā potenciāla un strāvas stipruma.

Atrasts, ka iespējams iegūt dažādas katalizatora ģeometriskas formas pie dažāda tipa elektrolītiem, par piemēru minot dendrītus vai monokristālus. Pie tam konstatēts, ka vara mikrokristālu forma stipri atkarīga no izgulsnēšanās ātruma – pie salīdzinoši mazām strāvām veidojas relatīvi kristāliskas formas, savukārt pie lielākām sāk veidoties polikristāliskas vai adat-veida struktūras.

Darbā iegūtos rezultātus var tālāk izmantot CO₂ elektroķīmiskās reducēšanas raksturlielumu iegūšanai katram struktūru veidam.

ELECTROCHEMICAL PRECIPITATION OF COPPER ON CARBON BASED GAS DIFFUSION ELECTRODE

Ingars Lukosevics, Ainars Knoks, Peteris Lesnicenoks, Janis Kleperis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

One of catalysts for CO₂ electrochemical reduction to ethylene reaction is copper. The final products of reaction greatly depend on the crystalline forms of the catalyst. Several methods are known for structuring this metal catalysts, one of which is electrochemical precipitation of copper.

In this work copper is being electrochemically precipitated on gas diffusion electrodes from different copper ions containing electrolytes and their combinations in dependance of applied potential and current densities.

Several different geometric forms of catalyst microcrystals can be obtained by using different electrolytes, for example dendrites or single crystals can be created. It has also been observed that the catalyst crystalline form greatly depends on copper depletion rate speed – at relatively lower currents crystals are formed while at larger current densities polycrystalline agglomerates or needle-type copper is formed.

From these results all types of grown copper structures can be used for tests for CO₂ electrochemical reduction efficiency.

Acknowledgement: Funding from European Union`s Horizon 2020 Research and Innovation Program project under grant agreement No 768789 is greatly acknowledged.

POLIMĒRA/CIRKONIJA OKSĪDA KOMPOZĪTU STIKLOŠANĀS TEMPERATŪRU PĒTĪŠANA

Einārs Sprūģis¹, Guntars Vaivars¹, Viktorija Novikova²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Latvijas Universitātes Ķīmijas fakultāte*

Sulfonēts poliēterēterketons (SPEEK) jau ilgi tiek uzskatīts par piemērotu alternatīvu izmantošanai par elektrolītu elektroķīmiskajās ierīcēs. Šis materiāls ir relatīvi viegli sintezējams, ar augstu ķīmisko un termisko izturību, un tā īpašības iespējams modificēt ar dažādām pildvielām. Tomēr ir zināms, ka dažu pildvielu pievienošana var samazināt temperatūru intervālu, kurā materiāls ir izmantojams, jo kompozītā var notikt pāreja no elastīga uz plastisku stāvokli un mehāniskās īpašības ievērojami pasliktinās. Šī pāreja noris materiāla stiklošanās temperatūrā, ko iespējams noteikt ar diferenciāli skenējošās kalorimetrijas metodi.

Šajā pētījumā tika izgatavoti 4 SPEEK/cirkonija oksīda (ZrO₂) kompozītmembrānas ar 1%, 3%, 5% un 7% ZrO₂ masas daļu, kā arī SPEEK references membrāna. Membrānu paraugu stiklošanās temperatūru noteikšanai tika izmantota iekārta DSC131 evo. Iegūtie rezultāti norāda uz stiklošanās temperatūras paaugstināšanos, pieaugot ZrO₂ masas daļai.

A STUDY OF GLASS TRANSITION TEMPERATURES IN POLYMER/ZIRCONIUM OXIDE COMPOSITES

Einārs Sprūģis¹, Guntars Vaivars¹, Viktorija Novikova²

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Faculty of Chemistry, University of Latvia*

Sulfonated poly(ether ether ketone) (SPEEK) have a long history as an alternative for use in electrochemical devices. This material have high chemical and thermal stability, it is relatively simple to synthesize, and its properties can be modified by addition of various filler components. However, some fillers can decrease the operating range for the material, since a change can occur in the composite where it transforms from elastic to plastic state and thus mechanical properties degrade significantly. This change occurs at the glass transition temperature, which can be determined using differential scanning calorimetry.

In this study, 4 different SPEEK/zirconium oxide (ZrO₂) composite membranes were prepared with 1, 3, 5, and 7 w% of ZrO₂ as well as reference SPEEK membrane. DSC131 evo instrument was used for determination of glass transition temperatures of membrane samples. Results show increase of glass transition temperature as the amount of ZrO₂ in the membrane is increased.

Funding from European Union's Horizon 2020 Research and Innovation Program project under grant agreement No. 768789 is greatly acknowledged.

STIKLA ŠĶIEDRAS KARBONĀTU ČAULAS PĒTĪJUMI, IZMANTOJOT TERMOGRAVIMETRIJU UN DIFERENCIĀLO TERMISKO ANALĪZI

Mihails Vdovičenko¹, Jānis Balodis², Gunārs Bajārs², Laila Pētersone³, Ēvalds Pentjušs²

¹*Latvijas Universitātes Fizikas un matemātikas fakultāte*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

³*Valmieras stikla šķiedra, AS*

Lai mazinātu stikla šķiedras izvilšanas temperatūru, stikla sastāvam parasti pievieno Na₂O. Šādā stikla šķiedrā Na⁺ joni laika gaitā difundē uz šķiedras virsmu un, reaģējot ar H₂O un CO₂ no atmosfēras, veido "saķepinātu" tronas (Na₃H (CO₃)₂·2H₂O) kristālu čaulu uz stikla. Darbā pētīts rūpnieciski ražotais stikla šķiedras audums ar stikla sastāvu (18-22) Na₂O, (3-5) Al₂O₃, (73-79) SiO₂. XRD rezultāti parādīja ka sildot audumu ar noformējušos čaulu līdz 200⁰C, var tronas kristālus pilnībā pārvērst Na₂CO₃ kristālos. Atšķirībā no tronas pulvera, stikla auduma termogravimetrijas (TG) signāls satur divus kritumus un atbilstošais difenciālās termiskās analīzes (DTA) signāls-divus pīķus. Parādīts, ka otrais TG signāla kritums un DTA pīķis ir saistīti ar "saķepinātās" sistēmas "kristāli-stikls" lielo termisko vadāmību un stikla relatīvi lielo termisko kapacitāti. Stikls kopumā kavē tronas kristālu silšanu un to konversiju, salīdzinot ar tronas pulveri. Ar Kisindžera metodi noteiktās konversijas kinētisko parametru vērtības $E_a=102 \text{ kJ/molu}$ un $A=7,58 \cdot 10^{13} \text{ min}^{-1}$ atrodas starp citu autoru darbos tronas pulveriem noteiktām vērtībām. Diskutēti pētījuma rezultāti.

CARBONATE SHELL ON GLASS FIBERS STUDIES BY THERMOGRAVIMETRY AND DIFFERENTIAL THERMAL ANALYSIS

Mihails Vdovicenko¹, Janis Balodis², Gunars Bajars², Laila Petersone³, Evalds Pentjuss²

¹*Faculty of physics and mathematics, University of Latvia*

²*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

³*Valmieras stikla skiedra, AS*

To lower the drawing temperature of glass fibers, usually to glass content is added Na₂O. In such glass fibers the Na⁺ ions diffuse to its surface and react with H₂O and CO₂ from atmosphere, creating here shell from "glued" trona (Na₃H (CO₃)₂·2H₂O) crystals. There was studied an industrially produced glass fiber fabric with glass content (18-22) Na₂O, (3-5) Al₂O₃, (73-79) SiO₂. XRD analysis shows that trona crystals of formed shell can be fully converted to Na₂CO₃ by heating up to 200⁰C. In contradistinction to trona powder, the signal of thermogravimetry (TG) contains two steps and signal of differential thermal analysis (DTA)- two peaks. They are caused by high thermal conductivity of system "glued crystals-glass" and relative high glass thermal capacity, that delays the trona heating and its conversion and leads to appearance of the second step and peak in TG and DTA signals accordingly. The values of trona conversion kinetic parameters, measured by Kissinger's method, are $E_a=102 \text{ kJ/mole}$ and $A=7,58 \cdot 10^{13} \text{ min}^{-1}$, that are located in dissipation region of values from other researchers for trona powders. Obtained results are discussed.

Autori pateicas institūta bāzes finansējumam par atbalstu.

ANODISKO TiO₂ NANOCAURULIŠU LEGĒŠANAS AR GRAFĒNA NANODAĻIŅĀM IETEKME UZ FOTOFIZIKĀLĀM ĪPAŠĪBĀM

Ainārs Knoks, Pēteris Lesničenoks, Ingars Lukoševičs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Reducējot CO₂, iespējams iegūt dažādus lietderīgu produktus, bet tā pārstrāde ir energoietilpīgs process. Tāpēc nepieciešams izmantot enerģijas pievadei atjaunojamo energoresursu tehnoloģijas, kā arī meklēt alternatīvus materiālus, kas nodrošinātu lielāku reducēšanas efektivitāti. TiO₂ ir zināms, kā izturīgs un pieejams fotokatalizators, bet CO₂ reformācijai nepieciešams papildus katalizators gan molekulu adsorbcijas uz virsmas palielināšanai, gan reformācijas reakciju norisei. Grafēna nanodaļiņas sintezētas ar elektroķīmiskās eksfoliācijas metodi, atsijātas un reducētas. Iegūtās vairākslāņu grafēna nanodaļiņas tika izmantotas, legējot TiO₂ nanocaurules to augšanas procesā. Darbā pētīta legēšanas daudzuma ietekme uz jaunā materiāla fotofizikālajām īpašībām. Morfoloģijas (SEM), struktūras (XRD, Ramana spektroskopija), absorbcijas malas un fotostrāvas pētījumi rāda, ka vairākslāņu grafēna nanodaļiņu piemaisījums TiO₂ nanocauruļu kārtīņai ietekmē tās elektroniskās īpašības – gan absorbcijas malas novietojumu, gan lādiņnesēju skaitu un vadītspēju. Šajā darbā autors prezentē pirmos rezultātus LU CFI doktorantu un jauno zinātnieku projekta rezultātiem.

Pētījums ir finansiāli atbalstīts Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūta Studentu un Jauno zinātnieku projekta Nr. SJZ/2018/9 ietvaros

INVESTIGATION OF ANODIC TiO₂ IN SITU DOPING WITH GRAPHENE NANOPARTICLES ON PHOTOCATALYTIC ACTIVITY

Ainars Knoks, Peteris Lesnicenoks, Ingars Lukosevics
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Reduction of CO₂ into valuable synthetic materials and/or fuels is possible, but catalyst is necessary to lower necessary energy and promote not just reduction but also reformation into valuable materials such as methane. Catalyst material should hold such properties as high electrochemical stability and abundance. TiO₂ is such material, but for successful CO₂ reformation, it requires additional catalyst, such as graphene.

Few layer graphene nanoparticles were synthesized from graphite waste in electrochemical exfoliation process. Sifted particles were reduced in Argon/Hydrogen atmosphere. Various loading of few layer graphene nanoparticles was applied on anodic TiO₂ nanotubes. Morphology, structure, optical and photocatalytic properties were investigated. Based on the results conclusions on synthesis and loading influence on photophysical properties were drawn. First results of UL ISSP financed project for young Researchers and scientists are presented.

The financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2018/9 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged

AR SLĀPEKLI FUNKCIONALIZĒTA GRAFĒNA SINTĒZE, TĀ ĪPAŠĪBU IZPĒTE UN PIELIETOŠANA NO₂ GĀZU SENSORIKAI

Maksims Čižikovs¹, Pēteris Lesničenoks², Ingars Lukoševičs², Jānis Kleperis²

¹*Rīgas Franču licejs*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Mūsdienu pilsētās viens no kaitīgākajiem piesārņojumiem gaisā, kas rodas no fosilā kurināmā, piemēram, transporta izplūdes gāzēm, ir NO₂, kas spēj cilvēkam izraisīt veselības problēmas jau pie 4 ppm lielas koncentrācijas. Lai ierobežotu šīs gāzes saskari ar iedzīvotājiem, tiek meklēti pietiekami jutīgi un lēti gāzu sensora materiāli brīdināšanas sistēmām, kuras var izvietot daudzās vietās pilsētā.

Darba gaitā elektroķīmiski atslāņots grafīts tiek funkcionalizēts ar slāpekli komerciālā mikroviļņu krāsnī dažādos slāpekli saturošos šķīdumos. Šie paraugi ir salīdzināti arī ar termiski sintezētiem materiāliem. Sintezētie materiāli tiek uzklāti uz keramikas pamatnes, kurai virspusē ir ķemmes veida elektrodi un apakšpusē sildītājs.

Iegūtajiem paraugiem tiek mērīta pretestības izmaiņa pie dažādām NO₂ koncentrācijām un sensora pamatnes temperatūras. Atrasts, ka šobrīd mazākā koncentrācija, ko materiāls spēj detektēt ir 350 ppm, pie kuras atbilde ir 3% liela, bet tiek strādāts pie plānāka pārklājuma iegūšanas un jutības robežas pazemināšanas. Pie tam konstatēts, ka elektriskās pretestības izmaiņas atgriezeniskums ir būtiski atkarīgs no temperatūras. Temperatūra virs 150 °C nodrošina NO₂ klātbūtnes radītās pretestības izmaiņas atjaunošanos tīra gaisa atmosfērā. Apkopojot rezultātus, ir izdarīti secinājumi par sensora materiāla praktisku pielietojumu mūsdienu pilsētās.

SYNTHESIS OF NITROGEN DOPED GRAPHENE, STUDY OF IT'S PROPERTIES AND USE IN NO₂ GAS SENSOR

Maksims Cizikovs¹, Peteris Lesnichenoks², Ingars Lukosevics², Janis Kleperis²

¹*Riga French Liceium*

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

One of the most dangerous air pollutants in cities is NO₂ that comes from fossil fuels, namely exhaust gases. This pollutant can cause health problems at concentrations as low as 4 ppm. Sensitive and cheap gas sensor materials are required for successful limitation of this pollutant in warning systems that can be placed all over the city.

In this work electrochemically exfoliated graphite is doped with nitrogen by the means of commercial microwave. These samples are compared with thermally synthesized materials. These materials are deposited on ceramic substrate with comb-like electrodes on one side and heater on the other.

Electric resistance is measured at different NO₂ concentrations and temperature of ceramic substrate. Sample sensitivity is measured to be 3% at concentrations down to 350 ppm. Further work involves creation of thinner coating and increasing the sensitivity limit. Recovery is found to be dependent on temperature of sensor. Temperatures above 150 °C have shown sufficient recovery of sensors resistance.

Based on the experimental results the practical application of these gas sensing materials is being considered.



The financial support of Latvian Science Council project No 2018-1-0194 is greatly acknowledged.

^{137}Cs UN ^{90}Sr PIESĀRŅOJUMA NOTEIKŠANA MEŽA EKOSISTĒMĀ

Daina Riekstina, Tamāra Krasta, Ļubova Simonova
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Černobiļas kodolspēkstacijas avārijas rezultātā mākslīgie radionuklīdi ^{137}Cs un ^{90}Sr piesārņojuma veidā nonāca Latvijas un tās kaimiņvalstu meža ekosistēmā. Pēdējos gados, pieaugot koksnes kurināmā, it īpaši šķeldas, izmantošanai, rodas interese par mākslīgo radionuklīdu piesārņojuma līmeni koksnes kurināmajos materiālos un kurināšanas rezultātā radušos pelnos.

Darbā analizēti Latvijas izcelsmes kurināmie materiāli. ^{90}Sr koncentrācijas analīze priežu un egļu skužās, kā arī dažādu koku mizā atkarībā no augstuma virs zemes veikta, radioķīmiski izdalot ^{90}Sr sabrukšanas meitas produkta izotopu ^{90}Y un nosakot tā aktivitāti pēc Čerenkova radiācijas mērījumiem ar Packard LSC TRI-CARB2770 beta spektrometru. Salīdzinot ^{90}Sr koncentrāciju priežu, egļu un bērzu mizās dažādos augstumos, konstatēts, ka visaugstākā ^{90}Sr koncentrācija ir egļu mizā un viszemākā – bērzu mizā, pie kam maksimālā ^{90}Sr koncentrācija tika novērota atbilstošā koka stumbra $\sim 3/4$ augstumā. Izmantojot gamma-spektrometrijas metodi, veikti arī ^{137}Cs koncentrācijas mērījumi egļu skuju un priežu koksnes paraugos. Darbā izvērtēti arī attiecīgās koksnes pārpalnošanas koeficienti.

Apkopojot rezultātus, secināts, ka pētītajos Latvijas izcelsmes koksnes materiālos ^{137}Cs un ^{90}Sr koncentrācijas nepārsniedz normatīvajos aktos pieļaujamo līmeni.

^{137}Cs AND ^{90}Sr POLLUTION OF FOREST ECOSYSTEMS

Daina Riekstina, Tamara Krasta, Lubova Simonova
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Following the Chernobyl nuclear power plant incident, the forest ecosystems of Latvia and its neighbouring countries have been polluted with artificial radionuclides ^{137}Cs and ^{90}Sr . Presently, when the use of forest resources, especially wooden chips, for heat production increases, one observes a growing interest with regards to the artificial radionuclide pollution of wood fuel materials and ashes remaining after the combustion.

The Latvian origin wood fuel materials have been analyzed. ^{90}Sr content analysis in the needles of coniferous trees, as well as in the bark of various trees depending on the height above the ground, has been performed via the radiochemical separation of ^{90}Sr decay product ^{90}Y and determination of its activity via Cherenkov radiation measurements using Packard LSC TRI-CARB2770 beta spectrometer. Comparison of ^{90}Sr activity in the bark of pine, spruce and birch trees has shown that the highest ^{90}Sr concentration is observed in the bark of spruces, while the lowest – in the bark of birches. Maximal ^{90}Sr concentration was determined at $\sim 3/4$ height of the corresponding tree trunk. The ^{137}Cs activity concentration measurements in spruce tree needles and pine tree wood samples have been performed using gamma-spectrometry method. Corresponding wood combustion coefficients have been considered as well.

It has been concluded that ^{137}Cs and ^{90}Sr activity concentration in the studied Latvian origin wood samples is below the levels allowed by regulations.

ĀTRO ^{12}C JONU RADĪTIE STRUKTŪRAS DEFEKTI UN CIETINĀŠANĀS EFEKTS LiF KRISTĀLOS ĀRPUS IMPLANTĀCIJAS ZONAS

Rolands Grants, Ilze Manika, Aleksejs Kuzmins
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Pētīta struktūras defektu veidošanās ar 133MeV ^{12}C joniem (doza $2,5 \times 10^{13}$ joni/cm²) apstarotos LiF kristālos, izmantojot dislokāciju kodināšanas, atomspēka mikroskopijas, nanoindentēšanas, XRD, optiskās spektroskopijas un fotoluminiscences metodes. Rezultāti rāda intensīvu F-un F_n- tipa krāsu centru un dislokāciju veidošanos, cietībai sasniedzot piesātinājuma raksturīgo ~3,5GPa līmeni. Atkvēlināšanas eksperimenti uzrādīja F- centru izzušanu temperatūrās virs 520 K, dislokācijām un cietināšanās efektam izzūdot tikai pie 810K, kas liecina par dislokāciju dominējošo lomu cietināšanās efektā. Efekti dislokāciju kustīgumā, cietībā un fotoluminiscencē novēroti ne tikai jonu implantācijas zonā (dziļums līdz 248 μm), bet arī ~20 μm joslā aiz tās. Salīdzinājumam minams, ka šāds efekts LiF kristālos netika novērots zemas enerģijas (<21 MeV) ^{12}C joniem kā arī vairumam citu vieglo un smago jonu. Rezultātu kopums apliecina cietināšanās efektu ārpus implantācijas zonas, kas var tikt saistīts ar ātro ^{12}C jonu kodolreakcijā ar litiju radīto sekundāro β starojumu [1].

[1] V.R. Regel *et al*, Radiation effects **82** (1984)157-167.

STRUCTURAL DAMAGE AND HARDENING BEYOND THE RANGE OF SWIFT ^{12}C IONS IN LiF CRYSTALS

Rolands Grants, Ilze Manika, Aleksejs Kuzmins
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The damage behavior in LiF crystals irradiated with 133 MeV ^{12}C ions at fluence $2,5 \times 10^{13}$ ions.cm⁻² has been investigated by means of dislocation etching, nanoindentation, XRD, optical spectroscopy and photoluminescence. The measurements were performed on profile surfaces obtained by cleaving the samples along the direction of the ion beam. The manifestation of hardening, photoluminescence and decrease in dislocation mobility was observed not only inside the irradiated zone (depth 248 μm) but also in the region ~20 μm beyond the ion range. The results show intense formation of F- and F_n- type color centers and dislocations. Annealing experiments indicate disappearance of F-centers at 520K while a full recovery of dislocation structure and hardness is reached at 810K. The result confirms a dominating role of dislocations in ion induced hardening. No effects beyond the range were observed for low energy (<21 MeV) ^{12}C ions as well as for most other light and heavy projectiles. The results obtained confirm the manifestation of hardening effect beyond the range and are in line with the hypothesis [1] that possible cause of the damage might be a nuclear reaction between ^{12}C ions and lithium which leads to formation of unstable ^{14}C isotope emitting β⁻ electrons.

[1] V.R. Regel *et al*, Radiation Effects **82** (1984)157-167.

JET KODOLSINTĒZES REAKTORA DIVERTORA MATERIĀLU ANALĪZE, IZMANTOJOT TEMPERATŪRAS-QMS METODI

Mihails Halitovs, Gunta Ķizāne
Latvijas Universitātes Ķīmiskās fizikas institūts

Iepriekš izmantotās divertora materiālu analīzes metodes – pilnīga oksidēšana un šķidrā scintilācija – sniedza informāciju par tritija saturu un sadalījumu materiālos, taču nesaturēja datus par citiem kodoldegvielas komponentiem – deitēriju un tā savienojumiem, hēliju. Temperatūras-QMS metode ļauj veikt materiālu pētījumus kodolsintēzei pielīdzināmos apstākļos (vakuums, augsta temperatūra).

Tika izpētīta JET ILW ar volframu pārklātu CFC divertora ķieģeļu paraugu sērija, lai iegūtu informāciju par materiālā esošajiem degvielas komponentiem un to desorbētajiem daudzumiem karsēšanas laikā (līdz 1270 K) vakuumā ($\sim 1 \cdot 10^{-7}$ mbar). Eksperimentos izmantota *Hositrad MGT 6-300 Multi Gas Analyser with Thermal Desorption* iekārta. Iekārta darbojas ar diviem QMS detektoriem - 1-6 amu ar 0.02 amu izšķiršanu un 1-300 amu ar 0.1 amu izšķiršanu.

Iegūtie rezultāti viennozīmīgi pierāda H, D, T daļiņu, to savienojumu, kā arī ^3He un organisko savienojumu klātbūtni. Desorbēto gāzveida savienojumu daudzumi ir salīdzināmi, taču pilnīgai kvantificēšanai ir nepieciešama tālāka kalibrēšana.

ANALYSIS OF JET FUSION DEVICE DIVERTOR MATERIALS USING THERMAL-QMS ANALYSIS

Mihails Halitovs, Gunta Kizane
Institute of Chemical Physics, University of Latvia

Previously the methods used to analyse divertor materials – full combustion and liquid scintillation – gave the information on tritium content and distribution within the material yet did not contain any data on other fusion fuel species and side products – deuterium and its components, helium. Thermal-QMS analysis allows to analyse materials at fusion device relevant conditions (vacuum, high temperature).

A series of W-coated CFC tile samples of JET ILW divertor were analysed in order to obtain information about containing species and relevant quantities of substances desorbed under heating (up to 1270 K) in vacuum ($\sim 1 \cdot 10^{-7}$ mbar). *Hositrad MGT 6-300 Multi Gas Analyser with Thermal Desorption* was used in the experiments. Device operates with two QMS detectors – 1-6 amu with 0.02 amu resolution and 1-300 amu with 0.1 amu resolution.

The results obtained prove distinctive presence of H, D, T particles and their molecular forms along with ^3He and organic residues. Quantification of substances desorbed is comparable yet still requires further calibration in order to fully quantify the desorbed amounts of gaseous species.

This work has been carried out within the framework of the EUROfusion Consortium and has received funding from the Euratom research and training programme 2014-2018 and 2019-2020 under grant agreement No 633053. The views and opinions expressed herein do not necessarily reflect those of the European Commission.

22. februāris

SPEKTROSKOPIJA

JAUNĀS LUMINISCENCES IEKĀRTAS ATTĪSTĪBA MAX IV LABORATORIJAS FINESTBEAMS SINHROTRONA LINIJĀ

Vladimirs Pankratovs^{1,2,3}

¹*Cietvielu Fizikas Institūts, Latvijas Universitāte*

²*MAX IV Laboratory, Lund University*

³*National University of Science and Technology (MISIS)*

FinEstBeAMS (Somijas un Igaunijas atmosfēras un materiālu zinātnes līnija) ir jauna materiālzinātnes līnija, kura uzstādīta 1.5 GeV uzglabāšanas gredzenā MAX IV laboratorijā Lundā, Zviedrijā. Tā ir veidota, pamatojoties uz sinhrotrona gaismas monohromatizāciju, kas ļauj aptvert ārkārtīgi plašu ierosmes enerģiju diapazonā no ultravioletajiem līdz mīkstajiem rentgena stariem (4.5–1450 eV). Jaunā mobilā optiskā un luminiscences spektroskopijas eksperimentālā stacija ir nodota ekspluatācijā ar dizainu, kas gūst labumu no augstas plūsmas elipsveida polarizējošā undulatora gaismas avota priekšrocībām. Mēs ziņojam par luminiscences eksperimentālās stacijas dizainu, tā tehnisko realizāciju un sasniegumiem. Īpaša uzmanība tiek pievērsta eksperimentālajiem izaicinājumiem luminiscences spektroskopijai ierosināšanas apstākļos. Pirmie iegūtie luminiscences rezultāti parāda uzticamu modernizētās iluminiscences ekārtas darbošanos *FinEstBeAMS*.

PROGRESS IN DEVELOPMENT OF A NEW LUMINESCENCE SETUP AT THE FINESTBEAMS BEAMLINE OF THE MAX IV LABORATORY

Vladimir Pankratov^{1,2,3}

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*MAX IV Laboratory, Lund University*

³*National University of Science and Technology (MISIS)*

FinEstBeAMS (Finnish-Estonian Beamline for Atmospheric and Material Science) is a new materials science beamline at the 1.5 GeV storage ring of the MAX IV Laboratory in Lund, Sweden. It has been built based on grazing incidence monochromatization of synchrotron light, which allows to cover a remarkably wide excitation energy range from ultraviolet to soft x-rays (4.5–1450 eV). A new mobile optical and luminescence spectroscopy endstation has been commissioned with design benefiting from the advantages of a high flux elliptically polarizing undulator light source. We report on the design of the luminescence endstation, its technical realization and performance achieved so far. Special attention is paid to the experimental challenges for luminescence spectroscopy under grazing incidence excitation conditions. The first luminescence results obtained demonstrate a reliable performance of the advanced luminescence setup at *FinEstBeAMS*.

Eu³⁺ SADALĪJUMS CAURSPĪDĪGĀ OKSIFLUORĪDU STIKLA KERAMIKĀ: RENGENSTARU DIFRAKCIJAS UN ELEKTRONU PARAMAGNĒTISKĀS REZONANSES PĒTĪJUMS

Andris Antuzevičs, Guna Krieķe, Elīna Pavlovska, Uldis Rogulis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Par caurspīdīgām stikla keramikām kā daudzsoļiem optiskajiem materiāliem Scopus datubāzē ir atrodams vairāk nekā 1000 publikācijas. Tikai dažās no tām optiskās īpašības raksturotas korelācijā ar magnētiskās rezonanses spektroskopijas datiem, noteikts aktivatoru sadalījums matricā un novērtēta materiāla efektivitāte.

Referātā tiks dots pārskats par fundamentālo pētījumu projektu, kurā, izmantojot modernas optiskās un magnētiskās rezonanses spektroskopijas metodes, tiek attīstītas un raksturotas ar retzemju joniem aktivētas nanostrukturētas oksifluorīdu stikla keramikas.

Projekta ietvaros sintezētas ar eiropiju aktivētas stikla keramikas, kas satur CaF₂:Eu³⁺ kristālisko fāzi. Paraugu rentgendifrakcijas analīzes rezultāti parāda, ka Eu³⁺ iebūvēšanos nanokristālos var novērtēt no kristālrežģa konstantes izmaiņām. Pētījumiem ar elektronu paramagnētisko rezonanses (EPR) metodi kā paramagnētiska zonde paraugos tiek ievadīts gadolīnijs. CaF₂:Gd³⁺ EPR spektru sīkstruktūra mainās atkarībā no Eu³⁺ koncentrācijas paraugos. Šo efektu var izmantot, lai noteiktu Eu³⁺ sadalījumu stikla keramikas kompozītmateriālā.

Eu³⁺ DISTRIBUTION IN TRANSPARENT OXYFLUORIDE GLASS CERAMICS: X-RAY DIFFRACTION AND ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE ANALYSIS

Andris Antuzevics, Guna Krieķe, Elina Pavlovska, Uldis Rogulis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

In more than 1000 publications in the Scopus database transparent glass ceramics are investigated and presented as promising optical materials. In only a few of them optical properties are characterized in correlation with magnetic resonance spectroscopy data, the activator distribution in the matrix is determined and the efficiency of the material is estimated.

This report will review the fundamental research project, where state of the art optical and magnetic resonance spectroscopy methods are employed to develop and characterize rare earth ion doped oxyfluoride glass ceramics.

In the framework of the project europium doped glass ceramics containing CaF₂:Eu³⁺ crystalline phase have been synthesized. Lattice constant determined from X-ray diffraction analysis allows to calculate the incorporation efficiency of Eu³⁺ ions in the nanocrystals. For investigations with the electron paramagnetic resonance (EPR) method gadolinium paramagnetic probe has been introduced in the host. The CaF₂:Gd³⁺ EPR spectra fine structure is dependent on Eu³⁺ content in the samples. This effect can be used to determine the distribution of Eu³⁺ ions in the glass ceramic composite material.

The financial support of Latvian Council of Science grant LZP-2018/1-0335 “Novel transparent nanocomposite oxyfluoride materials for optical applications” is greatly acknowledged.

AUGŠUPPĀRVEIDOTĀ LUMINISCENCE β -NaErF₄ SATUROŠĀ STIKLA KERAMIKĀ

Guna Kriekē, Andris Antuzevičs, Māris Springis, Uldis Rogulis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Caurspīdīga oksifluorīdu stikla keramika ir kompozītmateriāls, kas sastāv no oksīdu stikla matricā izkliedētiem nanokristāliskiem fluorīdiem. Pateicoties fluorīdu kristālu zemajai fononu enerģijai, šim materiālam ir raksturīgas labākas spektroskopiskās īpašības nekā oksīdu stiklam.

Pētījumā iegūta jauna, caurspīdīga stikla keramika, kas satur β -NaErF₄ nanokristālus. Izmantojot hidrotermisko metodi, sintezēts mikrokrīstālisks β -NaErF₄, kura spektroskopiskās īpašības salīdzinātas ar stikla keramiku.

Abos materiālos novērota intensīva augšuppārveidotā luminiscence. Straujāka luminiscences dzišana ir noteikta stikla keramikā. Tā liecina par papildus bezistarojuma procesiem, kas varētu būt enerģijas migrācija no nanokristāliem uz stikla matricu. Abos materiālos pētīta aktivatora jonu lokālā apkārtnē. Rezultāti liecina, ka β -NaErF₄ eksistē trīs atšķirīgas Er³⁺ jonu pozīcijas. Divas no tām saistītas ar β -NaErF₄ raksturīgajām retzemju jonu pozīcijām, savukārt trešā pozīcija varētu būt saistīta ar nesakārtotību šajās divās pozīcijās, pamīšus aizpildīto Na⁺ jonu pozīciju rezultātā.

UPCONVERSION LUMINESCENCE IN TRANSPARENT GLASS CERAMICS CONTAINING β -NaErF₄

Guna Kriekē, Andris Antuzevics, Maris Springis, Uldis Rogulis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Transparent oxyfluoride glass ceramics are composite materials, which consist of a nanocrystalline fluoride phase distributed in an oxide glass matrix. Due to low phonon energy of fluoride crystals, these composites offer superior spectroscopic properties in comparison to precursor glasses.

In this research, novel transparent glass ceramics containing β -NaErF₄ nanocrystals were prepared. Using hydrothermal synthesis, microcrystalline β -NaErF₄ was prepared and compared to glass ceramics.

In both materials intense upconversion luminescence was observed. A considerably faster luminescence decay was detected in glass ceramics. It indicates the presence of additional non-radiative processes assumed to be energy migration from nanocrystals to glass matrix. The local environment was investigated in both materials. The results indicate the existence of three distinct Er³⁺ positions in the β -NaErF₄. Two of these positions are attributed to Er³⁺ in rare earth positions characteristic to β -NaErF₄ and the third could be associated with the distortion in these two positions due to random occupation of semi-filled Na⁺ positions.

The financial support of Latvian Council of Science grant LZP-2018/1-0335 and Arnis Riekstins "MikroTik" donation is greatly acknowledged. Donations are administered by the University of Latvia Foundation.

22. februāris

STENDA REFERĀTI

DEFEKTĪVĀ CINKA OKSĪDA STRUKTŪRAS PĒTĪJUMS

Andrejs Česnokovs¹, Deniss Grjaznovs¹, Natālija V. Skorodumova^{2,3}

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Fizikas un Astronomijas fakultāte, Upsālas Universitāte*

³*Materiālzinātnes un Inženierzinātņu fakultāte, KTH Karaliskais Tehnoloģiju Institūts*

Caurspīdīgi vadoši oksīdi (CVO) ir materiāli, kuriem piemīt elektriskā vadāmība un zema gaismas absorbcija. CVO zīmīga īpašībā ir ar dopēšanu veicināta vadītspējas kontrole. Cinka oksīds (ZnO) ir labi pazīstams un perspektīvs CVO materiāls, kuram dopēšanas ietekmē parādās n-tipa vadītspēja. Tika parādīts, ka plānajās kārtiņās no amorfā ZnO-IrO₂ parādās p-tipa vadītspēja. Pāreja no n-tipa uz p-tipa vadītspēju notiek līdz ar irīdija koncentrācijas palielināšanu.

Šajā darbā, simulējot ar irīdiju dopēto ZnO aprēķinos no pirmajiem principiem, tiek pārbaudīti nosacījumi p-tipa vadītspējas izveidošanai. Tika izrēķinātas materiāla ar dažādu defektu konfigurāciju atomārās un elektroniskās struktūras. Ir parādīts, ka vienlaicīgi ieviešot modelī gan irīdija piemaisījumu, gan starpmezglu skābekļa atomus, var panākt elektroniskā cauruma lokalizēšanos uz režģa un starpmezglu skābekļiem, kas ir p-tipa vadītspējas nepieciešamais nosacījums.

EXPLORING STRUCTURE OF DEFECTIVE ZINC OXIDE

Andrejs Česnokovs¹, Deniss Grjaznovs¹, Natālija V. Skorodumova^{2,3}

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Department of Physics and Astronomy, Uppsala University*

³*Department of Materials Science and Engineering, KTH Royal Institute of Technology*

Transparent conducting oxides (TCOs) are electrically conductive materials characterized by low absorption of light. An important property of TCOs is a controllable type of conductivity achieved through doping. Zinc oxide (ZnO) is a material that is well known for its potential as TCO and its dopant-induced n-type conductivity. It was demonstrated that the p-type conductivity occurs in amorphous ZnO-IrO₂ films. In these films, the transition from the n-type to p-type conductivity occurs in response to the concentration of iridium.

This work tests the conditions for p-type conductivity in iridium-doped ZnO through the first-principles simulation of the material. Geometric and electronic structures of the material with various configurations of defects have been calculated. It has been shown that a simultaneous presence of iridium and interstitial oxygen atoms leads to localization of electronic hole defects on both lattice and interstitial oxygens – a necessary condition for p-type conductivity.

The work has been performed under the Project HPC-EUROPA3 (INFRAIA-2016-1-730897), with the support of the EC Research Innovation Action under the H2020 Programme; in particular, A. C. gratefully acknowledges the support of Natalia V. Skorodumova and the computer resources and technical support provided by KTH-PDC.

PEROVSKĪTU NANOKUBU SLĀŅU MORFOLOĢIJA

Dmitrijs Zablockis, Vladimirs Kuzovkovs, Jevgēņijs Kotomins
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Ar osmotisko saspiešanu konsolidēto koloidālo nanokubu ansambļu veidoto mikrostruktūru raksturošana parādīja, ka šo veidojumu kolektīvās pozīcijas un orientācijas korelācijas ir ļoti jutīgas attiecībā uz dipolāro mijiedarbību klātbūtni. Ir konstatēts, ka lai gan parastas kubiskas daļiņas sakārtojās vienkāršajā kubiskajā režģī, kubiskie nanokristāli, kuriem piemīt dipolāra mijiedarbība, kvazi-līdzsvara osmotiskās saspiešanas rezultātā neizbēgami veido polikristāliskas sistēmas. Izteikta hipotēze, ka dipolu mijiedarbība, iespējams, ir jauns nesakārtotības avots kubisko koloidālo daļiņu kārtojumos.

FEATURES OF MORPHOLOGY IN GLASSY LAYERS OF PEROVSKITE NANOCUBES

Dmitry Zablotsky, Vladimir Kuzovkov, Eugene Kotomin
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Efficient ambient energy scavenging exploiting piezo-/pyroelectric properties of ABO_3 perovskites to power low-energy devices is an attractive green energy strategy. In turn, the colloidal processing of the nearly monodisperse and highly crystalline single-domain nanocubes of is a promising route to produce superlattice assemblies for integration into nanostructured ferroelectric devices [1] with improved properties. Controlling the local behaviour of nanocrystals is imperative for fabricating highly-ordered assemblies, whereas the current picture of nanoscale polarization suggests a potential presence of significant electro-dipolar interaction [2]. However, its role in the condensation of ferroelectric nanocubes remains unknown.

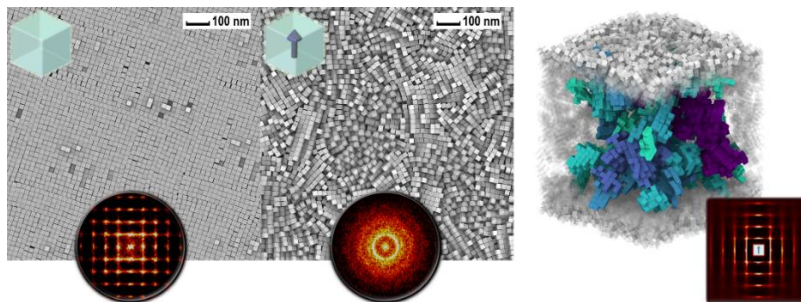


Fig.1 Osmotic pressure-induced assembly of approx. 16 000 colloidal nanocubes: simulated layer morphology containing simple nanocubes (left) and dipolar nanocubes (middle, right), inset shows wide angle virtual SAED patterns and pair probability distribution.

We will report the microstructural characterization of osmotically densified ensembles of ferroelectric nanocubes obtained via numerical simulations. Our results suggest that the long-range positional and orientational correlations seem to be highly sensitive to the presence of dipoles, which could be a challenge to produce ordered assemblies of some nanoperovskites.

References

1. Kato et al., Appl. Phys. Lett. 101, 012901 (2012)
2. Polking et al., Nat. Mater. 11, 700–709 (2012)

AR Tb³⁺ DOPĒTĀ CeO₂ APRĒĶINI NO PIRMAJĪEM PRINCIPIEM

Andrejs Česnokovs¹, Deniss Grjaznovs¹, Jevgeņijs Kotomins^{1,2}

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Maksa Planka Cietvielu pētījumu institūts*

Atomārās un elektroniskās struktūras ar Tb dopētā CeO_{2-δ} tika izrēķinātas no pirmajiem principiem, iekļaujot Hubarda modeļa (GGA+U) stiprus korelācijas efektus. Korektajam Tb oksidēšanas pakāpju (3+ un 4+) aprakstam, dažādas Hubarda U-parametra vērtības tika vienlaicīgi piemērotas Ce un Tb joniem. Tika iegūtas vairākas konfigurācijas ar elektronu lokalizēšanos uz viena vai vairākiem katjoniem, ja līdzās Tb jonam ir skābekļa vakance (V_O). Punktveida simetrijas grupu metodes kombinācija ar grupu teorijas analīzi ļāva identificēt pamatstāvokļa konfigurāciju pārlietu elektronu lokalizācijai dažādam katjonu skaitam. Papildus tika iegūta sakarība starp V_O veidošanas Gibbsa enerģiju un temperatūru.

Pilnās enerģijas starpība starp 3+ un 4+ oksidēšanas pakāpēm ir ļoti maza, tātad šie stāvokļi var līdzāspastāvēt, nepieprasot V_O veidošanos (atšķirībā no ar Gd dopēta CeO₂). Tomēr, elektroniskā cauruma defekts, kas veidojas uz skābekļa atomiem līdztekus Tb³⁺, tika izteikti delokalizēts. Tb dopēšanas ietekmē V_O veidošanas Gibbsa enerģija pazeminās aptuveni četrkārt salīdzinājumā ar tīru CeO₂. Mazā polarona veidošanas enerģija sasniedz minimumu, ja Ce³⁺ un Tb³⁺ ir V_O tuvākie kaimiņi. Šāda konfigurācija ir saskaņā ar literatūrā aprakstītiem optiskiem mērījumiem.

FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS ON CeO₂ DOPED WITH Tb³⁺ IONS

Andrejs Česnokovs¹, Deniss Grjaznovs¹, Jevgeņijs Kotomins^{1,2}

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Max Planck Institute for Solid State Research*

Atomic and electronic structures of Tb-doped CeO_{2-δ} (ceria) have been calculated from first principles with inclusion of strong correlation effects based on the Hubbard model (GGA+U). To correctly model possible oxidation states of Tb (3+ and 4+), distinct values of Hubbard U-parameter were simultaneously applied to Ce and Tb ions. Multiple configurations have been obtained, with electrons localized on different number of cations, if the Tb ion has an oxygen vacancy (V_O) nearby. Site symmetry approach combined with the group theory analysis has been successfully applied to identify the ground state configuration for localization of excess electrons on different number of cations. Moreover, a temperature dependence of calculated Gibbs formation energy of V_O has been obtained.

The corresponding total energy difference between the 3+ and 4+ states is very small and, thus, these states can co-exist without V_O formation (unlike in Gd-doped ceria). However, a hole defect on oxygen atoms to compensate Tb³⁺ is distinctly delocalized. Gibbs formation energy of V_O due to Tb doping is reduced by almost a factor of four, in comparison with the pure CeO₂. The lowest formation energy for the small polaron corresponds to a configuration in which Ce³⁺ and Tb³⁺ ions are the nearest neighbors to V_O. Such configuration is consistent with the optical measurements from the literature.

The financial support of LZP-2018/1-0147 grant is greatly acknowledged.

Fe UN Co JONU MAGNĒTISKO STĀVOKĻU RAKSTUROŠANA (Ba,La)(Fe,Co)O₃ PEROVSKĪTOS

Dāvis Zavickis, Guntars Zvejnieks, Deniss Grjaznovs, Jevgenijs Kotomins
Cietvielu fizikas institūts, Latvijas Universitāte

Vienu no videi draudzīgām enerģijas ražošanas tehnoloģijām, kas balstās uz cietvielu oksīdu degvielas šūnām, raksturo augstas darba temperatūras. Tās samazinājums līdz vidējam temperatūru diapazonam (300-600°C) ļautu samazināt izmaksas, būtiski paplašinot tehnoloģisko pielietojumu. Protonus vadošās keramiskās degvielas šūnas (PCFC) piedāvā būtisku alternatīvu, demonstrējot augstāku jonisko (un tādējādi protonu) vadāmību. Pretēji elektrolītu materiāliem, optimālos katodu materiālus vēl nepieciešams identificēt, meklējot cieto šķīdumu sastāvu ar pietiekami augstu elektronu un protonu vadītspēju. Nesenos eksperimentālos pētījumos literatūrā kā PCFC katoda materiāls optimizēts (Ba,Sr,La)(Fe,Co,Zn,Y)O_{3-δ} perovskīts.

Pirmajā darba posmā, izmantojot blīvuma funkcionāla (DFT) skaitliskos aprēķinus, mēs veidojam datubāzi, balstoties uz kubiskiem tilpuma (Ba,La)(Fe,Co)O₃ prototipiskajiem perovskītiem, kas ļauj identificēt Fe un Co atomu magnētiskos stāvokļus. Tiek rēķinātas augstas, vidējas uz zemas spinu stāvokļu konfigurācijas, fiksējot kopējo sistēmas spinu. Modelī izmantotais Ba(Fe,Co)O₃ cietais šķīdums, kas līdzīgs optimālam katoda materiālam, tiek izmantots, lai pārbaudītu identificētos magnētiskos stāvokļus. Darba gaitā tiek apspriesta iegūto rezultātu stabilitāte un atkarība no citiem aprēķinu parametriem.

Šis darbs īstenots ar zinātniskā granta LZP-2018/1-0147 finansiālo atbalstu.

CHARACTERIZATION OF Fe AND Co ION MAGNETIC STATES IN (Ba,La)(Fe,Co)O₃ PEROVSKITES

Davis Zavickis, Guntars Zvejnieks, Denis Gryaznov, Eugene Kotomin
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

One of environmentally friendly energy production technologies is based on the solid oxide fuel cells operating at high temperatures. Decrease of their operational temperature to an intermediate range (300-600 °C) would lead to a cost reduction and thus pave a way for a wider technology application. Protonic ceramic fuel cells (PCFCs) represent an important alternative demonstrating higher ionic (thus, protonic) conductivity. In contrast to an electrolyte material, the optimal cathode material still has to be found, by identifying solid solution compositions with sufficiently high electronic and protonic conductivity. Recent experimental investigations in the literature optimized (Ba,Sr,La)(Fe,Co,Zn,Y)O_{3-δ} perovskites as the cathode material for PCFC.

As a first step, in this work, using density functional (DFT) calculations, we build a database based on the cubic prototypical bulk (Ba,La)(Fe,Co)O₃ perovskites that allow us to identify Fe and Co atom magnetic states. High, intermediate and low spin states are calculated by locking the total system spin. The model system of Ba(Fe,Co)O₃ solid solution, that mimic the optimal cathode material, is used to test the identified magnetic states. Stability of the obtained results as well as their dependence on calculation parameters is discussed.

The financial support of LZP-2018/1-0147 grant is greatly acknowledged.

TITĀNA PIEMAIŠĪJUMU *AB INITIO* PĒTĪJUMS ODS TĒRAUDOS

Jurijs Mastrikovs¹, Maksims Sokolovs¹, Jurijs Žukovskis¹, Jevgenijs Kotomins¹,
Pavels Vladimirovs²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Karlsruhes Tehnoloģiju institūts*

Izkliedēto oksīdu stiprinātie (Oxides Dispersed Strengthened, ODS) tēraudi ir pazīstami ar augstu termisko stabilitāti un radiācijas pretestību, kas ir būtiski progresējošiem atomkodola šķelšanas un nākotnes kodolsintēzes reaktoriem. ODS tērauda stabilitāte lielā mērā ir atkarīga no oksīda daļiņu lieluma, formas un telpiskā sadalījuma. Y_2O_3 ir oksīda daļiņu galvenā sastāvdaļa, ko ieskauj dzelzs matrica. Dzelzs tomēr nav vienīgais Y_2O_3 oksīda daļiņu mijiedarbības komponents. Komerciāli ražotā tērauda sakausējumos ir arī citi metāli. Viens no šādiem metāliem ir titāns.

Eksperimentālie darbi liecina, ka titāns koncentrējas uz robežām starp ODS daļiņu un matricu. Pētījumā ar dzelzs matricu mēs modelējam titāna izšķīdušo atomu savstarpējo mijiedarbību, kā arī citus defektus, piemēram, dzelzs vakances, itrija un skābekļa šķīdinātos atomus. Iegūtie rezultāti parādīja, ka Ti atomi viegli aizvieto Fe atomus un aktīvi mijiedarbojas ar ODS daļiņām.

Šis pētījums tika veikts EUROfusion Consortium ietvaros un finansēts no Euroatom pētījumu un apmācības programmas (2014-2018) granta Nr. 633053. Šeit izteikti uzskati un viedokļi var nesakrist ar Eiropas Komisijas viedokļiem.

AB INITIO STUDY OF TITANIUM IMPURITIES IN ODS STEELS

Yuri A. Mastrikov¹, Maksim N. Sokolov¹, Yuri F. Žukovskii¹, Eugene A. Kotomin¹,
Pavel V. Vladimirov²

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Karlsruhe Institute of Technology*

Oxide Dispersion-Strengthened (ODS) steels are known for their high thermal stability and radiation resistivity, which are essential for advanced fission and future fusion reactors. Stability of ODS steels strongly depends on the size, shape and spatial distribution of oxide particles. Y_2O_3 is the main component of oxide particles, surrounded by iron host matrix. Iron, however, is not the only component Y_2O_3 oxide particle interacts with. In commercially produced steel alloys other metals are presented as well. One of such metals is titanium.

Experimental works suggest that titanium concentrates on the border between the ODS particle and the host matrix. In our study in iron host matrix we model self-interactions of solute atoms of titanium as well as other defects such as iron vacancy, yttrium and oxygen solute atoms. Obtained results demonstrated that Ti atoms easily substitute host Fe atoms and actively interact with ODS particles.

This work has been carried out within the framework of the EUROfusion Consortium and has received funding from the Euratom research and training programme 2014-2018 under grant agreement No 633053. The views and opinions expressed herein do not necessarily reflect those of the European Commission.

PEROVSKĪTU CIETO ŠĶĪDUMU UN HETEROSTRUKTŪRU DATORMODELĒŠANA NO PIRMAJĪEM PRINCIPIEM

Leonīds Rusevičs, Guntars Zvejnieks, Eugene A. Kotomin
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Izaicinājumu problēma ir svina nesaturošu materiālu elektromehānisko īpašību uzlabošana, kas ļauj savstarpēji pārveidot mehānisko un elektrisko enerģiju, kuru var izmantot dažādos komerciālos nolūkos, tostarp enerģijas ražošanā. Materiālu tehnoloģijas attīstībai ir nepieciešami jauni kompleksie materiāli ar uzlabotām segnetoelektriskajām un pjezoelektriskajām īpašībām. Piemēram, lai optimizētu biežāk lietotā BaTiO₃ (BTO) perovskīta pjezoelektriskās īpašības, var izmantot Ba jonu ķīmisko aizvietošanu ar izovalentiem piemaisījumiem.

Šajā darbā mēs izskatījām (Ba,Sr)TiO₃ [1, 2] un (Ba,Ca)TiO₃ cietos šķīdumus. Tiek prezentēti un apspriesti elektromehānisko īpašību pirmo principu aprēķinu rezultāti. Superšūnas aprēķini tika veikti ar CRYSTAL14 kodu atomu orbitāļu lineārās kombinācijas (LCAO) tuvinājumā, izmantojot divus blīvuma funkcionāla teorijas (DFT) hibrida funkcionāļus. Segnetoelektriskajā fāzē tika pētīti dažādi ķīmiskie sastāvi (piemaisījuma/Ba attiecība) un telpiskie izkārtojumi (piemaisījumu atomu atrašanās vietas superšūnā). Cieto šķīdumu rezultātus salīdzina ar STO/BTO heterostruktūrām (superrežģi) [2].

Šis pētījums tika veikts ar M-ERA-NET HarvEnPiez projekta finanšu atbalstu.

COMPUTER SIMULATIONS OF PEROVSKITE SOLID SOLUTIONS AND HETEROSTRUCTURES FROM FIRST PRINCIPLES

Leonid L. Rusevich, Guntars Zvejnieks, Eugene A. Kotomin
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

An enhancement of electromechanical properties of lead-free materials, which allow mutual conversion of mechanical and electrical energies and may be used for different commercial applications, including energy harvesting, is the challenging problem. Progress in material engineering requires new complex materials with improved ferroelectric and piezoelectric properties. For example, to optimize the piezoelectric properties of the commonly used BaTiO₃ (BTO) perovskite, the chemical substitution of Ba ions by isovalent dopants may be used.

In this work, we considered (Ba,Sr)TiO₃ [1, 2] and (Ba,Ca)TiO₃ solid solutions. The results of the first-principles computations of electromechanical properties are presented and discussed. Supercell calculations were performed with CRYSTAL14 code within the linear combination of atomic orbitals (LCAO) approximation, using three advanced hybrid functionals of the density-functional-theory (DFT). Different chemical compositions (dopant/Ba ratio) and spatial arrangements (positions of dopant atoms in supercell) are considered for the ferroelectric phase. Results for solid solutions are compared with those for STO/BTO heterostructures (superlattices) [2].

The financial support of M-ERA-NET HarvEnPiez project is greatly acknowledged.

1. L.L. Rusevich, G. Zvejnieks, A. Erba, R. Dovesi, E.A. Kotomin, *J. Phys. Chem. A* 2017, **121**, 9409.
2. L.L. Rusevich, G. Zvejnieks, E.A. Kotomin et al., *J. Phys. Chem. C* 2019, **123**, 2031.

DEFEKTU ANIHILĀCIJAS MODELĒŠANA APSTAROTAJOS OKSĪDOS

Vladimirs Kuzovkovs¹, Anatolijs Popovs¹, Alexander Lushchik², Jevgenijs Kotomins¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Fizikas institūts, Tartu Universitāte*

Radiācijas izturīgie oksīdi - Al_2O_3 un $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ - ir ļoti svarīgi funkcionālie un optiskie materiāli kodolsintēzes reaktoriem. Mēs analizējam F tipa centru anihilācijas kinētiku pēc elektronu, smago jonu vai neitronu apstarošanas. Šo procesu ietekmē starpmezglu skābekļa jonu O_i mobilitāte, kas ir daudz augstāka par F centru mobilitāti: F centru anihilācija sākas pie 500-700 K temperatūras, kad gan F, gan F^+ centri ir praktiski nekustīgi, pateicoties rekombinācijai ar mobiliem O_i defektiem. Pierādīts, kā F-anulācijas līkņu formu nosaka divi kontrolparametri: aktivācijas enerģija E_a un efektīvs pirmseksponeciālais faktors D_0 , un tā lielā mērā ir atkarīga no apstarošanas apstākļiem. Atbilstošās migrācijas enerģijas iegūtas no oriģinālajiem mērījumiem un literatūras datiem par anihilācijas kinētiku elektronu, neitronu un jonu apstarotajos materiālos. Iegūtie rezultāti tiek salīdzināti ar nesen veiktajiem starpmezglu skābekļa migrācijas *ab initio* aprēķiniem. Īpaša uzmanība tiek pievērsta radiācijas dozes ietekmei un korelācijai starp E_a un D_0 parametriem (Mejera-Neldela (Meyer-Neldel) noteikums)).

Šis pētījums ir veikts ar Eurofusion Enabled Research projekta finansiālo atbalstu.

MODELLING OF DEFECT ANNEALING IN IRRADIATED OXIDES

Vladimir Kuzovkov¹, Anatoli Popov¹, Alexander Lushchik², Eugene Kotomin¹

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Institute of Physics, University of Tartu*

The radiation-resistant oxides- Al_2O_3 and $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ - are very important functional and optical materials for fusion reactors. We analysed the kinetics of the F-type center annealing after electron, heavy ions or neutron irradiation. This process is controlled by the interstitial oxygen ion O_i mobility, which is much higher than that of the F centers: the F center annealing begins at temperatures 500-700 K, when both F and F^+ centers are practically immobile, due to the recombination with mobile O_i defects. It is demonstrated how the shape of the F-annealing curves is determined by two control parameters: E_a and effective pre-exponential factor D_0 , and strongly depends on irradiation conditions. The appropriate migration energies were obtained from original measurements and literature annealing kinetics for electron, neutron and ion irradiated materials. The results obtained are compared with recent *ab initio* calculations of interstitial oxygen migration. Special attention is paid to the effect of radiation fluences and correlation between E_a and D_0 parameters (the Meyer-Neldel rule).

The financial support of Eurofusion Enabling Research project is greatly acknowledged.

F-TIPA CENTRU TERMISKĀS ANIHILĀCIJAS SALIDZINĀJUMS NEITRONU APSTAROTĀ UN TERMOĶĪMISKI APSTRĀDĀTĀ BeO

Anatolijs Popovs, Jevgenijs Kotomins, Aleksandra Moskina, Māra Putniņa,
Vladimirs Kuzovkovs

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Pret radiāciju izturīgs binārais oksīds BeO ir viens no ļoti svarīgiem materiāliem, ko izmanto kodolsintēzes reaktoros. Šajā darbā mēs analizējam F tipa un V tipa centru anihilācijas kinētiku BeO pēc neitronu apstarošanas. F tipa centru kinētika tika uzskatīta par bimolekulāru procesu ar vienādām viens otru papildinājušo F un O_i defektu koncentrācijām. Šo procesu kontrolē starpmezglu skābekļa jonu mobilitāte, kas ir daudz augstāka par F centru mobilitāti. Īpaša uzmanība tiek pievērsta difūzijas kontrolētās F centru termiskās anihilācijas ar neitroniem apstarotajā BeO detalizētam salīdzinājumam ar līdzīgiem datiem, kas iegūti MgO, Al₂O₃ un MgAl₂O₄ [1-3]. Visbeidzot, mēs izpētījām arī F-centru anihilācijas kinētiku termokīmiski apstrādātajos BeO kristālos. Iegūtā aktivācijas enerģija ļauj novērtēt gan iekšējo F-centra migrācijas enerģiju, gan arī nosacījumus metāla koloīdu veidošanai BeO.

Šis pētījums ir veikts ar “Eurofusion Enabled Research” projekta finansiālo atbalstu.

Atsauces

1. E.A.Kotomin, V.N. Kuzovkov, A.I. Popov et al. Nucl. Instr. Meth. B 374(2016) 107.
2. E.A. Kotomin, V.N. Kuzovkov, A.I. Popov et al. J. Phys Chem A 122 (2018) 28.
3. V.N. Kuzovkov, E.A. Kotomin, A.I. Popov, J. Nucl. Mat. 502 (2018) 295.

COMPARISON OF F-TYPE CENTERS THERMAL ANNEALING IN NEUTRON IRRADIATED AND THERMOCHEMICALLY REDUCED BeO

Anatoli Popov, Eugene Kotomin, Aleksandra Moskina, Mara Putnina, Vladimir Kuzovkov
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The radiation-resistant binary oxide BeO, is one of the very important materials for applications in fusion reactors. In this work, we analyzed the kinetics of the F-type and V-type center annealing after neutron irradiation of BeO. F-type center kinetics were treated as the bimolecular process with equal concentrations of the complementary F and O_i defects. Such process is controlled by the interstitial oxygen ion mobility, which is much higher than that of the F centers. Special attention is paid to a detailed comparison of diffusion-controlled F center thermal annealing in neutron-irradiated BeO with similar data obtained for MgO, Al₂O₃ and MgAl₂O₄ [1-3]. Finally, we also treated the kinetics of F-center annealing in thermochemically-reduced BeO crystals. The obtained activation energy allows to evaluate both the intrinsic F-center migration energy and also the conditions for metal colloid formation in BeO.

References

1. E.A.Kotomin, V.N. Kuzovkov, A.I. Popov et al. Nucl. Instr. Meth. B 374(2016) 107.
2. E.A. Kotomin, V.N. Kuzovkov, A.I. Popov et al. J. Phys Chem A 122 (2018) 28.
3. V.N. Kuzovkov, E.A. Kotomin, A.I. Popov, J. Nucl. Mat. 502 (2018) 295.

The financial support of Eurofusion Enabling Research project is greatly acknowledged.

P3HT PLĀNO KĀRTIŅU ĪPAŠĪBU PĒTIJUMI PIELIETOŠANAI TERMOELEKTRISKO IERĪČU 3D PRINTĒŠANAI

Normunds Ralfs Strautnieks, Kaspars Pudžs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

3D printeri ir populāri instrumenti gan zinātniskajās laboratorijās, gan industriālajos uzņēmumos, un to ietekme uz ikdienas dzīvi pieaug katru dienu. Zinātnieki un inženieri meklē jaunus pielietojumus 3D printeriem. Viena no iespējām, kur varētu tos lietot ir funkcionālo materiālu veidošana, kuriem piemistu netiek mehāniskas īpašības, bet arī funkcionālas – šajā gadījumā termoelektriskas īpašības. Viena no 3D printeru lieliskām īpašībām ir tā, ka ar tiem var veidot telpiskus objektus, kas ir ļoti noderīgi termoelektrisku materiālu veidošanā.

Šobrīd galvenā problēma ar funkcionālajiem materiāliem ir tāda, ka ir maz zināms par to piemērojamību 3D printēšanai. Tiešas testēšanas procedūras nav izdevīgas, jo ir vajadzīgs salīdzinoši liels daudzums ar šo organisko materiālu, un šis funkcionāls materiāls ir dārgs. Mēs iesakam eksperimentu un mērījumu kopumu, ar kuru palīdzību varētu noteikt funkcionālo materiālu termoelektriskās īpašības un klasificēt to piemērojamību izmantošanai 3D printēšanai.

Šajā darbā mēs esam pētījuši termoelektriskās īpašības tīram un karsētam P3HT ar īsu un garu polimēra ķēžu garumu, kā arī dopēta P3HT ar F4TCNQ plānu kārtiņu īpašības. Tiks parādīti iegūtie dati un apspriesti rezultāti. Abi augstāk minētie organiskie materiāli ir populāri un plaši pielietoti termoelektriskajās ierīcēs.

STUDY OF P3HT THIN FILM PROPERTIES FOR 3D PRINTED THERMOELECTRIC DEVICE APPLICATION

Normunds Ralfs Strautnieks, Kaspars Pudžs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

3D printers are popular accessories both in scientific research facilities and industry and their influence is getting bigger by each day. People are looking for new ways where to use them. One of the possibilities where 3D printers could be used is manufacturing of functional materials, which would possess not only mechanical uses, but functional ones as well, like thermoelectric. Of unique advantages, 3D printing enables the generation of free-standing bulk objects, which are particularly useful for preparing thermoelectric material samples.

The main problem with those functional materials is our absent knowledge about suitability for 3D printing process. Print and test procedure is not very beneficial, as costs for small amount of functional materials are usually high and significant amount of material is needed for test printing. We are suggesting a series of experiments and measurements of thin films with whom suitability of the materials for use in 3D printing is characterised by measuring their physical characteristics: electrical conductivity and Seebeck coefficient.

In this work thermoelectrical properties of untreated and annealed P3HT with short and long polymer chains and doped P3HT/F4TCNQ thin films will be shown and results discussed. Both organic materials used in this work are well known for their functionality in organic thermoelectric effects.

Y_mO_n UN AR ITRIJU DOPĒTAS ZnO PLĀNĀS KĀRTIŅAS UN MULTISLĀŅI

Halil Arslan, Andris Āzens, Mārtiņš Zubkins, Juris Purāns
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūta Plāno kārtiņu laboratorija

Lai gan dopētas ZnO plānās kārtiņas ir daudzsolīši n-tipa TCO materiāli, p-tipa ZnO plāno kārtiņu iegūšana ir svarīgs pavērsiens caurspīdīgas elektronikas izstrādē. Nesen mēs esam izstrādājuši p-tipa ZnO-IrO₂ plānās kārtiņas [1,2] un tās ir salīdzinātas ar publicētajiem teorētiskajiem modeļiem. Diemžēl irīdijs ir ļoti dārgs materiāls. Tāpēc alternatīvais dopēšanas elements būs ļoti pieprasīts. Šī pētījuma ietvaros mēs cenšamies izstrādāt inovatīvu ZnO:Y (YZO) un daudzslāņu ZnO/YO/ZnO (DMD un DM) reaktīvo augstsprieguma impulsu magnetronās līdzsūdzināšanas (R-HiPIMS) tehnoloģiju. Tikai nesēn [3] tika atklāta jauna itrija monoksīda fāze YO ar neparastu Y²⁺ valenci (4d¹). Tā tika sintezēta epitaksiālas plānas kārtiņas veidā, izmantojot impulsa lāzera uzklāšanu. Atšķirībā no Y₂O₃, YO bija tumši brūns un šauras aizliegtās zonas pusvadītājs. Regulējamā elektriskā vadītspēja no 10⁻¹ līdz 10³ Ω⁻¹cm⁻¹ tika saistīta ar skābekļa vakancēm, kas kalpo kā elektrona donors. Lai saprastu vietējās elektroniskās un atomārās struktūras kopā ar to fizikāli ķīmiskajām īpašībām, tika pielietotas laboratorijas metodes: XRD, Ramana spektroskopija un SEM.

Atsauces

1. M. Zubkins, et al., Phys. Status Solidi C 11, 1493 (2014).
2. M. Zubkins, et al, IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering 77, 012035 (2015).
3. Kenichi Kaminaga, et al.. Applied Physic Letters, 108, 122102 (2016)

Y_mO_n AND YTTRIUM DOPED ZnO THIN FILMS AND MULTILAYERS

Halil Arslan, Andris Azens, Martins Zubkins, Juris Purans
Thin Films Laboratory, Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Although doped ZnO thin films are promising n-type TCO materials, obtaining p-type ZnO thin films is an important milestone in the development of transparent electronics. Recently we have developed p-type ZnO-IrO₂ thin films [1,2] and compared with the published theoretical models. Unfortunately, iridium is a very expensive material. Therefore, alternative doping element will be greatly demanded. In the scope of this research we are aiming to develop innovative ZnO:Y (YZO) and multilayers ZnO/YO/ZnO (DMD and DM) by reactive high power impulse magnetron co-sputtering (R-HiPIMS) technology. Only recently [3], it was discovered new phase solid phase rock salt structure yttrium monoxide, YO, with unusual valence of Y²⁺ (4d¹) was synthesized in a form of epitaxial thin film by means of pulsed laser deposition means. In contrast with Y₂O₃, YO was dark-brown colored and narrow gap semiconductor. The tunable electrical conductivity ranging from 10⁻¹ to 10³ Ω⁻¹cm⁻¹ was attributed to the presence of oxygen vacancies serving as donor of electron. To understand the local electronic and atomic structures in conjunction with their physical-chemical properties advanced in-lab techniques such as XRD, Raman and SEM will be performed.

TĪRA UN AR LANTANĪDIEM DOPĒTA NBT ELEKTROMEĀNISKĀS ĪPAŠĪBAS.

Miks Jurjāns, Māris Kundziņš, Ēriks Birks
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

NBT ir viens no pazīstamākajiem svīnu nesaturošiem segnetoelektriķiem, ko izmanto dažādu savienojumu veidošanā ar mērķi uzlabot elektromehāniskās īpašības tādā mērā, lai šie materiāli būtu konkurētspējīgi ar svīnu saturošajiem segnetoelektriķiem. No pjezoelektrisko īpašību viedokļa tīrs NBT nav perspektīvs.

Parasti publikācijās netiek apskatītas elektromehāniskās īpašības pie lieliem elektriskiem laukiem. Šajā darbā tika pētītas gan tīra, gan ar lantanīdiem dopēta NBT elektromehāniskās īpašības plašā elektriskā lauka diapazonā. Deformācijas cilpas bipolāros ciklos kļūst izteikti asimetriskas attiecībā pret $E=0$ pat gadījumos, kad paraugs ir ticis iepriekš termiski depolarizēts. Iemesli tam nav skaidri, ņemot vērā to, ka $P(E)$ cilpās asimetrija neparādās. Turpretī $u(E)$ atkarība unipolāros laukos ir skaidri definēta un neuzrāda nekādas noguruma pazīmes. Ja $P(E)$ atkarībā tiek atrēķināta noplūdes strāvas ietekme, tad $u(P)$ atkarība ir lineāra.

Paraugiem tika noteiktas arī d_{33} vērtības, kas iegūtas gan ar tiešā, gan ar apgrieztā pjezoelektriskā efekta palīdzību.

Ar elektrisko lauku inducētās fāzu pārejā tika konstatēts neatgriezenisks deformācijas lēcienis. Nepolarizētā stāvokļa polarizācija tika raksturota, analizējot $u(E)$ atkarību.

ELECTROMECHANICAL PROPERTIES IN PURE AND LANTHANIDE DOPED NBT

Miks Jurjāns, Maris Kundzins, Eriks Birks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

NBT is one of main lead-free ferroelectrics, which is used for development of compositions with electromechanical properties - compatible with lead-based counterparts. Usually NBT itself is considered as material which is not competitive in respect of piezoelectric properties. The electromechanical properties in large fields were not in focus of published studies.

In presented research electromechanical properties of NBT, pure and with lanthanides doped, are considered in whole field range. Strain loops at bipolar field cycles becomes very nonsymmetric in respect of $E=0$ even after few cycles of freshly thermally depoled samples. Reason of such extreme fatigue is not clear, taking into account that it does not appear in $P(E)$ loops. At the same time dependence $u(E)$ dependence at unipolar field pulses is well defined and fatigue is not found. $u(E)$ is linear if contribution of leakage current in $P(E)$ dependence is extracted.

Values of d_{33} , obtained by direct and inverse piezoelectric effect are presented. Irreversible jump of strain at field induced phase transition is determined. Nature of polarisation is discussed from $u(E)$ in unpoled state.

Na/Bi NESTEHIOMETRIJA TĪRĀ UN LEĢĒTĀ NBT

Līga Bikše, Laura Eglīte, Kārlis Kundziņš, Ēriks Birks
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

NBT ir svīnu nesaturošs segnetoelektriķis ar ABO_3 perovskīta struktūru, kura A-apakšrežģī vienādā koncentrācijā izvietojas joni ar dažādu valenci: Na^{1+} and Bi^{3+} . Pašlaik nav nopietnu pierādījumu tam, ka šie joni ir izvietoti sakārtotā konfigurācijā. Ticamāk, ka Na^{1+} un Bi^{3+} izvietojums ir nesakārtots, nodrošinot elektroneitralitātes nosacījuma izpildi tikai vidējoti režģī.

Nemot vērā to, ka NBT keramikas apdedzināšanas temperatūra pārsniedz $1100^\circ C$ un ir sagaidāmi Bi/Na zudumu iztvaikošanas dēļ, tiek uzskatīts, ka NBT satur vakances. Dažkārt Bi_2O_3 izejmateriālos tiek pievienots virs stehiometrijas, lai kompensētu šādus Bi zudumus. Tajā pašā laikā ir zināmas eksperimentālas norādes, kas liecina par stabilu Bi koncentrāciju izgatavotajā keramikā neatkarīgi no tā koncentrācijas izejmateriālos.

Šī pētījuma mērķis ir pētīt Bi saturu NBT atkarībā no dažādas Bi/Na attiecības izejmateriālos, kā arī kompensācijas mehānismus, kas nodrošina stabilu Bi koncentrāciju gala materiālā. TiO_2 un ar Bi bagātas komponentes ir atrastas gadījumos, ja izejmateriālos ir izdarītas novirzes no stehiometrijas. Tajā pašā laikā Bi virsstehiometrija izejmateriālos izraisa ievērojamu graudu izmēru samazināšanos kas var būt cēlonis fizikālo īpašību izmaiņā, tajā skaitā depolarizācijas temperatūras samazināšanā.

Na/Bi NONSTOICHIOMETRY IN PURE AND LANTHANIDE DOPED NBT

Līga Bikše, Laura Eglīte, Karlis Kundzins, Ēriks Birks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

NBT is a well-known lead-free ferroelectric with ABO_3 perovskite structure, where equal amounts of aliovalent cations, Na^{1+} and Bi^{3+} , reside in A-sublattice. At the moment, there is no strong evidence of ordered configurations of Na^{1+} and Bi^{3+} ions, it is rather assumed that ions tend to reside in the lattice randomly and fulfil requirement of charge balance only on average.

Since sintering temperature of NBT ceramics is above $1100^\circ C$, presence of vacancies due to volatility of Na and Bi is frequently considered. Sometimes overstoichiometric Bi_2O_3 is added to compositions in order to compensate for the loss of Bi. At the same time, there is experimental evidence suggesting that concentration of Bi in final composition is very stable regardless of concentration of Bi in raw oxides.

The aim of present research is to study content of Bi in NBT depending on different Bi/Na ratios in raw oxides, as well as compensation mechanisms in final compositions where these ratios are maintained stoichiometric. Presence of TiO_2 and Bi-rich components is found as compositions deviate from stoichiometry. At the same time, Bi overstoichiometry in raw materials creates remarkable reduction of grain size that could be responsible for changes in physical properties, including reduction of depolarization temperature.

FĀZES ATĢŪŠANAS PARAMETRI AR BINĀRĀM MASKĀM

Sergejs Fomins, Varis Karitāns
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Metode balstās uz fāzes atģūšanas algoritmu kas no intensitātes attēla spēj izcelt fāzes parametrus. Galvenie pārbaudāmie parametri ir algoritma ātrums un atģūšanas precizitāte, it īpaši trokšņaina un vāja objekta gadījumā. Candes et al. (2011) izstrādātajā pieejā tiek pielietotas vairākas maskas, haotiski izveidotas struktūra difrakcijas ainas iegūšanai. Vēlāk attīstītajos piegājienos tika mēģināts pielietot arī Gausa maskas (Huang et al., 2017). Savā pieeja izmantojam bināras maskas, kas ir viegli iegūstamas arī fiziski. Līdz šim veiktie skaitliskie rezultāti atklāj minimāli nepieciešamo masku skaitu, kā arī optimālo grauda parametrus un balto melno vokseļu attiecību.

PHASE RECOVERY PARAMETERS WITH BINARY MASKS

Sergejs Fomins, Varis Karitāns
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The method is based on a phase recovery algorithm that is able to highlight phase parameters from the intensity image. The main parameters to be tested are the speed of the algorithm and the accuracy of recovery, especially in the case of a noisy and weak object. Approach of Candes et al. (2011) is based on the use of several masks, chaotic structures for obtaining the diffraction scene. In later advances, Gaussian masks were also applied (Huang et al., 2017). In our approach, we use binary masks that are easily obtainable physically. Until now, the numerical results performed reveal the minimum number of masks required, as well as the optimal grain parameters and the ratio of white to black mask voxels.

The financial support of LIAA commercialization program under the project KC-PI-2017/105 “*New generation wavefront sensors based on the method of coded diffraction patterns*” is greatly acknowledged.

Author Varis Karitāns is supported by postdoctoral project No. 1.1.1.2/16/I/001. „*Reducing/cancelling the effects of vitreous floaters using a phase retrieval method based on coded diffraction patterns*”.

A	
Annus P.....	22
Anspoks A.....	43, 53, 61
Antuzevičs A.....	26, 27, 75, 76
Arslan H.....	88
Augustovs P.....	16
Auziņš K.....	33, 34
Avotiņa L.....	44
Āzens A.....	88
B	
Bajārs G.....	47, 61, 66
Balodis J.....	66
Balodis K.....	16
Bērziņa B.....	10
Bikše L.....	87, 90
Birks Ē.....	61, 89, 90
Bite I.....	28, 29, 31, 32, 33, 34, 35, 36
Bitmets O.....	49
Blawert C.....	34
Bočarovs D.....	53, 54
Borisova T.....	63
Brics P.....	27
Brokāns J.....	12
C	
Cintiņš A.....	43
Cīrulis J.....	26
Česnokovs A.....	78, 80
Čikvaidze G.....	12, 20, 87
Čīpa J.....	10, 11
Čižikovs M.....	68
D	
Dimanta I.....	46
Dože G.....	30
E	
Eglīte L.....	90
Einbergs E.....	28
F	
Fomins S.....	38, 91
G	
Gabrusenoks J.....	12, 87
Gopejenko A.....	42
Gorokhova E.....	37, 39
Gorovojs D.....	27
Grants R.....	37, 70
Grigorjeva L.....	32, 36, 39
Grīnberga L.....	59, 60, 61
Grjaznovs D.....	78, 80, 81
Gvardina I.....	21, 23
H	
Haļitovs M.....	71
Hodakovska J.....	48
J	
Jēkabsons L.....	20, 59, 60
Jonāne I.....	55
Jurjāns M.....	89
K	
Kalinko A.....	53, 55
Kaļiņikovs P.....	21
Kaprāns K.....	47, 59, 60
Karītāns V.....	38, 91
Kāne M.....	58
Kepente J.....	32
Kleperis J.....	20
.....	23, 46, 47, 48, 59, 60, 61, 62, 64, 68
Klotiņš Ē.....	52
Knoks A.....	20, 46, 48, 59, 60, 64, 67
Kokars V.....	16, 17
Korsaks V.....	10
Kotomins J.....	42
.....	79, 80, 81, 82, 83, 84, 85
Krasta T.....	69
Krieķe G.....	30, 75, 76
Kristiņš A.....	21, 22, 23
Kundziņš K.....	37, 90
Kundziņš M.....	89
Kuzmins A.....	43, 55, 70
Kuzovkovs V.....	79, 84, 85
Ķizāne G.....	44, 71
L	
Laganovska K.....	29
Laipniece L.....	16
Lazdoviča K.....	17
Leimane M.....	29, 35
Lesničenoks P.....	20
.....	46, 48, 59, 60, 64, 67, 68
Leščinskis A.....	44
Lisovskis O.....	54
Lukoševičs I.....	48, 59, 60, 64, 67, 68

Lushchik A.....84

M

Manika I.....70

Mastrikovs J.....42, 82

Mateuss J.....47

Melderis J.....21

Mikelsone J.....15

Millers D.....39

Moskina A.....85

Möslang A.....42

Muktepāvela F.37

N

Nitišs E.....38

Novikova V.....65

O

Ozoliņš M.....38

Ozols A.16

P

Pajuste E.....44

Pankratovs V.....74

Paulsone P.....17

Pavlovska E.....75

Pentjušs Ē.....66

Pētersone L.....66

Piskunovs S.....42, 54, 62

Popovs A.....84, 85

Pudāns J.27

Pudžs K.49, 86

Purāns J.43, 61, 87, 88

Putniņa M.....85

R

Reinfelde M.15

Riekstiņa D.....69

Rodnyi P.....39

Rogulis U.....75, 76

Roze K.29, 31, 35

Rudušs A.....16

Rusevičs L.....83

Rutkis M.....8, 61

S

Seņko M.....36

Simonova L.....69

Skorodumova N.....78

Skuja L.....29, 31, 35

Sokolovs M.....62, 82

Sprīngis M.30, 76

Sprūģis E.....65

Spustaka A.....32, 33, 36

Strautnieks N.R.....86

Šarakovskis A.30

Šmits K.28, 29, 32, 34, 36

Šternbergs A.41

T

Taranda K.29, 31

Teteris J.....14, 15

Timoshenko J.....53

Tokmakovs A.....49

Traskovskis K.16

Trinklere L.10, 11

Truhins A.....9, 10

V

Vaivars G.....58, 61, 65

Vanags M.....20

Vdovičenko M.66

Veinbergs J.21, 23

Vembris A.....17

Venevtsev I.39

Vītiņš A.....44

Vītola V.33

Vladimirovs P.42, 82

Volkovs A.....20

Z

Zabels R.....37

Zablockis D.....79

Zariņš A.11

Zariņš E.....17

Zavickis D.....81

Zemīte L.....46

Zolotarjovs A.11, 28, 34, 39

Zubkins M.....87, 88

Zukuls A.36

Zvejnieks G.....81, 83

Žukovskis J.42, 62, 82

Piezīmes

Piezīmes

Piezīmes