

Projekts Nr.1

DAUDZFUNKCIONĀLIE MATERIĀLI STAROJUMA ENERĢIJAS KONVERTĒŠANAI, INFORMĀCIJAS IERAKSTAM, UZGLABĀŠANAI, PĀRNESEI UN PĀRVEIDOŠANAI, UN TO EFEKTĪVIEM PIELIETOJUMIEM AUGSTO TEHNOLOĢIJU IERĪCĒS

Projekta 1.posma īstenošanai piešķirtais finansējums

Ls 13600

	IZPILDĪTĀJI	IEŅEMAMĀIS AMATS	NODARBINĀTĪBAS ILGUMS (MĒN.)	KOPĒJĀ DARBA SAMAKSA
1	Jevgenijs Kotomins	Vad. pētn.	8	—
2	Vladimirs Kuzovkovs	Vad. pētn.	8	2904
3	Ēriks Klotiņš	Vad. pētn.	8	2904
4	Jurijs Mastrikovs	Vad. pētn.	8	2904
5	Dāvis Engers	Inž. konsultants	3	624
6	Ēriks Klotiņš Jr.	Inž. konsultants	3	624

PLĀNOTIE UZDEVUMI 2010. g.

- (1) PMN tipa komplekso oksīdu modelēšana (Ē. Klotiņš)
- (2) BSCF kurināmo elementu aprēķini (J. Kotomins)





PROJEKTA KOPĒJAIS ZINĀTNISKAIS MĒRĶIS

Daudzfunkcionālo materiālu parametru raksturošana pielietojumos atkarībā no ķīmiskā sastāva, atomārās struktūras, iekšējās dinamikas un temperatūras, saistot materiālu mikroskopisko aprakstu ar makroskopisko.

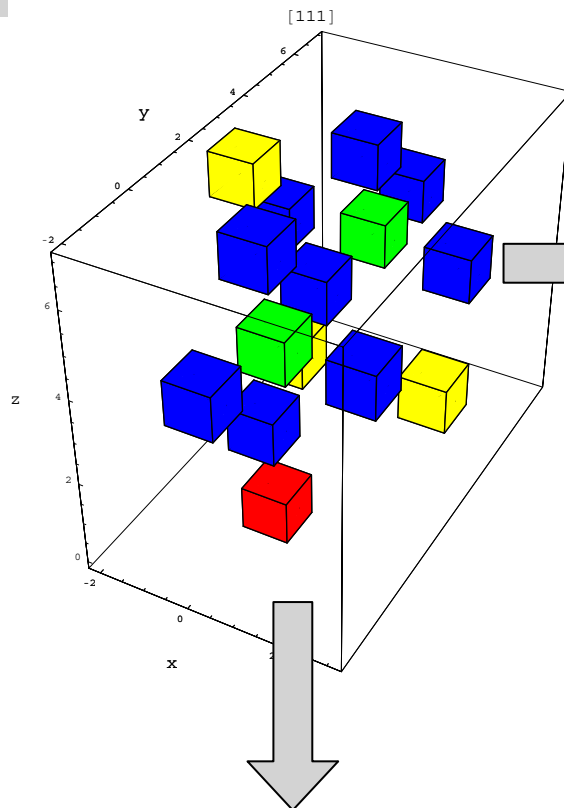
ABO₃-perovskīta tipa komplekso oksīdu modelēšana pie galīgām temperatūrām un optimizācija pielietojumiem. (Ē. Klotiņš)

- ❑ Aktuāla moderno elektronisko materiālu zinātnes problēma ir sasniegt ultra augstus parametrus pielietojumos.
- ❑ Komplekso oksīdu gadījumā tas panākams pārveidojot materiāla ķīmisko sastāvu un struktūru nepieciešamajā ķīmiski neviendabīgā un elektriski haotiskā formā.
- ❑ Viena no daudzsološākajām komplekso oksīdu klasēm ir segnetoelektriskie relaksori ar svina magnija niobātu Pb(Mn Ni)O₃ (PMN) kā vienu no prototipiem fundamentālo īpašību izpētei.
- ❑ Centrālā problēma, aktuāla kopš pagājušā gadsimta 80 – gadiem, ir komplekso oksīdu apraksts bez empīrisku parametru izmantošanas.

KĪMISKAIS SASTĀVS

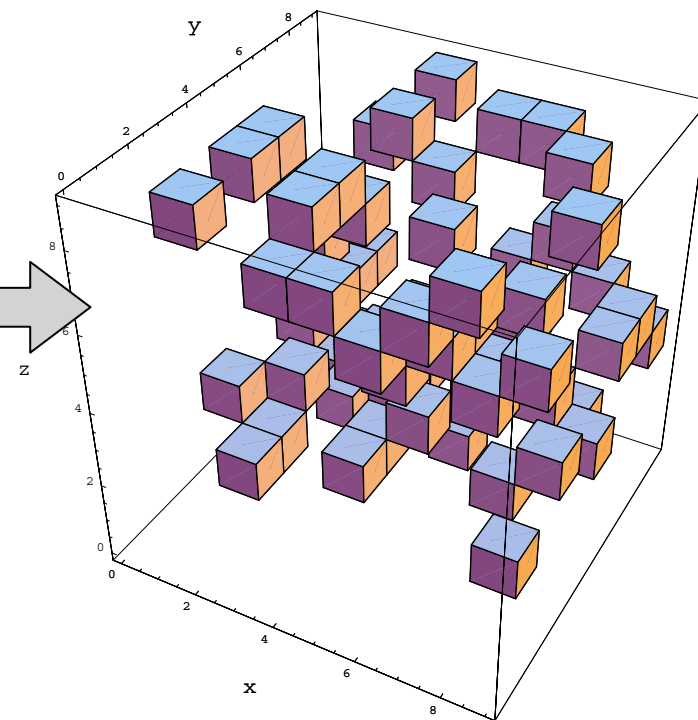
-  Pb (lead)
-  Mg (magnesium)
-  Nb (niobium)
-  O (oxygen)

TEHNOLOĢISKO
ĪPAŠĪBU NESEĪJS – 15
JONU SUPERCELLE



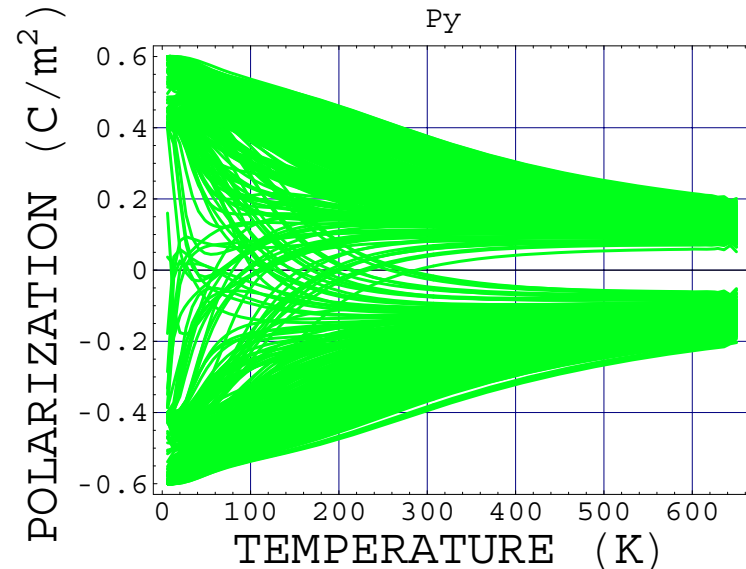
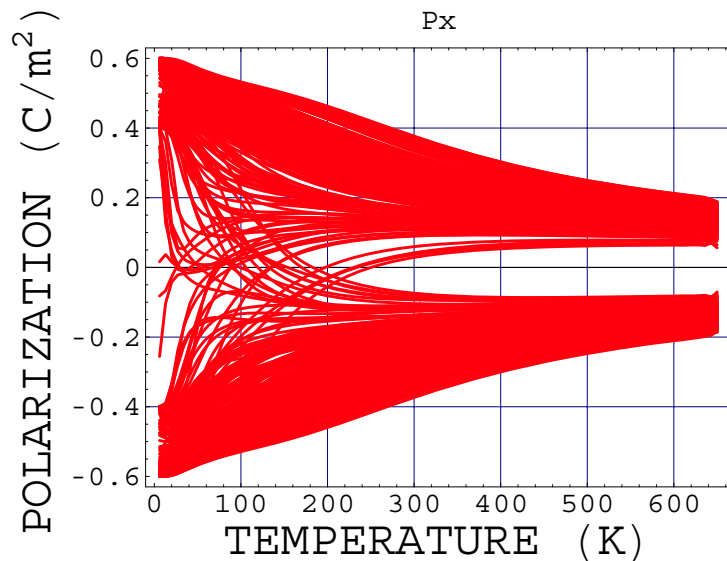
KOMPLEKSAIS OKSĪDS

(MODELIS AR 512
SUPERCELLĒM UN
7680 JONIEM)



SUPERCELLE RAKSTUROJAS AR JONU NOBĪDI NO
LĪDZSVARA STĀVOKĻA (POLARIZĀCIJU)

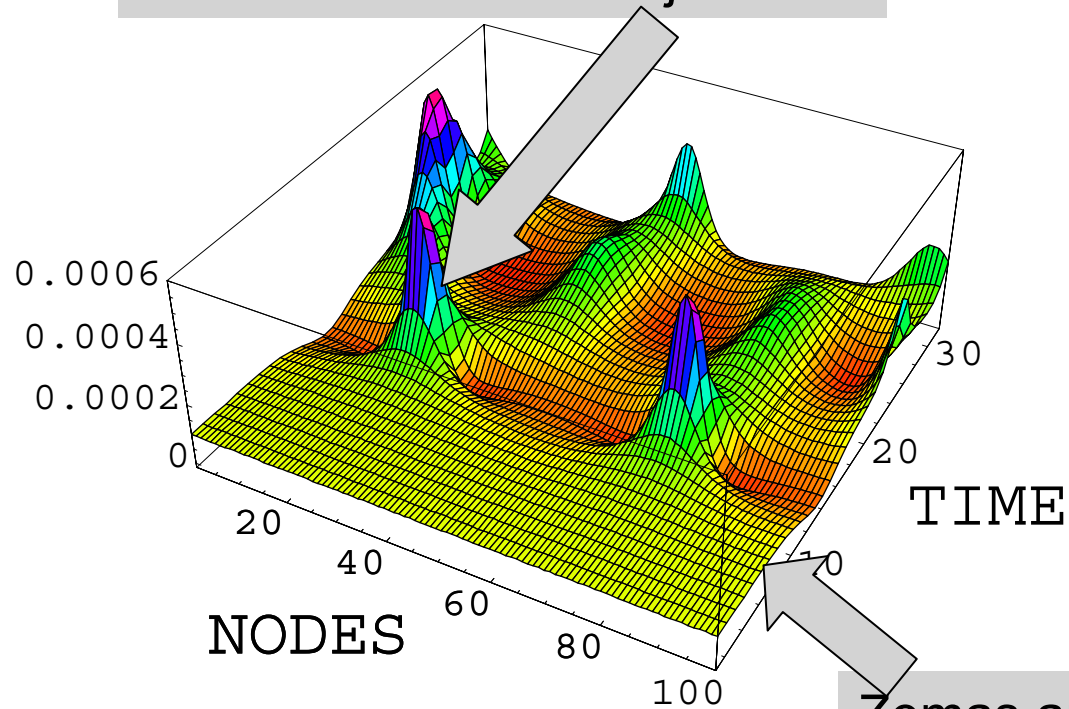
SUPERCELLES: POLARIZĀCIJAS TEMPERATŪRAS ATKARĪBAS



Pazeminoties temperatūrai individuālas supercelles polarizācija izmainās, bet kopējā polarizācija paliek vienāda ar nulli

SUPERCELLES: NEKLASISKA KINĒTIKA MIJIEDARBĪBĀ AR FONONIEM

Lokalizēts ierosinājums



Pie noteiktām sistēmas parametru vērtībām zemas amplitūdas fononu enerģija pāriet uz lokalizētiem ierosinājumiem

Zemas amplitūdas fononi

Galvenie rezultāti

Izveidots ABO₃-perovskīta tipa komplekso oksīdu matemātisks modelis, kurš apraksta pielietojumos kritiski nozīmīgo polāro nano apgabalu izcelsmi, augšanu un relaksāciju kā nekonvencionālu kritisku parādību (localization transition).

Modeļa īpašības:

- Definē ķīmiski sakārtotas superšūnas ķīmiski neviendabīgā un elektriski haotiskā sistēmā.
- Apraksta superšūnu mijiedarbību atkarībā no temperatūras un izskaidro specifisko saistību starp lokālo un makroskopisko polarizāciju.
- Izskaidro un apraksta izskaidro polāro nano apgabalu veidošanos kā superšūnu un lokalizētu ierosinājumu pašsaistītu efektu.
- Akcentē virzienus, kādos jāpaplašina matemātiskās tehnikas moderno materiālu parametru raksturošanai pielietojumos atkarībā no ķīmiskā sastāva, atomārās struktūras, iekšējās dinamikas un temperatūras, saistot materiālu mikroskopisko aprakstu ar makroskopisko.