

**Latvijas Universitātes
Cietvielu fizikas institūts**



37. zinātniskā konference

**Veltīta LU Pusvadītāju Fizikas problēmu
laboratorijas 60 gadu jubilejai**

TĒZES

2021. gada 23. - 25. februāris

**LU Cietvielu fizikas institūts
Rīga, 2021**

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



ABSTRACTS
of the 37th Scientific Conference

**February 23– 25, 2021
Riga**

LU Cietvielu fizikas institūta 37. zinātniskā konferences tēzes latviešu un angļu valodā.
Konference veltīta LU Pusvadītāju Fizikas problēmu laboratorijas 60 gadu jubilejai.

Atbildīgais redaktors: Dr. phys. Anatolijs Šarakovskis.

Salikums: Līva Staltāne-Vilne.

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

Konferencē paredzētas 13 sekcijas:

- Optiskie materiāli
- Materiāli enerģētikai
- Iekārtas un ierīces
- Struktūra
- Ķīmijas tehnoloģijas
- Organiskie materiāli
- Teorija un modelēšana
- Plānās kārtiņas un pārklājumi
- Materiālu apstarošana
- Materiāli sensoriem
- Optiskie materiāli
- Segnetoelektriskie materiāli



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



23. februāris

Optiskie materiāli
Materiāli enerģētikai
Iekārtas un ierīces
Struktūra
Ķīmijas tehnoloģijas

LU CFI Pētniecības programmas 2021-2023-2027 starts: CAMART² atbalsta un COVID ierobežojumu laikā

Andris Šternbergs

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Ir izstrādāta Pētniecības programma 2021-2023-2027 gadiem. 2021. gadā pētniecība pastiprināti koncentrēsies uz fotoniku, enerģijas ieguvu un uzglabāšanu, kā arī uz biomedicīnas uzdevumiem. Pētniecības un inovācijas ekosistēmas turpmākā attīstīšana ietvers vismodernāko tehnoloģiju iespēju un pakalpojumu piedāvājumu ar modernām iekārtām un metodēm, kas ļauj kvalitatīvi novērtēt un raksturot materiālus.

Liela uzmanība Institutā tiks pievērsta profesionāla un augsti kvalificēta zinātniskā personāla izglītošanai un atjaunošanai. Atbilstoša atjaunināta maģistra un doktorantūras programma, iekļaujot starpdisciplinārus aspektus, ir izstrādāta kā pamats jauno zinātnieku nākotnes zināšanu radīšanai. Daudz pūļu tiks veltīts sadarbības nodrošināšanai ar augstskolām, kā arī uzņēmēju un investoru piesaistei. CAMART² darba pakete WP1 pastāvīgi atbalstīs jauno pētnieku piedalīšanos starptautiskās vasaras / ziemas skolās un starptautiskās konferencēs / darbnīcās, semināros, atbalstīs sagatavošanos FM&NT 2022 konferencei Rīgā, atbalstīs viņu dalību S2S sanāsmēs ar CAMART² partneriem, sūtīšanu stažēties prakses vietās Zviedrijā.

Institūta budžeta papildināšana prasa nopietnu sagatavošanos Horizon Europe pirmajiem uzsaukumiem, kā arī dalību esošajās un gaidāmajās Valsts pētniecības programmās, gatavošanos LZP grantu un ERAF projektu uzsaukumiem.

Start of ISSP UL Research Programme 2021-2023-2027: CAMART² support and COVID constraints

Andris Šternbergs

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Research Programme 2021-2023-2027 has been developed and R&D activities within the traditional strength of the ISSP UL in 2021 will focus on photonics, energy harvesting and storage and biomedical issues. Creativity into further updating of research-innovation ecosystem includes offer of cutting-edge technology facilities and services advanced equipment and methods permitting qualitative evaluation and characterization of materials or interfaces.

Much attention in the Institute will be paid to the education and renewal of professional and highly qualified scientific personnel. Adequate and specific curricula – updated master's and doctoral programme, including interdisciplinary aspects has been developed as the basis for future creation of knowledge and industrial competitiveness of young researchers. A lot of effort will be dedicated to ensure cooperation with institutions of higher education, international partners, training of students and specialists as well as to attracting entrepreneurs and investors. CAMART² WP1 will constantly support young researchers to attend international summer/winter schools and international conferences/workshops, seminars, support preparation for the FM&NT 2022 conference in Riga, support their participation in S2S meetings with in CAMART² partners, delegate for internships. Recruitment of high quality researchers via Postdoc's programme, via Horizon Europe Widening participation ERA-Chair projects remains a serious challenge.

The elaboration of the Institute's budget requires serious preparation for Horizon Europe's first calls, as well as participation in existing and forthcoming National Research programs, calls for proposals for the Latvian Council of Science projects (FARF), and European Regional Development Fund (ERDF) project calls.

Neaktivētā un Ga-aktivētā ZnO sintēze ar dažādiem šķīdinātājiem

Mareks Senko, Ivita Bite, Agnese Spustaka, Donāts Millers, Krišjānis Šmits, Aleksejs Zolotarjovs
Latvijas Universitātes Cietvielu Fizikas Institūts

Cinka oksīds (ZnO) ir materiāls, kam piemīt augsta fizikālā un ķīmiskā izturība, istabas temperatūrā ir ātri dziesošs un intensīva luminescence, relatīvi plata, ~3.6 eV aizliegtā zona, kā arī izturība pret radiāciju, tāpēc šis materiāls piesaista plašu pētnieku interesi vairākās industriju nozarēs, piemēram, optoelektronikā, biomedicīnā, fotokatalīzē. Materiāla īpašības stipri ietekmē citu elementu – aktivātoru – klātbūtne ZnO kristālrežģī. Mērķtiecīgai materiāla īpašību maiņai tā aktivēšanas rezultātā ir nepieciešama informācija par dažādu aktivātoru ietekmi. Plaši tiek pētītas ZnO īpašību izmaiņas, to aktivējot ar III A grupas metāliem – alumīniju, galliju un indiju. Savukārt, ZnO īpašības un izmantošanas iespējas ir arī atkarīgās no izvēlētas sintēzes metodes (mikroviļņu-asistētā solvotermālā metode, hidrotermālā metode un sola-gēla metode) un izvēlētiem sintēzes apstākļiem (šķīdinātājs, temperatūra, spiediens, pH).

Darba galvenais virziens ir tāda aktivēta ZnO iegūšana, kuram būtu augstas efektivitātes scintilatora īpašības. Pētījumu veikšanai sintezētas neaktivētā un Ga-aktivētā (no 0 līdz 1.5 at.%) ZnO nanostruktūras, izmantojot mikroviļņu-asistētās solvotermālās metodes ar 2 dažādiem šķīdinātājiem – metanolu un etanolu. Optimālā gallija koncentrācija paraugiem metanola šķīdumos tika noteikta 0.3-0.5 at.% robežās, savukārt etanola šķīdumos – 0.8-1 at.%. Paraugu raksturošanā un īpašību noteikšanā tika izmantotas vairākas metodes: rentgendifraktometrija (XRD), skenējošā elektronu mikroskopija (SEM), fotoluminescence (PL).

Undoped and Ga-doped ZnO synthesis with different solvents

Mareks Senko, Ivita Bite, Agnese Spustaka, Donāts Millers, Krišjānis Šmits, Aleksejs Zolotarjovs
Institute of Solid-State Physics, University of Latvia

Zinc Oxide (ZnO) is a material with high physical and chemical stability, fast decaying and intense room temperature luminescence, relative wide ~3.6 eV bandgap, radiation hardness, for which the material attracts a great deal of research interest for its potential application in various industries, such as: optoelectronics, biomedicine, photocatalysis. The properties of ZnO are strongly dependent on different dopants incorporation in ZnO crystal lattice. Information of dopants influence is necessary for purposeful change of material properties. The change of ZnO properties due to doping with elements from group III metals – aluminium, gallium and indium is of enhanced interest. Properties and applications may also be affected by the chosen synthesis method (microwave-assisted solvothermal, hydrothermal, sol-gel) and synthesis parameters (solvent, temperature, pressure, pH).

Objectives of this research include obtainment (synthesis) of doped ZnO which reveals high efficient scintillator properties. The synthesis of non-doped and Ga doped (from 0 to 1.5 at.%) ZnO nanostructures was completed for present study. Synthesis was carried out using microwave-assisted solvothermal method with 2 different solvents – methanol and ethanol. Optimal gallium concentrations in ZnO samples were found to be for methanol: 0.3-0.5 at.%, for ethanol: 0.8-1 at.%.

Several methods were used to determine and characterize the properties of samples: X-ray diffractometry (XRD), scanning electron microscopy (SEM), photoluminescence (PL).

The authors are thankful to ERA.NET RUS_ST20170-051 Project for support.

Aktivēta cinka oksīda luminiscence sub-nano sekunžu apgabalā

Agnese Spustaka¹, Mareks Seņko¹, Donāts Millers¹, Ivita Bite¹
¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Cinka oksīds (ZnO) ir plaši pētīts pusvadītājs ar daudziem pielietojumiem – optoelektronikā, diodēs u.c. Tas ir arī daudzsološs materiāls izmantošanai ātros sub-nano sekunžu scintilatoros. ZnO luminiscences spektrā ir divas joslas - malas luminiscence pie 380 nm un ar defektiem saistītā luminiscence pie 520 nm. Neaktivēta ZnO malas luminiscences dzišanas laika konstante ir 0.7 ns, taču dzišanas laiks luminiscencei redzamajā diapazonā ir mikrosekunžu diapazonā. Pašreiz ZnO izmantošanu ātros scintilatoros ierobežo divas problēmas – lēni dziestošā luminiscence redzamajā apgabalā un iespēja iegūt caurspīdīgu monolītu struktūru. Luminiscences joslu intensitātes izmaiņas var panākt materiālu aktivējot, savukārt monolīts scintilators varētu būt aktivēta ZnO keramika.

Pētījumā izmantoti ar solvotermālo metodi sintezēti tīra un ar Ga aktivēti ZnO pulverveida paraugi. Pētītas arī luminiscentās īpašības ZnO keramikām, kas aktivētas ar indiju un galliju. Pētījuma gaitā pārbaudītas kā materiāla īpašības ietekmē sintēzes metode un aktivatora koncentrācija. Visiem paraugiem veikta XRD analīze, foto-luminiscences, radio-luminiscences, kā arī dzišanas kinētiku reģistrācija.

Apkopojot rezultātus, parādīts, ka cinka oksīda luminiscentās īpašības ir ļoti mainīgas atkarībā no aktivatora koncentrācijas izmaiņām, kas ļauj prognozēt aktivēta ZnO optimālo sastāvu. Noskaidrots, ka pētītajām keramikām malas luminiscences dzišanas laiks ir 17 ps vai pat īsāks, un tas ir tuvs literatūrā atrodamiem rezultātiem. Taču keramiku luminiscences pētījumi rāda, ka keramikas izveidotas ļoti nevienmērīgas. Tādēļ pētījumu turpināšanai jāizgatavo viendabīgāku keramiku paraugi.

Doped zinc oxide luminescence in sub-nanosecond range

Agnese Spustaka¹, Mareks Seņko¹, Donāts Millers¹, Ivita Bite¹
¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

Zinc oxide (ZnO) is extensively studied semiconductor with wide range of applications - optoelectronics, light diodes etc. One of prospective application is for sub-nanosecond scintillators. The ZnO luminescence spectra reveals two bands – near band luminescence (NBL) in near UV range and defect luminescence in visible range peaking about 520 nm. The decay time of undoped ZnO NBL is about 0.7 ns, however, the defects luminescence decay time is in micro-second range. Currently, the use of ZnO in fast scintillators is limited by two problems: the slow decaying luminescence in visible range and the possibility of obtaining a transparent monolithic structure. Changes in intensity of luminescence bands can be achieved by ZnO doping, while monolithic scintillators could be obtained as ZnO ceramics.

In the research were used samples of undoped as well as Ga doped ZnO powders synthesized with solvothermal microwave assisted method. The luminescence properties of ZnO ceramics doped with indium and gallium also were studied. In the study the changes of material properties were analysed by synthesis method and activator concentration. In this research were completed structural analysis (XRD), as well as photoluminescence and radioluminescence, and luminescence decay time.

Analysis of results obtained led to conclusions that zinc oxide luminescence properties are very variable depending on changes in the concentration of the activator, which allows to predict the optimal doping concentration. The NBL decay time of Ga doped ceramics is 17 ps or even less and it is close to the best results in literature. However, properties of ceramics luminescence shows that samples are inhomogeneous, therefore, for further study it is crucial to sinter homogenous ceramics.

The research was supported by project ERA.NET RUS_ST2017-05 (Latvia) and Nr. 18-52-76002 (Russia).

Eksimeru lāzera starojuma inducēto hlora oksīdu optiskā absorbcija SiO₂ stiklā un singleta skābekļa luminiscences ierosme ar enerģijas pārnesei no hlora molekulām

Linards Skuja¹, Nadege Ollier², Koichi Kajihara³, Ivita Bite¹, Madara Leimane¹, Krišjānis Šmits¹, Andrejs Siliņš¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Laboratoire des Solides Irradiés CEA-CNRS-Ecole Polytechnique, Institut Polytechnique de Paris*

³*Department of Applied Chemistry for Environment Tokyo Metropolitan University*

Eksimeru lāzera ultravioletais starojums ($h\nu=7,9$ eV) izraisa SiO₂ stikla solarizāciju - optiskās absorbcijas (OA) joslu veidošanos. Stiklos, kuri sākotnēji satur starpmezglu Cl₂ un O₂ molekulas, novērotas inducētās OA joslas, kuras ir identificētas ar hlora dioksīda (ClO₂, vāja josla pie 3,5 eV) un dihlorā monoksīdu (ClClO un ClOCl, spēcīga josla pie 4,7 eV, pusplatums 0,94 eV) starpmezglu molekulu veidošanos. Kopā ar pašvielas defektu OA joslām, šīs joslas var ievērojami ietekmēt solarizāciju no silīcija tetrahlorīda ražotajos sintētiskajos SiO₂ stiklos. Ramana spektri pierāda tikai ClClO molekulu veidošanos, taču to strukturālais izomērs, ClOCl var arī dot ieguldījumu 4,7 eV OA joslā. Šīs joslas termiskā sagraušana starp 300 °C un 400 °C gandrīz pilnībā atjauno Cl₂ molekulu koncentrāciju pirms apstarošanas. Vājā papildus 3,5 eV OA josla ir identificēta ar ClO₂ balstoties uz līdzību ar brīvu ClO₂ molekulu OA un publicētajiem elektronu paramagnētiskās rezonanses datiem par šādu molekulu eksistenci SiO₂ stiklos. Infrasarkanās luminiscences josla pie 1272 nm, ko rada starpmezglu O₂ molekulas stingri aizliegtā elektroniskā pāreja no singleta stāvokļa uz pamatstāvokli (t.s. "singleta skābekļa" luminiscence) tika novērota ierosinot ar 3,0...3,5 eV fotoniem, kas norāda uz enerģijas pārnesei no fotoierosināta tripleta stāvokļa Cl₂ uz pamatstāvoklī esošu O₂. Enerģijas pārnese visticamāk notiek starp šīm molekulām, kuras atrodas kaimiņos esošos nano izmēra tukšumos SiO₂ stikla tīkla struktūrā.

Optical absorption of excimer laser-induced chlorine oxides in silica glass and excitation of singlet oxygen luminescence by energy transfer from chlorine molecules

Linards Skuja¹, Nadege Ollier², Koichi Kajihara³, Ivita Bite¹, Madara Leimane¹, Krisjanis Smits¹, Andrejs Silins¹

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

²*Laboratoire des Solides Irradiés CEA-CNRS-Ecole Polytechnique, Institut Polytechnique de Paris*

³*Department of Applied Chemistry for Environment Tokyo Metropolitan University*

Optical absorption (OA) bands of interstitial chlorine dioxide (ClO₂, weak band at 3.5 eV, fwhm ~0.8 eV) and dichlorine monoxide (ClClO and ClOCl, strong band at 4.7 eV, fwhm 0.94 eV) are identified in F₂ laser – irradiated ($h\nu=7.9$ eV) synthetic silica glass bearing both interstitial O₂ and Cl₂ molecules. Alongside with intrinsic defects, these OA bands can contribute to solarization of silica glasses produced from SiCl₄. While only the formation of ClClO is confirmed by its Raman signature, its structural isomer ClOCl may also contribute to the induced 4.7 eV OA band. Thermal destruction of this band between 300°C and 400°C almost completely restores the pre-irradiation concentration of interstitial Cl₂. An additional weak OA band at 3.5 eV is tentatively assigned to ClO₂ molecules, based on similarity to the OA of free molecules and on previous observations of ClO₂ in SiO₂ by electron paramagnetic resonance. The strongly forbidden 1272 nm infrared luminescence band of excited singlet O₂ molecules was observed at 3 eV-3.5 eV excitation, demonstrating an energy transfer process from photoexcited triplet Cl₂ to O₂. The energy transfer most likely occurs between Cl₂ and O₂ interstitial molecules located in neighboring nanosized interstitial voids in the structure of SiO₂ glass network.

The financial support of project No. lzp-2018/1-0289 "Optical properties of advanced silicon dioxide-based materials for ultraviolet and high-power photonics" is greatly acknowledged. An additional support was received from the European Union's Horizon 2020 Framework Programme H2020-WIDESPREAD-01-2016-2017-TeamingPhase2 under grant agreement No. 739508

Temperatūras ietekme uz sola-gēla procesā sintezēto stiklveida silīcija dioksīdu

Madara Leimane, Ivita Bite, Linards Skuja

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Silīciju dioksīdu (SiO_2) saturošos stiklveida materiālus plaši izmanto optikā, nanotehnoloģijās un mikroelektronikā. Sintētisko SiO_2 stiklu parasti iegūst no gāzes fāzes, oksidējot SiCl_4 pie augstas temperatūras (~ 2000 °C) skābekļa-ūdeņraža liesmā vai augstfrekvences plazmā un iegūtajām SiO_2 daļiņām stiklojoties pie ~ 1500 °C. Iegūto stiklu blīvumu (ap $2,20$ g/cm³) un struktūru lielā mērā nosaka termoķīmiskie procesi pie šīm temperatūrām. Alternatīvi iegūstot SiO_2 stiklu ar sola-gēla metodi no silīcijorganiskajiem savienojumiem (piem., TEOS), stikla tīkla veidošanās ("polimerizācija") notiek pakāpeniski, karsējot sintezēto kserogēlu pie paaugstinātām temperatūrām, kas var būt zemākas par parasto stiklošanās temperatūru. Kopā ar variācijām sintēzes procesā tas dod iespēju mainīt starptetraedru nanoizmēra tukšumu lielumu, kuru klātbūtne pamatā nosaka SiO_2 stiklu zemāko blīvumu salīdzinājumā ar α -kvarcu ($2,65$ g/cm³). Mūsu sintezēto sola-gēla paraugu Ramana spektri rāda stiklveidošanās procesu jau sākot no 500 °C. Šo stiklu struktūra atšķiras ar lielu 3-locekļu Si-O saišu gredzenu koncentrāciju. Novērota liela izolēto silanolgrupu (Si-O-H) koncentrācija, kas ir būtiska atšķirība no parastajiem stikliem, kur novēro tikai saistītās, ūdeņraža saites perturbētās silanolgrupas. Tas norāda uz nanoizmēra tukšumu klātbūtni sola-gēla stiklos, uz kuru virsmām izvietotas izolētās silanolgrupas. Paraugu karsēšana pie $T > 600$ °C rada fotoluminiscences joslas pie $3,7$ un $3,8$ eV ar ierosmes joslām pie $5,5$ un $4,5$ eV, kuras izzūd, karsējot pie 1000 °C. Šāda luminiscence nav tikusi novērota parastajā SiO_2 stiklā, bet ir novērota porainos paraugos ar lielu virsmu: oksidētā porainajā silīcijā un sola-gēla stiklos. Luminiscences centru modelis līdz šim ir strīdīgs, ir izvirzītas hipotēzes par tā saistību ar virsmas silanolgrupām vai oglekļa piemaisījumiem.

Influence of temperature on the sol-gel synthesis of glassy silicon dioxide glass

Madara Leimane, Ivita Bite, Linards Skuja

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Silicon dioxide (SiO_2) materials are widely used in optics, nanotechnologies, and microelectronics. Synthetic SiO_2 glass is usually obtained from gas phase, by oxidizing SiCl_4 at high T (~ 2000 °C) in hydrogen-oxygen flame or in RF plasma, and by sintering the obtained nanoparticles at ~ 1500 °C. The structure and density of the obtained glass (~ 2.20 g/cm³) are mainly due to thermochemical processes at these temperatures. When obtaining SiO_2 glass by an alternative sol-gel method from silicon-organic compounds (e.g., TEOS), the formation of the glass network (polymerization) takes place gradually, by heating the obtained xerogel at increasingly higher temperatures, which may be much lower than the usual glass-forming temperature. Together with the variations in synthesis conditions, this allows to change the average size of inter-tetrahedral nanosized voids, which are the basic cause for the lower density of SiO_2 glass compared to α -quartz (2.65 g/cm³). The Raman spectra of our synthesized samples show the onset of the glass-forming process starting already from 500 °C. The structure of these glasses is distinguished by a large concentration of 3-membered rings of Si-O bonds. Additionally, a large number of "free" (non-hydrogen bonded) silanol groups are present, which is an essential difference from the conventional SiO_2 glass, where only H-bonded or otherwise perturbed silanols are observed. This indicates the presence of larger nanosized voids, whose internal surfaces accommodate the free silanols. Heating of the samples at $T > 600$ °C lead to the rise photoluminescence bands at 3.7 and 3.8 eV with excitation bands at 5.5 and 4.5 eV. They disappear after heating at 1000 °C. Such emission has never been observed in conventional SiO_2 glass, however, is reported in porous samples: oxidized porous silicon and some sol-gel glasses. The luminescence origin has remained controversial, interacting silanol groups and carbon impurities have been suggested.

The financial support of project No. lzp-2018/1-0289 "Optical properties of advanced silicon dioxide-based materials for ultraviolet and high-power photonics" is reverently acknowledged. An additional support was received from the European Union's Horizon 2020 Framework Programme H2020-WIDESPREAD-01-2016-2017-TeamingPhase2 under grant agreement No. 739508

Na₂FeP₂O₇ – oglekļa kompozītmateriāla sintēze un elektroķīmiskās īpašības

Ināra Nesterova, Gints Kučinskis, Gunārs Bajārs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Na₂FeP₂O₇ ir daudzsološs nātriju jonu bateriju katodmateriāls. Pievienojot dažādas elektrovadošas oglekļa piedevas, var novērot materiāla elektroķīmisko īpašību uzlabošanu. Darbā sintezēts Na₂FeP₂O₇ ar un bez elektrovadošām oglekļa piedevām (glikozes, reducēta grafēna oksīda vai abu kombinācijas). Paraugiem veikti XRD, SEM, XPS un Ramana spektroskopijas mērījumi. Elektroķīmiskās īpašības analizētas, veicot uzlādes-izlādes, ciklētājamības un elektroķīmiskās impedances spektroskopijas mērījumus. Na₂FeP₂O₇ uzrādīja lādiņietilpību līdz 93 mAh/g (96% no teorētiskās vērtības). Augstāko ātrumspeļu uzrāda paraugs ar elektrovadošu oglekli (w=15%), kas veidojies no glikozes.

Synthesis and electrochemical properties of Na₂FeP₂O₇ – carbon composites

Inara Nesterova, Gints Kucinskis, Gunars Bajars
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Na₂FeP₂O₇ is a promising cathode material for sodium-ion batteries. Its electrochemical properties improve by adding different electroconductive carbon additives. In the study, Na₂FeP₂O₇/C was synthesized with and without electroconductive carbon additives (glucose, reduced graphene oxide or both). The quality of synthesized products was evaluated by XRD, SEM, XPS and Raman spectroscopy. Electrochemical properties were analysed by performing charge-discharge and cyclability measurements as well as electrochemical impedance spectroscopy. The synthesized Na₂FeP₂O₇ showed capacity up to 93 mAh/g (96% of theoretical capacity). We find that the rate capability was highest for sample with 15% conductive additive formed from glucose.

The financial support of project Advanced Materials for Sodium Ion Batteries, project No. 1.1.1.2/VIAA/1/16/166 is acknowledged

Ar elektroforētiskās izgulsnēšanas metodi iegūts pārejas metālu un reducēta grafēna oksīda anodmateriāls litija jonu baterijām

Kaspars Kaprāns, Mihails Karaušs, Gints Kučinskis, Gunārs Bajārs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Litija jonu baterija (LJB) ir enerģijas uzglabāšanas ierīce, kuras priekšrocības ir augsts enerģijas blīvums, augsts uzlādes - izlādes ciklu skaits un spēja saglabāt stabilu lādiņa ietilpību konstantas strāvas izlādes režīmā. Tomēr LJB praktiskais pielietojums joprojām ir ierobežots, īpaši augstas jaudas elektroierīcēs un elektriskajās automašīnās. Elektrodi ir būtiskas baterijas komponentes, kas tieši ietekmē bateriju veiktspēju.

Pētījumā kā LJB anoda materiāls tiek pētīts elektroforētiski izgulsnēts $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{TiO}_2/\text{rGO}$ kompozīts, tā kā Fe_2O_3 ir liela lādiņietilpība (1007 mAh/g), TiO_2 ir ķīmiski inerts, nodrošina struktūras stabilitāti uzlādes - izlādes ciklos un reducētam grafēna oksīdam ir augsta elektronu vadītspēja. Darbā tiek izmantots dažādu kvantitatīvo sastāvu pārejas metāla oksīdu elektrodu kārtiņas. Lai novērtētu baterijas šūnas veiktspēju paraugiem tika veikta atkārtota uzlādes/izlādes ciklu mērījumi, atrumspējas mērījumi (rate capability), cikliskā voltamperometrija un elektriskā impedances spektroskopija. Darbā iegūtos rezultātus var tālāk izmantot LJB ternāru struktūru elektroda materiālu pētījumos.

Electrophoretically deposited transition metal and reduced graphene oxide films as anode for lithium-ion batteries

Kaspars Kaprāns, Mihails Karauss, Gints Kucinskis, Gunars Bajars
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Lithium-ion batteries (LIBs), as one of the most important energy storage devices, have attracted large attention due to their advantages of high energy density, long cycle life and rate capability. However, the practical application of LIBs is still restricted, especially in electrical devices and hybrid electric vehicles. Electrode materials are key factors to affect the battery performance as energy storages device.

In this research electrophoretically deposited $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{TiO}_2/\text{reduced graphene oxide}$ composite used as LIBs anode. Iron oxide has gravimetric capacity 1007 mAh/g, titanium dioxide has high chemical stability and reduced graphene oxide with good electric conductivity. In this research different quantitative content of transition metal oxide in the electrode films are investigated. In order to estimate battery performance: cyclability, rate capability, cyclic voltammetry and electrical impedance spectroscopy are used. Results obtained in this research can be useful for future investigations of ternary electrode material for lithium - ion batteries.

The financial support of Scientific Research Project for students and young researchers Nr.SJZS/2020/6 realized at the ISSP University of Latvia is greatly acknowledged.

Litija jonu akumulatoru dzīves ilguma novērtēšana

Jūlija Hodakovska, Beāte Krūze, Ināra Nesterova, Gunārs Bajārs, Gints Kučinskis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Mūsdienās litija jonu akumulatori kļuva par izplatītu enerģijas avotu dažādās ierīcēs, jo tie spēj nodrošināt labus pielietojumiem atbilstošus parametrus (spriegumu, enerģijas blīvumu, lēnu pašizlādi). Litija jonu akumulatora dzīves ilgums un veselības stāvoklis ir vieni no parametriem, kas būtiski ietekmē praktisko pielietošanu. Pirmo parametru novērtē empīriski, ciklējot dažus no sērijas nejauši izvēlētos akumulatorus. Tā ir laikietilpīga metode, kas balstās uz vairākkārtējas uzlādes un izlādes ciklu atkārtošanos. Otrais parametrs komerciālajiem pielietojumiem nav standartizēts, bet zinātnieki ir izveidojuši vairākus modeļus, kas ļauj no dažādiem parametriem novērtēt akumulatora veselības stāvokli.

Ātra metode, kas ļautu noteikt akumulatora potenciālo dzīves ilgumu un veselības stāvokli balstoties uz izmantošanas laikā izmērāmiem parametriem, ļautu atrisināt dažus praktiskus jautājumus un savlaicīgi plānot aizvietošanu. Tas ir īpaši svarīgi komerciāliem pielietojumiem. Šajā prezentācijā tiek apskatīta mūsdienu situācija akumulatoru dzīves ilguma un veselības stāvokļa noteikšanā, kā arī pašu autoru pirmie iegūtie rezultāti.

Evaluation of Service Life of Lithium-Ion Batteries

Julija Hodakovska, Beate Kruze, Inara Nesterova, Gunars Bajars, Gints Kucinskis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

In the modern world Li ion batteries are widely spread energy source, and the reason for it is ability to ensure good working parameters, e.g. voltage, energy density and slow self-discharge. Two of important parameters that define practical usability are service life and state of health of the battery. The first is determined by empirical testing of several samples from the batch by cycling – a time-consuming method that involves repeated charging and discharging of the battery. Determination of state of health has not been standardized for commercial use, but several groups have developed different models to evaluate it by using various parameters of the battery.

A quick method for evaluating service life and state of health of the battery, based on an array of parameters collected during its use could solve several issues and allow to plan battery replacement in advanced. That is especially important for commercial implementations.

In this presentation, actual state of art in the area of battery service life prediction and state of health determination is presented along with our preliminary experimental results.

The financial support of LZP-2020/1-0425 project Litija jonu akumulatoru elektrodu un šūnu dzīves cikla prognoze, izmantojot strāvas un sprieguma mērījumus/Cycle life prediction of lithium-ion battery electrodes and cells, utilizing current-voltage response measurements is greatly acknowledged.

GCMS izmantošana elektrolīzes gāzu analizē - Gāzu hromatogrāfijas iespējas LU CFI

Pēteris Lesničenoks^{1,2}, Ainārs Knoks¹, Līga Grīnberga¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte*

Studentu un jauno zinātnieku granta ietvaros CO₂ elektrokatalītiskās sadalīšanās procesā iegūto produktu pētījumi tiek veikti izmantojot gāzu hromatogrāfijas un masspektrometrijas (GCMS) analītiskās metodes. Pētījumi atbilst 'Eiropas Zaļā kursa' noteiktajai prioritātei un industrijai svarīgā jomā, kā siltumnīcas efektu veidojošās gāzes - CO₂, pārvērst pielietojamā resursā – ogļūdeņražos (Power to X). Lai precīzi definētu lietderīgai elektrokatalīzei izmantojamus parametrus, nepieciešams veikt produktu monitoringu. To ir iespējams nodrošināt, izmantojot ātru un precīzu metodi - GCMS. Elektrokatalīzes procesā nodrošināšanai izvēlētais katalizators ir Eiropā pieejamāks materiāls – varš. Noteiktas vara nanostruktūras un mikrostruktūras ir efektīvākas salīdzinoši garajā 12 elektronu elektroķīmiskajā procesā, kurā notiek CO₂ reformēšana līdz C₂-C₃ ogļūdeņražiem. Gan uz elektroda radītais reakcijas produkts, gan tā elektroda ilgmūžība ir ļoti atkarīga no elektroda struktūras. GCMS priekšrocība ir iespēja noteikt gāzes parauga, šķidrā parauga sastāvu un, izmantojot iekšējā standarta metodi, kvantificēt nezināmus maisījumus.

Electrocatalytic gas product analysis – GCMS in ISSP UL

Peteris Lesnicenoks^{1,2}, Ainars Knoks¹, Liga Grinberga¹

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

²*FMSAC, Riga Technical University*

GCMS as analysis tool for electrocatalysis products of CO₂ is used in the young scientist and student project realized in ISSP UL to gather information that has been made available with recent local infrastructure improvements. The investigation is performed broadening the knowledge in field of electrocatalysis of most prominent greenhouse gases – CO₂. This is an important study for industry as a Power to X concept. To define the electrocatalysis parameters a precise monitoring of the products is need performed during synthesis and reliably in lab, which can be done using GCMS. The chosen catalyser for this process is Cu, as its nanostructures and microcrystals are uniquely useful in CO₂ conversion and is available in Europe in larger quantities than Pt-group metals. CO₂ conversion to C₂ and C₃ hydrocarbons on Cu structures does take a long 12 electron path. Both the product and longevity of the electrode is highly dependent on the structure of electrode. GCMS advantage is the possibility to identify composition of gas sample, liquid sample – and to use the internal standard method to quantify unknown mixtures.



Institute of Solid State Physics, University of Latvia as the Center of Excellence has received funding from the European Union's Horizon 2020 Framework Programme H2020-WIDESPREAD-01-2016-2017-TeamingPhase2 under grant agreement No. 739508, project CAMART²

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2020/09 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged

Kustīgu bioloģisko objektu elektromagnētiskā lauka viļņveida signāla reģistrēšanas ierīce.

Irina Gvardina, Alberts Kristiņš, Jānis Melderis, Juris Veinbergs¹,
A. Drebot, V. Stūre²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Sia "Vet Health Spektrum"*

Kustīga bioloģiskā objekta elektromagnētiskā lauka viļņveida signāla reģistrēšanas ierīce paredzēta kā sastāvdaļa sistēmai mastīta agrīnai diagnosticēšanai govīm. Izstrādi ierosināja Sia "Vet Health Spektrum".

Reģistrācijas komplekts sastāv no diviem atsevišķiem mezgliem - biosignāla uztveres bloka un datu uzkrāšanas bloka.

Nozīmīgākās biosignāla uztveres bloka sastāvdaļas: antenas tipa signāla pastiprinātājs ar joslas filtriem, analogais ciparu pārveidotājs, vadības mikrokontrolieris, atmiņa, datu pārraides/uztveršanas mezgls, sprieguma stabilizatori un autonomas barošanas avots. Bloks veidots uz TI mikrokontroliera bāzes, pielietojot unikālu programmatūru, tādējādi panākot pēc iespējas mazāku enerģijas patēriņu no akumulatora.

Ne mazāk svarīga ir otra reģistrācijas komplekta sastāvdaļa - datu uzkrāšanas bloks. To veido vadības komandu un datu uztveres modulis, kā arī personālais dators datu uzkrāšanai un primārai analīzei. No šī bloka paredzēts reģistrēto informāciju nosūtīt uz diagnostikas sistēmas datu apstrādes, analīzes un administrēšanas moduļiem, kā arī saņemt no tiem administratīvās komandas.

No datu uzkrāšanas bloka var saņemt informāciju .csv vai .wav failu veidā.

Electromagnetic field wave signal recording device for moving biological objects.

I. Gvardina, A. Kristiņš, J. Melderis, J. Veinbergs¹,
A. Drebot, V. Stūre²

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

²*Vet Health Spektrum Ltd.*

The device for recording the electromagnetic field wave signal of a moving biological object is intended as a component of a system for early diagnosis of mastitis in cows. The development was initiated by *Vet Health Spektrum Ltd.*

The registration set consists of two separate blocks - a biosignal receiving block and a data storage block.

The most important components of the biosignal receiving block: antenna-type signal amplifier with bandpass filters, analog-to-digital converter, control microcontroller, memory, data transmission / receiving block, voltage stabilizers and autonomous power supply. The block is based on the TI microcontroller, using unique software, thus achieving the lowest possible power consumption from the battery.

No less important is the second component of the registration device - the data storage block. It consists of a control command and data acquisition module as well as a personal computer for data storage and primary analysis. From this block, it is planned to send the registered information to the data processing, analysis and administration modules of the diagnostic system, as well as to receive administrative commands from them.

You can receive information from the data storage unit in the form of .csv or .wav files.

Elektriskās impedances mērīšana ar vienu sinhronās demodulācijas kanālu

Paul Annus¹, Alberts Kristiņš²

¹Tallinas Tehnoloģiskās universitātes Tomasa Johana Zēbeka elektronikas nodaļa

²Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Daudzās praktiskās mērīšanas situācijās dažādiem ierosinājumiem tiek iegūti dažādi parametri objekta vai ierīces izejā. To var iegūt, analizējot impulsa reakciju laika apgabalā vai novērtējot sarežģītu pārvades funkciju frekvenču apgabalā. Vēlāk var uzdot fāzes nobīdi un sinusoidālā ierosmes signāla amplitūdas izmaiņas pie dažādām frekvencēm. Būtībā tā ir divdimensiju problēma, kur var ērti izmantot kompleksos skaitļus, jo tiem ir gan reālās, gan imaginārās daļas. Parasti, nosakot objekta komplekso pārvadi, tiek izmantoti divi kanāli - I kanāls un Q kanāls vai kanāls reālajai kompleksa skaitļa daļai un vēl viens imaginārai daļai. To var uzskatīt par korelācijas izpildīšanos starp ierosmes un reakcijas signāliem divās pozīcijās: ar nulles fāzes nobīdi un 90 ° fāzes nobīdi. Tam nepieciešami divi identiski kanāli, kuru precīzu savietojamību ir grūti sasniegt. Turklāt divu kanālu izmantošana ir būtiski sarežģītāka nekā viena kanāla izmantošana un tā patērē vairāk enerģijas.

Vienkanāla noteikšanas alternatīva tika ierosināta, analizēta un pārbaudīta laboratorijā, lai iegūtu elektrisko bioimpedances signālu no radiālās artērijas. Piedāvātā metode ir noderīga, ja ir nepieciešams elektriskās bioimpedances portatīvs mazjaudas mērītājs, taču to var izmantot dažādās sinhronās mērījumu sistēmās. Shēma ir ievērojami vienkāršota, izmantojot divus nedaudz atšķirīgus signālus ierosmei un korelācijai.

Electrical Impedance Measurement with Single Synchronous Demodulation Channel

Paul Annus¹, Alberts Kristiņš²

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

²Institute of Solid State Physics, University of Latvia

In many practical measurement situations object's or device's output for different excitations is acquired. It could be acquired by analyzing impulse response in time domain or by estimating complex transfer function in frequency domain. Later one can be given with phase shift and magnitude change of the sinusoidal excitation signal at different frequencies. Essentially it is two-dimensional problem and complex numbers can be conveniently used since they have both real and imaginary parts. Typically, two channels are utilized when measuring complex transfer of an object. Namely I channel and Q channel or channel for real part of the complex number and another for the imaginary part. It can be viewed as performing correlation between excitation and response signals in two positions: with zero phase shift and 90° phase shift. It requires two identical channels, the exact identity of which is hard to achieve. In addition, usage of two channels is essentially more complicated than single channel and it consumes more energy.

Single-channel detection alternative is proposed, analyzed, and tested in the lab for the acquisition of the electrical bioimpedance signal at the radial artery. The proposed method is useful when wearable low power acquisition of the electrical bioimpedance is required, but it can be used in different synchronous measurement systems. Circuitry is significantly simplified at the cost of using two slightly different signals for excitation and correlation.

**As I rezonanses līniju 193,7 un 197,3 nm eksperimentālie oscilatoru stiprumi.
Moderzinātas iekārtas uz SPM-2 bāzes demonstrācija.**

*Armans Bžiškjans, Andris Vanags un Uldis Bērziņš
Latvijas Universitāte, Atomfizikas un Spektroskopijas Institūts.*

Mēs demonstrējam eksperimentālos iekārtu, kura ir izveidota uz spoguļa monohromatora SPM2 ar maināmu prizmu bāzes. Šī iekārta ir ļoti piemērota darbam spektra tālajā ultravioletajā daļā, ja tajā ir izmantota augstas kvalitātes prizma kvarca prizma. Augsta spektrālā izšķirtspēja ir nodrošināta staru divreiz laižot cauri prizmai. Augstu spektrālo jūtību nodrošina Fotoelektronu pavairotāja FEU 39 izmantošana.

Spektru ieraksts un līniju intensitāšu mērīšana ir automatizēta un iekārtas spektrālā jūtība ir noteikta izmantojot kalibrētas ūdeņraža un deitērija lampas.

Eksperimentā tika mērīta arsēna atomu relatīvo līniju intensitāte. Kā līniju avots tika izmantoti arsēna induktīvis saistītās plazmas avoti. Relatīvās līniju intensitātes tika izmērītas divām līniju grupām ar kopēju augšējo enerģētisko līmeni. No intensitāšu attiecībām tika noteiktas relatīvā pāreju varbūtības. Tās tika pārvērstas absolūtajos pāreju varbūtību lielumos izmantojot augšējo līmeņu dzūves laikus no literatūras. Astrofiziķiem, kuri nosaka elementu koncentrāciju zvaigznēs vai starpzvaigžņu objektos, ir nepieciešamas zināt novēroto līniju absorbcijas oscilatoru stiprumus. Gala rezultātā no absolūtajiem pāreju varbūtību lielumiem ir iegūti arsēna rezonanses līniju absorbcijas stiprumi 197.3 nm, $f = 0.127(15)$, un 193.8 nm $f = 0.059(7)$

The experimental oscillator strengths of As I resonance lines 193.7 and 197.3 nm: The demonstration of modernised experimental set-up based on SPM-2.

*Armans Bžiškjans, Andris Vanags un Uldis Bērziņš
Latvijas Universitāte, Atomfizikas un Spektroskopijas Institūts.*

We are demonstrating the experimental set-up based on the of mirror monochromator SPM-2 with substitutable prism. If prism made of high quality quartz is used, this set-up is very suitable for far ultraviolet region of spectra. The high spectral resolution is achieved by sending the light twice through prism. The high sensitivity is achieved by use of Photomultiplier tube FEU-39. The recording of spectra and evaluation of spectral lines is automated, and the calibration of spectral sensitivity is performed by using the calibrated hydrogen and deuterium lamps.

In the experiment the relative intensities of arsenic lines were measured As line sources were used the inductively coupled arsenic plasma light sources. The relative intensities were obtained for two line groups with common upper level. From the intensity ratios the relative transition probabilities were obtained, they were transformed to absolute scale by using the atomic lifetimes from literature.

Astrophysicists, who determine the concentration of elements in stars or interstellar objects, need to know the strengths of the absorption oscillators of the observed lines. As a result, the absorption strengths of arsenic resonance lines 197.3 nm, $f = 0.127(15)$, and 193.8 nm $f = 0.059(7)$ have been obtained from the absolute values of transition probabilities.

The financial support of ERDF project No 1.1.1.5/19/A/003. and ERAF project S369-ESS381-ZR-N-109 is greatly acknowledged.

Ciāna spektra efektivitāte baltajā LED avotā

Dāvis Zāģers, Sergejs Fomins
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Salīdzinot ar citiem gaismas avotiem, LED ir ļoti ekonomisks un uzticams avots, bet diemžēl gaismas avotu plaša izmantošana ietekmē cilvēka fizioloģiskos procesus. Pārmērīgas zilās gaismas iespaidā tiek izmainīts miega ritms jaucot cirkadiānu ciklu, tiek radīta papildu zilās gaismas deva tīklenei. Zilā gaisma ir vajadzīga dabisko procesu norisei, bet samērīgās devas. Zilā gaisma ~480 nm stimulē cirkadiāna ciklu, kāvējot miega hormona izdali epifīzē, kas liek mums ilgāk palikt nomodā. Moderniem avotiem ir pārsvarā izklaides funkcija un noskaņojumu veicinošs pielietojums, bet mūsdiā, pieeja varētu ļaut daudz efektīvāk izmantot gaismu fizioloģiskām vajadzībām. Izveidotajā gaismas avotā izmantotām šādām LED RAGCB (Red, Amber, Green, Cyan, Blue) komponentes, ciāna un dzintara krāsas LED ļauj izlīdzināt spektrālo līkni, lai tajā nebūtu izteiktu pīķu, optimālai krāsu atveidošanai. Eksperimentos noteicām, cik daudz spējam mazināt zilās gaismas komponenti, pie dažādām intensitātēm (25%-75%) un krāsu temperatūrām (3000K-6500K), lai šis avots sakristu ar doto references gaismas avotu. Eksperimentu dalībnieku rezultāti savā starpā bija līdzīgi, visvairāk atbildi ietekmēja gaismas avota spožums. Dotā eksperimenta dalībnieku atbildes liek secināt, ka daļu no samazinātās zilās gaismas var aizstāt ciāna un dzintara krāsas spektru.

Efficiency of cyan spectra for white LED source

Dāvis Zāģers, Sergejs Fomins
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Compared to other light sources, LED is an economic and reliable source, but unfortunately the widespread use of light sources affects human physiological processes. Excessive blue light changes the rhythm of sleep awake cycle by disturbing the circadian clock, giving an additional dose of harmful blue light to the retina. Blue light is needed for natural processes, but in reasonable doses. Blue light at ~ 480 nm stimulates the circadian cycle, releasing the release of sleep hormone in the epiphysis, which makes us stay awake longer. Modern sources have a predominantly entertaining and mood-boosting application, but we believe that the approach could allow to use led illumination tech for effective physiological purposes. We use the following LED RAGCB (Red, Amber, Green, Cyan, Blue) components in the created light source, cyan and amber LEDs allow to smooth the spectral curve so that there are no pronounced peaks, for optimal color reproduction. In the experiments we determined how much we can reduce the blue light component at different intensities and color temperatures (3000K-6500K) so that this source coincides with the given reference light source. The results of the experimental participants were similar, the answer was most influenced by the brightness of the light source. The answers of the participants of the given experiment suggest that part of the reduced blue light can be replaced by the cyan and amber components.

CuMo_{1-x}W_xO₄ cieto šķīdumu rezonanses rentgenstaru emisijas spektroskopijas pētījumi

Inga Pudža¹, Aleksandrs Kaļinko², Arturs Cintiņš¹, Aleksejs Kuzmins¹

¹Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

²Sinhrotrons DESY, Vācija

Polikristāliski CuMo_{1-x}W_xO₄ ($0.04 \leq x \leq 1.00$) cieto šķīdumu paraugi tika pētīti, izmantojot rentgenstaru rezonanses emisijas spektroskopiju (RXES) W L₃-malai ar mērķi sekot materiāla lokālās atomārās un elektroniskās struktūras izmaiņām atkarībā no temperatūras (10 - 300 K) un parauga sastāva.

Darbā tiek nodemonstrēts [1], ka RXES plaknes analīze sniedz noderīgu informāciju par volframa atomu koordināciju parauga tilpumā un ļauj noteikt 5d(W) stāvokļu kristāliskā lauka sašķelšanās parametru Δ . Turklāt, šo informāciju var iegūt no RXES plaknes, izmantojot divas dažādas pieejas: analizējot augstas izšķirtspējas caur fluorescenci detektētu rentgenabsorbcijas pie-malas struktūru (HERFD-XANES) un rentgenstaru emisijas spektrus ārpus rezonanses.

RXES metode ir labi piemērota *in-situ* mērījumiem un šajā pētījumā tika izmantota, lai iegūtu histerēzi, kas raksturo strukturālo fāžu pāreju starp α un γ fāzēm termohromajos CuMo_{1-x}W_xO₄ cietajos šķīdumos temperatūras ietekmē pat pie zemas volframa koncentrācijas ($x < 0.10$).

Resonant X-ray emission spectroscopy of CuMo_{1-x}W_xO₄ solid solutions

Inga Pudža¹, Aleksandr Kalinko², Arturs Cintins¹, Alexei Kuzmin¹

¹Institute of Solid State Physics, University of Latvia

²Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY), Germany

Resonant X-ray emission spectroscopy (RXES) was used to study polycrystalline CuMo_{1-x}W_xO₄ ($0.04 \leq x \leq 1.00$) solid solutions at the W L₃-edge with the aim to follow a variation of the local atomic and electronic structure of the material as a function of temperature (from 10 to 300 K) and sample composition.

We demonstrated [1] that the analysis of the RXES plane provides useful bulk sensitive information on the coordination of tungsten atoms and allows one to determine the crystal-field splitting parameter Δ for the 5d(W) states. Furthermore, this information can be extracted from the RXES plane using two different approaches: by analysing the high-energy resolution through fluorescence detected X-ray absorption near-edge structure (HERFD-XANES) and off-resonant X-ray emission spectra.

RXES method is well suited for *in-situ* measurements and was used here to determine the hysteretic behaviour of the structural phase transition between α and γ phases in thermochromic CuMo_{1-x}W_xO₄ solid solutions on cooling and heating, even at low ($x < 0.10$) tungsten content.

The financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2019/1 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.

[1] I. Pudza, A. Kalinko, A. Cintins, A. Kuzmin, *Acta Mater.* 205 (2021) 116581.

Baltā fosfora (P₄) struktūras un svārstību aprēķini

Čiro F. Tipaldi, Jevgeņijs Gabrusenoks
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Pētījumā apskatīts līdz šim salīdzinoši maz analizētais baltā fosfora molekulārais kristāls, izmantojot teorētiskos aprēķinus. To veikšanai γ -fāzei piedāvāta hipotētiska tilpumā centrēta kubiskā (BCC) kristālrežģa struktūra ar 217. telpas simetrijas grupu, kurā P₄ molekulu centri atbilst eksperimentāli zināmai struktūrai un kāda nereti novērojama citiem AX₄ tipa molekulārajiem kristāliem. Kombinējot *ab initio* un klasiskās molekulārdinamikas aprēķinu metodes, optimizēta šāda veida struktūra un pārbaudīta tās stabilitāte. Aprēķini izdarīti ar programmām CRYSTAL14 un GULP.

Veikti fononu aprēķini, izmantojot dažāda veida spēku laukus un potenciālus. Iegūtas fononu stāvokļu blīvumu un dispersijas līknes. Izteikti izdalās augstfrekvenču iekšmolekulāro svārstību apgabals un zemfrekvenču kristālrežģa svārstību apgabals. Režģa stabilitāte analizēta, aplūkojot fononu dispersijas dažādos Briljuēna zonas virzienos. Analizējot modu īpašvektorus, iespējams gūt priekšstatu par deformāciju virzieniem un to dabu. Pēc nestabilām modām iespējams noteikt deformāciju izraisītas fāžu pārejas.

Structural and lattice dynamical calculations for white phosphorus (P₄)

Čiro F. Tipaldi, Jevgeņijs Gabrusenoks
University of Latvia Institute of Solid-State Physics

In this work the molecular crystal of white phosphorus has been analysed through theoretical methods. For calculations a hypothetical body-centered cubic (BCC) structure with space group symmetry No. 217 is proposed for the γ -phase – a structure which keeps the P₄ molecular centres in the same positions as in the empirically known structure of the γ -phase and which is common for various kinds of molecular crystals of the AX₄ form. Combining *ab initio* calculations and classical MD this structure has been optimised and its stability checked using lattice dynamics. The programs used for calculations are CRYSTAL14 and GULP.

Phonon calculations have been conducted using various force fields and potentials, phonon DOS and dispersion curves are obtained. There is a clear distinction between regions of low frequency lattice and high frequency intermolecular vibrations. The stability of this lattice structure is analysed by observing the phonon dispersion along various symmetry lines of the Brillouin zone. Analysing the eigenvectors one can obtain an understanding of the characteristics of deformations. Unstable modes give insight into possible phase transitions due to deformations.

Baltā fosfora α fāzes Ramana izkliedes spektri un kubiska režģa dinamikas modelis

Ingars Lukoševičs, Jevgēnijs Gabrusenoks, Georgijs Čikvaidze
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Baltais fosfors (BF) ir molekulārs kristāls, kas sastāv no tetraedriskām P₄ molekulām, kuru savstarpējais izkārtojums mainās pārejot starp trim pazīstamajām fāzēm: α , β , γ . Darbā apskatīti α fāzes Ramana izkliedes spektri kā arī spekulēts par vienkāršas struktūras svārstību modeli harmoniskā tuvinājumā.

BF molekulu tvaika Ramana izkliedes spektrā novērojamas trīs līnijas, tās atbilst svārstību simetrijām A₁, T₂ un E un šo svārstību frekvences vispārīgā gadījumā aprakstāmas ar trim spēka lauka konstantēm, kas reducējas uz vienu neatkarīgu parametru, apskatot aksiāli simetrisku spēku pieņēmumu.

No *ab initio* optimizācijas aprēķiniem izveidots hipotētisks BF α fāzes struktūras modelis ar augstu simetriju, kam izveidots klasiskais režģa dinamikas modelis, ņemot vērā iekšmolekulāro mijiedarbību un mijiedarbību starp tuvākajiem atomiem atšķirīgās molekulās, kura vispārīgā gadījumā aprakstāma ar četrām spēka konstantēm. Šajā modelī atrasti spēka lauka parametri, balstoties uz eksperimentāliem datiem un *ab initio* aprēķiniem. Eksperimentāli joslu platumus Ramana izkliedes spektrā iespējams samazināt, pazeminot parauga temperatūru, kas iespējams līdz fāzu pārejas $\alpha \rightarrow \beta$ temperatūrai, līdz kurai nav novērota joslu sašķelšanās.

Raman scattering spectra and the cubic lattice dynamics model of white phosphorus α phase

Ingars Lukoševičs, Jevgēnijs Gabrusenoks, Georgijs Čikvaidze
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

White phosphorus (WP) is a molecular crystal consisting of tetrahedral P₄ molecules. Their orientation changes when WP changes between the three known phases: α , β , γ . In this work in addition to discussion of Raman scattering of α phase dynamical model of a simple structure is speculated in harmonic approximation.

Raman spectra of WP vapor shows three bands which correspond to vibrations with symmetries A₁, T₂ and E. The frequencies of the vibrations in a general case can be described by three force constants, which reduce to a single independent parameter under the assumption of axially symmetric forces between atoms.

A hypothetical WF α phase model with a high symmetry has been created from *ab initio* optimization calculations. Classical lattice dynamics model has been created for this structure, considering intramolecular forces and interaction with closest atoms in different molecules which is in a general case described with four force constants. In this model force field constants have been found based on experimental data and *ab initio* calculations. Experimentally the band FWHM can be reduced by lowering the sample temperature which is possible down to phase transition $\alpha \rightarrow \beta$ temperature, down to which no splitting of bands is observed

Ar CVD metodi sintezētu dimanta kristālu Ramana spektroskopija

Alise Podelinska¹, Jevgēnijs Gabrusenoks¹, Theo Andreas Scherer², Gaetano Aiello², Anatoli I. Popov¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Karlsruēs Tehnoloģiju institūts, Lietišķo materiālu institūts*

Dimanta kristāliem atkarībā no izmēriem ir daudz dažādu pielietojumu. Darba gaitā tika apskatīti CVD (ķīmiska tvaiku nogulsnešana) dimanta paraugi, kas tika audzēti uz Si substrāta disku virsmām ar diametriem 56 mm un 42 mm. Uz parauga virsmas ar optisko mikroskopu tika novēroti mikroskopiskie telpiskie defekti.

Izmantojot Ramana spektrometru, CVD dimantam tika izmērīti spektri defektu tuvumā un tieši tajos, kā arī attālumā no tiem. Iegūtajiem parauga spektriem tika konstatēta tipiskā dimanta josla, kā arī luminiscences joslas, kuru intensitāte defektu tuvumā pieaug. Lai noteiktu paraugu homogenitāti, tika veikta parauga skenēšana ar 1 mm soli starp mērījumiem, katru punktu apskatot vairākas reizes ar noteiktu laika intervālu. Tika novērots, ka pie 1330 cm^{-1} korelācijas starp spektra joslas pusplatumu un pozīciju nav – tiem ir dažādi izmaiņas cēloņi. Pēc Ramana spektra luminiscences joslu pozīcijām pie 1400, 3100 un 5200 cm^{-1} (ar 532 nm ierosmi) tika noteikts, ka tās atbilst NV^0 , NV^- un SiV centru luminiscencēm. Dimanta 1330 cm^{-1} joslas parametri tika noteikti izmantojot Voigta profilu, kur parauga patieso Ramana spektra formu raksturo Lorenca funkcija, bet Gausa funkcija – spektrometru.

Iegūtie rezultāti ļauj noteikt optimālos eksperimenta nosacījumus, lai iegūtu nepieciešamo īsto dimanta joslas pusplatumu.

Raman spectroscopy of diamond crystals synthesized by CVD method

Alise Podelinska¹, Jevgenijs Gabrusenoks¹, Theo Andreas Scherer², Gaetano Aiello², Anatoli I. Popov¹

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

²*Karlsruhe Institute of Technology, Institute for Applied Materials*

Diamond crystals depending on the size have many different applications. In this work CVD (chemical vapour deposition) diamond samples were grown on Si substrate disk surfaces with diameters of 56 mm and 42 mm. With an optical microscope microscopic spatial defects on the surface of the sample were observed.

Using a Raman spectrometer, the spectra of the CVD diamond were measured near and directly in the defects, as well as at a distance from them. For the obtained sample spectra both a typical diamond band and luminescence bands with increasing intensity near the defects were detected. To determine the sample homogeneity, it was scanned with a 1 mm step between measurements, and each point was measured several times with a certain time interval. It was observed that at 1330 cm^{-1} there is no correlation between the half-width and the position of the spectral band – there are the different reasons for the change in the spectral parameters. The position of the luminescence bands of the Raman spectrum at 1400, 3100 and 5200 cm^{-1} (with 532 nm excitation) were determined to correspond to the luminescence of the NV^0 , NV^- and SiV centres. The parameters of the 1330 cm^{-1} diamond band were determined using the Voigt profile, where the natural Raman spectral shape of the sample is characterized by the Lorentz function, and by the Gaussian function – the spectrometer.

The obtained results allow to determine the optimal experimental conditions to obtain the required natural half-width of the diamond.

Lokālās struktūras īpatnības NiWO₄-ZnWO₄ cietos šķīdumos

Georgijs Bakradze¹, Aleksandrs Kaļinko^{1,2}, Aleksejs Kuzmins¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Vācijas Elektronu Sinhrotrona pētniecības centrs (DESY), Vācija*

Lai izpētītu termiskās un statistiskās nesakārtotības ietekmi uz lokālo struktūru mikrokristāliskajos Zn_cNi_{1-c}WO₄ cietos šķīdumos, ir veikti rentgenstaru absorbcijas spektroskopijas mērījumi W L₃, Ni un Zn K malām atkarībā no temperatūras (10-300 K) un koncentrācijas ($c=0.0-1.0$). Izmantojot apgriezto Montekarlo (RMC) metodi, ir modelēti eksperimentālie EXAFS spektri vairākām absorbcijas malām vienlaicīgi. Ir parādīts [1], ka cieto šķīdumu veidošanās noved ne tikai pie spēcīgiem izkropļojumiem [WO₆], [NiO₆] un [ZnO₆] oktaedru pirmajās koordinācijas sfērās, bet arī pie struktūras relaksācijas un izmaiņām metāla jonu otrajā koordinācijas sfērā.

Peculiarities of local structure in NiWO₄-ZnWO₄ solid solutions

Georgijs Bakradze¹, Aleksandrs Kalinko^{1,2}, Aleksejs Kuzmins¹

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

²*Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY), Germany*

Temperature-dependent (10-300 K) x-ray absorption spectroscopy at the W L₃-edge, Ni and Zn K-edges was used to investigate the influence of thermal disorder and static distortions on the local structure in microcrystalline Zn_cNi_{1-c}WO₄ solid solutions with $c=0.0-1.0$. Reverse Monte Carlo (RMC) modelling with an evolutionary algorithm approach at several absorption edges simultaneously was applied to extract structural information from the experimental EXAFS spectra. It has been shown [1] that the formation of solid solutions is accompanied not only by strong distortions of [WO₆], [NiO₆], and [ZnO₆] octahedral in the first coordination shells, but also by structural relaxation and changes in the second coordination shell of metal ions.

G.B. acknowledges the financial support provided by the State Education Development Agency for project No. 1.1.1.2/VIAA/3/19/444 (agreement No. 1.1.1.2/16/I/001) realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia.

[1] G. Bakradze, A. Kalinko, A. Kuzmin, Low Temp. Phys. 46 (2020) 1201-1205.

Biomassas ķīmiskās aktivācijas temperatūras ietekme uz N-dopētu oglekļa struktūru un skābekļa reducēšanās reakciju

Ance Plavniece^{1,2}, Aleksandrs Volperts¹, Gaļina Dobeļe¹, Aivars Žūriņš¹, Katlin Kaare³

¹*Latvian State Institute of Wood Chemistry, Riga, Latvia*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts*

³*National Institute of Chemical Physics and Biophysics, Tallinn, Estonia*

Pētījuma mērķis bija sintezēt ar slāpekli dopētu nanoporainu aktivēto ogli (AC-N) ar augstu specifisko virsmu kā izejvielu izmantojot kokogles. Iegūtie AC-N materiāli tika pārbaudīti zemas temperatūras degvielas šūnas katodā kā katalizators skābekļa reducēšanai (ORR).

Oglekļa materiāla ORR aktivitāte AC-N gadījumā, kas aktivēta 800 °C temperatūrā ar NaOH, parādīja tādus pašus rezultātus, kā komerciālais 20% Pt / C katalizators. Noteikts, ka sintezēto AC-N katalizatoru elektrokatalītiskās īpašības ir atkarīgas no attīstīta virsmas laukuma (vairāk nekā 2000 m²/g), mikro un mezoporu attiecības un-piridīniskā slāpekļa satura. Iegūtie rezultāti parādīja, ka AC-N ir daudzsoļi materiāli, kurus var izmantot ORR degvielas šūnu elementos.

Influence of Biomass Chemical Activation Temperatures on Nitrogen Doped Carbon Structure and Oxygen Reduction Reaction

Ance Plavniece^{1,2}, Aleksandrs Volperts¹, Galina Dobeļe¹, Aivars Zhurinsh¹, Katlin Kaare³

¹*Latvian State Institute of Wood Chemistry, Riga, Latvia*

²*Institute of General Chemical Engineering, Riga Technical University*

³*National Institute of Chemical Physics and Biophysics, Tallinn, Estonia*

The goal of this research was synthesis nitrogen doped nanoporous activated carbons (AC-N) with high specific surface using wood charcoal as raw material. AC-N were tested as candidates for application as oxygen reduction (ORR) cathode in the low-temperature fuel cells.

The ORR activity of the carbon material in the case of AC-N activated with NaOH at 800 °C showed the same results as the 20% Pt/C catalyst. Electrocatalytic properties of the synthesized AC-N catalysts may be associated with the highly developed surface area (more than 2000 m²/g), micro and mesoporous and high percentage of pyridinic nitrogen.

The obtained results showed that AC-N is promising materials for application in fuel cells as cathode for the ORR.

The study was supported by LZP-2018/1-0194 project “Nanostructured Nitrogenated Carbon Materials as Promoters in Energy Harvesting and Storage Technologies (NN-CARMA)” and Izp-2020/2-0019 project “New biomass origin materials hybrid carbon composites for energy storage (BiComp)”.

Ar slāpekli funkcionalizēta grafēna sintēze un pielietojumi elektronikā

Roberts Oliņš^{1,2}, Pēteris Lesničenoks^{1,2}, Jānis Kleperis¹, Ainārs Knoks¹, Ingars Lukoševičs¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte*

Grafēns tika atklāts 21. gadsimta sākumā, bet ir jau pierādījis sevi daudzos pielietojumos – enerģētikā, medicīnā, elektronikā, pārtikas un sporta nozarē, kā arī citur. Tur savs ieguldījums ir arī dažādos veidos iespējamā nanostrukturētā oglekļa materiālu funkcionalizēšana gan ar nemetālu, gan metālu atomiem, piešķirot izejas materiālam uzlabotas esošās vai jaunas īpašības, pat katalītisko aktivitāti.

Elektroķīmiskā eksfoliācija un mikroviļņu sintēze ir visērtākās un dabai draudzīgākās ar slāpekli funkcionalizēta grafēna iegūšanas metodes. Mūsu darba ietvaros tiek pētīta eksfoliācijas un mikroviļņu sintēzes parametru ietekme uz iegūtā nanostrukturētā oglekļa materiālu daļiņu lielumu un biežumu un iespēju to funkcionalizēt ar slāpekli.

Eksfoliācija tiek veikta NaN_3 , kā arī NaNO_2 elektrolītu šķīdumā, kas piedāvā atšķirīgu skābekļa grupu esamību vidē. Mikroviļņu sintēzei tik izmantotas tādas viegli pieejamas vielas kā citronskābe, karbamīds un ūdens, kas tiek pakļauti elektromagnētiskai radiācijai. Iegūtās daļiņas pēc sintēzes tiek mazgātas ar ūdeni, lai atbrīvotos no izejmateriālu pārpalikumiem, kā arī tās tiek sadalītas pēc daļiņu izmēra.

Mazākā frakcija ($0,1\mu\text{m}$), kas iegūta sintēzes procesā, tiek izmantotas tintes printerī dažādu materiālu apdrukāšanai, lai iegūtu elektrību vadošu slāni. Lielā frakcija ($>0,45\mu\text{m}$) tiek izmantota elektrību vadošu tinšu izveidei elektrodiem, piemēram, kapacitatoru izveidei.

Synthesis of N-doped graphene and it's applications in electronics.

Roberts Olins^{1,2}, Peteris Lesnicenoks^{1,2}, Janis Kleperis¹, Ainars Knoks¹, Ingars Lukosevics¹

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

²*MLKF, Riga Technical University*

Graphene was discovered in the early 21st century, but has already proven itself in many applications - energy, medicine, electronics, food and sports, and more. Functionalization of nanostructured carbon materials with both non-metallic and metallic atoms is possible in various ways, imparting enhanced or new properties to the starting material, even catalytic activity.

Electrochemical exfoliation and microwave synthesis are the most convenient and nature-friendly nitrogen-functionalized graphene production methods.

The exfoliation process is performed in NaN_3 as well as NaNO_2 electrolyte which provides less quantity of oxygen groups that tend to strongly bond at defect sites on the graphene. Easily acquirable substances such as citric acid, carbamide and water were used in the microwave synthesis of graphene. The solution of substances was exposed to electromagnetic radiation for various amounts of time. After synthesis, the obtained particles are washed with water to dispose of raw material residues, as well as they are divided by particle size.

The smallest fraction ($0.1\mu\text{m}$) obtained in the synthesis process can be used for ink-jet printing electrically conductive layers on different materials. The large fraction ($> 0.45\mu\text{m}$) is used to create electrically conductive inks for drop casting electrodes, for applications in capacitors.

Authors acknowledge financial support from Latvian Science Council project LZP FLPP No. LZP-2018/1-0194.

Osmozes ātruma caur dažādām protonus vadošām polimēru kompozītu membrānām salīdzinājums

Reinis Kaparkalējs, Einārs Sprūģis, Guntars Vaivars
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

CO₂EXIDE projekta ietvaros tiek plānota CO₂ un ūdens pārvēršana par etilēnu un ūdeņraža peroksīdu energoefektīvos elektroķīmiskās sintēzes reaktoros. Viena no svarīgākajām šādu reaktoru sastāvdaļām ir jonu apmaiņas membrāna. Tipiski šim nolūkam tiek izmantotas Nafion membrānas, bet, to augsto ražošanas izmaksu dēļ, tiek pētītas arī dažādas alternatīvas, no kurām vienas no daudzsološākajām ir sulfonēta poliēterēterketona (SPĒĒK) un tā kompozītu membrānas.

Optimālai CO₂ elektroķīmiskās reducēšanas šūnas darbībai, tās katoda un anoda telpās tiek izmantotas atšķirīgas elektrolīta, tipiski KHCO₃ šķīduma, koncentrācijas. Šī darba mērķis bija salīdzināt osmozes ātrumu caur standarta Nafion un SPĒĒK membrānām, kā arī SPĒĒK/cirkonija dioksīda kompozītmembrānām, lai izvērtētu ZrO₂ efektu uz osmozes ātrumu caur tām.

Darbā tika izmantota vienkārša divu kameru šūna, kurā par atdalītāju tika izmantota pētāmā membrāna, un par elektrolītiem tika izmantoti 1,0 mol/L un 2,5 mol/l KHCO₃ šķīdumi. Šķīdumu koncentrācijas izmaiņas laikā tika noteiktas netieši, mērot šķīdumu elektrovadītspēju. Iegūtie rezultāti norāda uz lineāru sakarību starp kompozītmembrānas ZrO₂ saturu un osmozes ātrumu caur to.

A study of osmosis rate in several proton conducting polymer composite membranes

Reinis Kaparkalējs, Einārs Sprūģis, Guntars Vaivars
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Project CO₂EXIDE aims to develop methods and materials for production of ethylene from CO₂, water, and renewable energy. This conversion is done in an electrochemical cell, which requires several key components, one of which is a proton conducting membrane. Nafion membranes are known to be the standard choice for such a task, however, many alternatives are being explored. One of such alternatives is sulfonated polyetheretherketone (SPEEK), a cheaper material with many suitable properties.

For optimal operation of the CO₂ electrochemical reduction cell, different concentrations of electrolyte, typically KHCO₃, are used in cathode and anode sides. The aim of this work was to quantify the rate of osmosis in SPEEK and reference Nafion membranes as well as several SPEEK/zirconium oxide composites, to evaluate possible effects of additives on the rate of osmosis.

A simple two chamber cell was used, with the membranes as separators, and 1,0 mol/L and 2,5 mol/L KHCO₃ solutions as electrolytes. Concentration changes were determined indirectly, by measuring electric conductivity of the electrolytes. Obtained results show a clear correlation between the zirconium dioxide content of the composite membranes and rate of osmosis through them.

The financial support of European Union's Horizon 2020 Research and Innovation Program project under grant agreement No 768789 is greatly acknowledged.

24. februāris

Organiskie materiāli

Teorija un modelēšana

Optiskie materiāli

Plānās kārtiņas un pārklājumi

Materiālu apstarošana

Skalāru un vektoriālu mikrohogrammu ieraksts azobenzola molekulārajā stiklveida kārtiņā

Andris Ozols, Pēteris Augustovs, Sugavaneswaran Balasubramani
Rīgas Tehniskās universitātes Tehniskās fizikas institūts

Mikrohogrammu ieraksta izpēte ir aktuāla sakarā hologrāfisko disku daudz lielāko informācijas ietilpību salīdzinājumā ar citiem optiskajiem diskiem (CD, DVD, Blu-Ray). Darbā ir eksperimentāli izpētīts nefokusētu un fokusētu hologrāfisko režģu (HR) ieraksts ar lineārām p - p un cirkulārām ortogonālām L - R ierakstošo un nolasošo staru polarizācijām un ar režģu periodiem $2\mu\text{m}$ un $10\mu\text{m}$ molekulārajā azokārtiņā B11. Nefokusētu HR diametrs bija 1.17 mm , bet fokusētu- 0.14 mm . Darba gaitā tika attīstīta staru diametra, it sevišķi fokusētu, mērīšanas metodika.

Konstatēts, ka pie noteiktas ieraksta polarizācijas un noteikta HR perioda fokusēšana samazina ieraksta efektivitāti (REF faktoru), tajā skaitā difrakcijas efektivitāti samazina 2-8 reizes. L - R ieraksts ir efektīvāks nekā p - p ieraksts abos gadījumos. HR periods dažādi ietekmē ieraksta efektivitāti atkarībā no fokusēšanas. Pie abām polarizācijām nefokusēta ieraksta efektivitāte ir lielāka $10\mu\text{m}$ perioda gadījumā, bet fokusēta- $2\mu\text{m}$ perioda gadījumā. Tas norāda uz B11 kārtiņas telpisko frekvenču raksturlielnes atkarību no gaismas intensitātes. Pieaugot intensitātei kārtiņas telpiskā izķirtspēja palielinās.

Referātā rezultāti azokārtiņai B11 tiks salīdzināti ar skalāru mikrohogrammu ierakstu amorfās As-S-Se kārtiņās.

Scalar and vector microhologram recording in an azobenzene molecular glassy film

Andris Ozols, Peteris Augustovs, Sugavaneswaran Balasubramani
²Institute of Technical Physics, Riga Technical University

Studies of microhologram recording are of interest because holographic disks have much higher information capacity in comparison with other optical disks (CD, DVD, Blu Ray). In this work, we have experimentally studied unfocused and focused holographic grating (HG) recording in an azobenzene molecular film B11 with linear p - p and orthogonal circular L - R polarizations of recording and readout beams, and with HG periods of $2\mu\text{m}$ and $10\mu\text{m}$. HG diameters were 1.17mm and 0.14mm for unfocused and focused HG, correspondingly. Measurement technique of laser beam diameters was developed, especially useful for focused laser beams.

It was found that for certain recording beam polarizations and HG period focusing diminishes recording efficiency (REF factor) including diffraction efficiency decrease 2 to 8 times. L - R recording is more efficient than p - p recording in both cases.

HG period effect on recording efficiency is different for unfocused and focused recording. Recording efficiency is higher for $10\mu\text{m}$ in the case of unfocused recording, and it is higher for $2\mu\text{m}$ in the case of focused recording. Thus spatial frequency response of the B11 film depends on light intensity. Spatial resolution power of the film increases when the light intensity is increased.

In the report, the results obtained for B11 film will be compared with scalar microhologram recording in As-S-Se films.

Ink-Jet printēšanas tehnika lokālu organisku pārklājumu veidošanai

Anete Bērziņa¹, Arturs Bundulis¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Mūsdienās aktīvi tiek pētītas iespējas veidot dažādas fotoniskas ierīces, piemēram, interferometrus, mikrorezonatorus, attīstot pilnīgi optisku ierīču veidošanu. Šādu ierīču veidošanai pamatā ir dažādas smalkas fotoniskas struktūras (piemēram, viļņvadi, fotoniskie kristāli) un aktīvie pārklājumi. Viens no veidiem, kā veidot homogēnus lokālus pārklājumus, ir ar ink-jet tehnoloģijas palīdzību, kas būtu svarīgi ne tikai viļņvadu fotoniskajām ierīcēm, bet arī organisko LED un saules bateriju izveidošanā. Ar šādu printeri iespējams veidot gan organiskas, gan neorganiskas plānās kārtiņas uz dažādiem materiāliem, veidojot arī hibrīd struktūras.

Šī darba mērķis ir iepazīstināt LU CFI darbiniekus ar iekārtas izmantošanas iespējām un līdzšinējām problēmām. Printēšanas process iekļauj tintes uzjaukšanu, pamatnes sagatavošanu un pārklājuma printēšanu. Šajā darbā organiskie materiāli – PMMA un polisulfins - tika printēti uz stikla, kurš tika piestiprināts pie karsējamas printera pamatnes. Lai pārliecinātos par tintes atbilstību printera prasībām, tiek veikti viskozitātes mērījumi. Līdz šim ir veidoti organikas šķīdumi ar hlorbenzolu un anizolu. Lai iegūtu vienmērīga biezuma kārtiņu, tika pētīta kārtiņas kvalitāte atkarībā no pamatnes karsēšanas temperatūras, izmantoto sprauslu skaita, attāluma starp pilieniem, sprauslām pieliktā sprieguma, printēšanas sprieguma līknes un izprintēto slāņu daudzuma.

Ink-Jet Printing technique for local organic cladding deposition

Anete Berzina¹, Arturs Bundulis¹

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

Nowadays scientists are actively searching for methods, how to make photonic devices, for example interferometers or microresonators, in order to move towards an all-optical device manufacturing. To make such device it is necessary to make thin structures (for example, waveguides and photonic crystals) and active coatings. One of the options to make local homogeneous coating is by using ink-jet technology, which would be important not just for waveguide photonic devices, but also in development of organic LED and solar cells. With such printer it is possible to make organic and inorganic thin layers on various materials, which also allows to create hybrid structures.

The main target of this work is to introduce other scientists of ISSP UL with the possibilities of using this printer and with the problems we have had until now. Printing process includes ink creation, sample surface preparing and printing itself. In this work we printed organic materials – PMMA and polysulfone – on glass, which was attached to heated platen. To make sure that the ink is compatible with the printer, it is necessary to measure its viscosity. We have made solutions with chlorobenzene and anisole. To get more homogenous layer, we have compared the quality of coatings with different platen heating temperatures, number of used nozzles, nozzle voltage, waveform, drop spacing and number of layers.

Organisko pusvadītāju luminiscences pastiprināšana ar sudraba nanodaļiņu virsmas plazmona rezonansi

Raivis Silis, Jeļena Miķelsone, Aivars Vembris
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Metāla nanodaļiņu virsmas plazmonu rezonanse var uzlabot organisko pusvadītāju luminiscenci, tāpēc tas var atvērt ceļu uz gaismas modulatoru, laboratorijas mikroshēmu vai sensoru attīstību, kas ir uz organisko pusvadītāju bāzes. Šī darba ietvaros tika iegūtas dažāda izmēra sudraba nanoprizmas ūdens šķīdumā, kas tika stabilizētas ar Na citrātu un PVP (Polivinipirolidons). Tā kā lielākā daļa luminoforu nešķīst ūdenī, nanodaļiņas nepieciešams pārnest uz organisku vidi, kas tika panākts, izmantojot ar ultraskaņas metodi un stabilizatoru aizvietošanu. Iegūtie nanodaļiņu šķīdumi tika pievienoti DWK-1-TB mazmolekulāra organiskajam stikla šķīdumam, no kura tika iegūtas arī plānās kārtiņas. Iegūtajos paraugos tika pētīta luminiscences izmaiņa, kvantu iznākums, atkarībā no nanodaļiņu veida.

Enhancement of semiconductor luminescence by surface plasmon resonance of silver nanoparticles

Raivis Silis, Jelena Mikelsone, Aivars Vembris
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Metal nanoparticle surface plasmon resonance can enhance luminescence of organic semiconductors, therefore it may pave the way to development of organic semiconductors based light modulators, or sensors. Within the framework of this work, silver nanoprisms of various sizes were obtained in aqueous solution, which were stabilized with Na citrate and PVP (Polyvinipyrrolidone). Since most phosphors are insoluble in water, nanoparticles need to be transferred to an organic medium, which was achieved through the use of ultrasonic and stabilizer replacement. The obtained nanoparticle solutions were added to the DWK-1-TB small-molecule plexiglass solution, from which thin films were also obtained. The change of luminescence, quantum yield, depending on the type of nanoparticles was studied in the obtained samples.

Kerra efekta spektrālās dispersijas pētījumi organiskajos materiālos, izmantojot Z-Scan metodi

Mareks Markāns, Arturs Bundulis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

2019. gadā publicēta statistika par interneta lietotāju skaitu visā pasaulē liecina, ka laika posmā no 2011. līdz 2019. gadam tas ir divkārtšojies.¹ Skaidri novērojams, ka šī tendence ir augoša, līdz ar to arī pārraidīto datu apjoms palielinās, tādēļ nepieciešams uzlabot komunikāciju un datorsistēmu sistēmu veiktspēju, ko šobrīd ierobežo datu apstrādes ātrums. Ja šobrīd elektroniskie tranzistori ļauj informāciju apstrādāt nanosekundēs, tad optiskie tranzistori varētu būt pat tūkstoš reizes ātrāki - informāciju varētu apstrādāt pikosekundēs. Lai izgatavotu optiskos tranzistorus, nepieciešami materiāli ar izteiktu divfotonu absorbciju un Kerra efektu. Kā nelineāri optiskos materiālus izmantojam organiskos materiālus, jo, manipulējot ar to struktūru, iespējams panākt nepieciešamās optiskās īpašības, kas ļautu pārvirzīt datu apstrādi no infrasarkanā uz redzamo spektru.

Šajā darbā tika pētītas organisko materiālu nelineāri optiskās īpašības ar Z-Scan metodi, kas ir populāra, jo ļauj vienlaikus novērot gan Kerra efektu, gan divfotonu absorbciju. Paraugus sagatavoja, organiskos materiālus šķīdinot hloroformā un iepildot kvarca kivetēs. Kā starojuma avots tika izmantots pikosekunžu lāzeru ar maināmu gaismas viļņa garumu. Tika veikti spektrālie mērījumi, mainot arī lāzera impulsa atkārtšanās frekvenci.

Study of Kerr effect spectral dispersion in organic materials by Z-Scan method

Mareks Markans, Arturs Bundulis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

A statistical analysis published in 2019 suggests that over the period from 2011 till 2019 the number of users of the internet has doubled.¹ This tendency indicates a strong increase in the amount of transmitted data through the internet. Therefore it is crucial to improve computer and communication systems which are now limited by computing speed. The electronic transistor allows us to process data in matter of nanoseconds, yet an optical transistor would make the speed of processing about a thousand times quicker - information could be processed in picoseconds. To manufacture such transistors nonlinear optical materials are needed. We study organic nonlinear optical materials due to the fact that by manipulating the organic structure of molecules we can make the material possess beneficial qualities, which would allow us to shift the computing region from infrared to visible spectrum.

In this work nonlinear optical properties of organic materials were studied with the Z-Scan method, which is used to simultaneously observe two-photon absorption and the Kerr effect. Samples were prepared by mixing organic compounds with chloroform and then inserted into cuvettes. A picosecond laser with adjustable wavelength was used as the source of irradiation to carry out spectral measurements.

¹ <https://www.itu.int/en/ITU-D/Statistics/Documents/facts/FactsFigures2019.pdf>

Organiskās gaismu emitējošās diodes no oriģināliem zilo gaismu izstarojošiem TADF savienojumiem

Margarita Anna Zommere, Aivars Vembris, Saulius Grigalevicius
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts
Polimēru ķīmijas un tehnoloģijas departaments, Kauņas Tehnoloģiskā Universitāte

OLED ir gaismas emitējošās diodes, kas savas augstās efektivitātes, ātrā atbildes laika un vieglās pagatavošanas dēļ mūsdienās ieņem stabilu vietu jaunu displeju ražošanā. Jaunākās paaudzes OLED sevī iekļauj TADF (Termiski aktivētas aizkavētas fluorescences) savienojumus, kuri spēj līdz pat 100% ierosinātos stāvokļus konvertēt gaismā.

Darbā tika pētīti TADF difenilsulfonu un benzofenonu atvasinājumi ar karbazola grupām, ar mērķi atrast potenciālu zilās gaismas emiteri. TADF efekta pierādīšanai, tika izmantoti degazēti un nedegazēti šķīdinātāji, jo skābeklis mijiedarbojas ar ierosinātajiem tripleta stāvokļiem un būtiski samazina savienojumu emisijas. No dotajiem savienojumiem tika izveidotas struktūras ITO/ PEDOT:PSS (40nm)/ Emitters/ TPBi(25nm)/ LiF(1nm)/ Al(120nm). Tālākai izpētei tika atstāti 3 savienojumi, kuri uzrādīja visaugstāko efektivitāti. Šiem savienojumiem tika veidotas viesu-saimnieka sistēmas, ar mērķi, uzlabot emisijas spējas. Par matricu tika izvēlēti 3,3",6,6" - Tetrakis(1,1-dimethylethyl)-9'-ethyl-9,3':6',9"-ter-9H-carbazole un 3,6-Bis(3-ethyl-N-carbazolyl)-N-phenylcarbazole savienojumā ar 1,3-Bis[2-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazol-5-yl]benzene. Sistēmām tikai izmērītas absorbcijas un emisijas īpašības plānās kārtiņās, kā arī izveidoti OLED. Labākie savienojumi uzrādīja spilgtumu virs 120 cd/m^2 .

Organic light emitting diodes from original blue light emitting TADF compounds

Margarita Anna Zommere, Aivars Vembris, Saulius Grigalevicius
Institute of Solid State Physics, University of Latvia
Department of Polymer Chemistry and Technology, Kaunas University of Technology

OLEDs are high-efficiency, fast response speed, and simple manufacturing light emitting devices and one of the most important display technologies today. The new generation OLEDs consist of thermally activated delayed fluorescent (TADF) materials, which has 100% of the conversion of excited states into the light.

The research work for TADF compounds - diphenylsulfone and benzophenone derivatives with carbazole groups has been done. The study aimed to find potential blue light emitters. To prove TADF properties of investigated compounds, the optical properties were examined in both degassed and non – degassed solvents, because the oxygen interacts with the triplet states and significantly reduces the emission intensity. From given compounds basic structures of OLEDs were prepared: ITO/PEDOT:PSS(40nm)/Emitters /TPBi(25nm) /LiF(1nm)/ Al(120nm). For further study, 3 compounds were left that showed the highest efficacy. For these compounds host materials, have been investigated and developed to maximize the performance of the OLED. As host were 3,3",6,6" - Tetrakis(1,1-dimethylethyl)-9'-ethyl-9,3':6',9"-ter-9H-carbazole and 3,6-Bis(3-ethyl-N-carbazolyl)-N-phenylcarbazole and 1,3-Bis[2-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazol-5-yl]benzene used. For such systems, the absorption and emission in the thin layers were measured, as well as OLEDs were prepared. The best compounds showed brightness above 120 cd/m^2 .

Fāžu stabilitātes DFT aprēķini $Zn_xMg_{1-x}O$ cietajos šķīdumos

Aleksejs Gopejenko, Oļegs Lisovskis, Sergejs Piskunovs, Laima Trinklere, Guna Kriekē, Rihards Ruska

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Tālā UV starojuma fotonu sensori, balstīti uz plašas aizliegtās zonas pusvadītājiem, var tikt izmantoti kā bioloģiskie un ķīmiski sensori ozona noteikšanai, kā detektori ūdens attīrīšanai un piesārņošanas līmeņu noteikšanai jebkurā bioloģiskā vidē. ZnO-MgO pseidobinārai sistēmai ar regulējamo aizliegto zonu no 3.3 eV līdz 7.8 eV ir potenciāla iespēja būtiski pastiprināt sensoru spēju vienlaicīgi reģistrēt signālus ar dažādu enerģiju. Pēdējie eksperimentālie rezultāti norāda uz to, ka ZnO un MgO savstarpējas šķīdības ierobežojumus var pārvarēt, stabilizējot vircīta $Zn_{1-x}Mg_xO$ epitaksiālos slāņus ar augsto MgO saturu un kubiskos $Zn_{1-x}Mg_xO$ epitaksiālos slāņus ar augsto ZnO saturu, izmantojot substrātus ar zemu režģa nesaskaņotību, tādus kā

$ScAlMgO_4$, MgO un Cu_2O . Tajā pašā laikā, ir svarīgi veikt šādu sistēmu simulēšanu, lai sniegtu prognozes par to stabilitāti un piemērojamības robežām, jo ZMO sistēmu teorētisko pētījumu nav daudz, un pētnieki-eksperimentatori gūtu labumu no šādām prognozēm. Aizliegtās zonas un zonu mālu pozīciju uzvedība ir labāk prognozējama, bet vienlaicīgi ir svarīgi arī sniegt infrasarkanus spektrus un izpētīt fāžu stabilitāti pie dažādiem sastāviem. Šajā prezentācijā mēs paziņojam šos DFT (blīvuma funkcionāla teorijas) līmeni iegūtos rezultātus, kas attiecas uz divām augstāk minētajām ZMO konfigurācijām un veicam salīdzinājumu ar šobrīd pieejamiem eksperimentāliem rezultātiem.

Phase stability of $Zn_xMg_{1-x}O$ solid solutions: Prediction from DFT simulations

Aleksejs Gopejenko, Oļegs Lisovski, Sergejs Piskunov, Laima Trinklere, Guna Kriekē, Rihards Ruska

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Deep UV photon sensors based on wide-bandgap semiconductors can be used as biological and chemical sensors for ozone detection, detectors for water purification, determination of pollution levels in any biological agent. The ZnO-MgO pseudobinary system, which has a tunable bandgap from 3.3 eV to 7.8 eV, has potential to significantly enhance the ability of a sensor to detect signals at different energies simultaneously. Recent experimental results indicate that the limitation of ZnO and MgO mutual solubilities can be broken by stabilizing the high MgO-content wurtzite $Zn_{1-x}Mg_xO$ and high ZnO-content rocksalt $Zn_{1-x}Mg_xO$ epilayers by using low lattice-mismatch substrates such as $ScAlMgO_4$, MgO and Cu_2O . At the same time, it is important to perform simulations of such systems in order to provide forecasts for their stability and applicability boundaries, since, to our knowledge, theoretical studies on ZMO systems are not abundant at the moment of publication, and experimentalists would benefit from the predictions. While band gap and band edge position behavior is more predictable, it is also important to provide IR spectra and consider phase stability at different compositions. In this presentation we report these results for the two ZMO configurations obtained at the density functional theory (DFT) level and compare with available experiments.

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

Co jona magnētiskā stāvokļa un lokālās apkārtnes raksturošana BaCoO_{3-δ} perovskītā

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

Protonus vadošās keramiskās degvielas šūnas (PCFC) piedāvā alternatīvu cietvielu degvielas šūnām, kas balstās uz oksīdu vadītspēju. Pretēji elektrolītu materiāliem, optimālos katodu materiālus vēl nepieciešams identificēt, meklējot cieto šķīdumu sastāvu ar pietiekami augstu elektronu un protonu vadītspēju, kā arī izprast jonu vadītspēju ietekmējošos faktorus. Nesenos eksperimentālos pētījumos kā PCFC katoda materiāls optimizēts (Ba,Sr,La)(Fe,Co,Zn,Y)O_{3-δ} perovskīts [1].

Šajā darbā, izmantojot blīvuma funkcionāla (DFT) skaitliskos aprēķinus superšūnā, tika analizētas bārija kobalta oksīda (BCO) elektroniskās un strukturālās īpašības gan idealizētā savienojumā, gan vakanču (Vo) klātbūtnē. Tāpat ideālam BCO tika identificēta pseido-kubiskā struktūra. Iegūtie rezultāti ļauj ieviest kobalta jonu lokālās apkārtnes stāvokļa raksturojumu, kas pēc tā ļautu spriest par kobalta magnētiskajiem stāvokļiem. Papildu sarežģītība rodas Co³⁺ magnētiskajam stāvoklim lineāri mainoties atkarībā no Co-Vo attāluma. Tāpat Co³⁺ un Co⁴⁺ joni BCO tiecas ieņemt vidēja spina stāvokli pretstatā Fe joniem tādos savienojumos kā (Ba,Sr)FeO_{3-δ} un (La,Sr)FeO_{3-δ}, kur Fe ieņem augsta spina stāvokli [2,3]. Superšūnas aprēķini realizēti ar CRYSTAL17 [4] programmu, atomu orbitāļu lineārās kombinācijas tuvinājumā, izmantojot B1WC un PBE0 hibridos funkcionālus.

Characterization of Co ion oxidation state and local structural distortions in BaCoO_{3-δ}

Dāvis Zavickis, Guntars Zvejnieks, Eugene Kotomin, Deniss Gryaznov
Institute of Solid State Physics, University of Latvia, Latvia

Protonic ceramic fuel cells (PCFCs) represent an important alternative to oxide conducting solid oxide fuel cells demonstrating higher ionic 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 [1].

In this work we used density functional calculations and supercell approach to analyze properties of barium cobalt oxide (BCO) with and without oxygen vacancies (Vo's) with the focus on atomic and electronic structure. We were able to identify the pseudo-cubic lattice structure for ideal BCO without Vo's. Results obtained allow us to characterize local structural distortions and oxidation state of cobalt ion. A complexity comes from the fact that the magnetic moment of Co³⁺ varies with the Co-Vo distance. Furthermore, Co³⁺ and Co⁴⁺ ions prefer intermediate spin states unlike Fe ions in (Ba, Sr)FeO_{3-δ} and (La, Sr)FeO_{3-δ} perovskites [2,3]. Supercell calculations were performed using CRYSTAL17 [4] software within the linear combination of atomic orbitals (LCAO) approximation, using advanced hybrid B1WC and PBE0 density functionals.

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

[1] R. Zohourian, R. Merkle, G. Raimondi, J. Maier, *Mixed-conducting perovskites as cathode materials for protonic ceramic fuel cells: Understanding the trends in proton uptake*, *Advanced Functional Materials*, vol 38., no 35., (2018).

[2] D. Gryaznov, R. Merkle, E. A. Kotomin, J. Maier, *Journal of Materials Chemistry A* 4, 13093 (2016);

[3] M. Hoedl, D. Gryaznov, R. Merkle, E. A. Kotomin, J. Maier, *J. Phys. Chem. C.*, 2020, 124, 11780-11789

[4] R. Dovesi, V. R. Saunders, C. Roetti, et al., *CRYSTAL17 User's Manual*, University of Torino, Italy, (2017)

[4] R. Dovesi, V. R. Saunders, C. Roetti, et al., *CRYSTAL17 User's Manual*, University of Torino, Italy, (2017)

Selektivitātes parametra noteikšana konkurējošām skābekļa evolūcijas un ūdeņraža peroksīda veidošanās reakcijām uz grafēna modeļa elektrodiem.

Anna Ivanova¹, Andrejs Česnokovs¹, Dmitrijs Bočarovs¹, Kai S. Exner²
¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*
²*Dīsburgas-Esenes Universitāte*

Šajā pētījumā ar blīvuma funkcionāla teorijas (DFT) aprēķiniem tiek pētītas konkurējošās skābekļa un ūdeņraža peroksīda (H₂O₂) veidošanās reakcijas periodiskajos grafēna modeļos ar dažādām aktīvo saišu koncentrācijām. DFT aprēķinu apvienošana ar *ab initio* termodinamiskiem apsvērumiem ļauj gūt vēl nebijušu ieskatu par grafēnu saturošu elektrodu aktivitātes un selektivitātes tendencēm kā funkcijas no eksperimentāli variējamiem parametriem. Darba rezultāti rāda ka gan elektroda virsmas pārklājums ar reakcijas intermediem, gan arī pieliktais elektroda potenciāls būtiski ietekmē Faradēja efektivitāti H₂O₂ elektrokatalītiskajā ražošanā. Tas ļauj iegūt H₂O₂ veidošanās efektivitātes kritērijus katalizatoriem, kas var noderēt turpmākajiem pētījumiem, lai realizētu selektīvu H₂O₂ veidošanos uz oglekļa elektrodu materiāliem.

Understanding Selectivity for the Competing Oxygen Evolution and Hydrogen Peroxide Formation Reactions on Graphene Model Electrodes

Anna Ivanova¹, Andrew Chesnokov¹, Dmitry Bocharov¹, Kai S. Exner²
¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*
²*University of Duisburg-Essen*

In present study the competing oxygen evolution and hydrogen peroxide (H₂O₂) formation reactions for periodic models of graphene with different active-site concentrations are studied by means of density functional theory (DFT) calculations. Linking the DFT calculations to *ab initio* thermodynamic considerations enables gaining unprecedented insight into the activity and selectivity trends of graphene-based electrodes as a function of applied bias. We illustrate that both the coverage of intermediates on the electrode surface as well as the applied electrode potential have a significant effect on the Faradaic efficiency for the electrocatalytic production of H₂O₂. This allows deriving design criteria for H₂O₂ formation, which may serve as a guideline for further studies to realize selective formation of H₂O₂ by carbon-based materials.

ZnO ar Ir piemaisījumu lokālā struktūra: eksperimentālo rezultātu un DFT aprēķinu salīdzinājums

Andrejs Česnokovs¹, Deniss Grjaznovs¹, Juris Purāns¹, Aleksejs Kuzmins¹, Jevgēnijs Kotomins^{1,2},
Natālija V. Skorodumova^{3,4}

¹*Cietvielu fizikas institūts, Latvijas Universitāte, Rīga, Latvija*

²*Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart, Germany*

³*Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Uppsala, Sweden*

⁴*Department of Materials Science and Engineering, KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden*

Šajā pētījumā, liekot uzsvāru uz lokālo atomāro struktūru apkārt Ir joniem ZnO plānajās kārtiņās ar dažādu Ir koncentrāciju, mēs apkopojam hibrīdus blīvuma funkcionāla teorijas (DFT) aprēķinus ar rentgenstaru absorbcijas spektroskopijas (XAS) eksperimentiem, lai sniegtu aprakstu Ir-O kompleksiem, ieslēgtiem ZnO matricā. Struktūras pētījumus papildina materiāla termoelektrisko īpašību (elektroniskā vadītspēja, Zēbeka koeficients) aprēķini un izvērtējums tā spējai uzrādīt p-tipa vadāmību.

Mēs parādām ka visiem apskatītajiem Ir-O kompleksiem, augstās Ir koncentrācijas apstākļos, ir potenciāls būt p-tipa vadītājiem.

Local atomic structure of Ir-doped ZnO: a comparison between experimental results and hybrid DFT calculations

Andrew Chesnokov¹, Denis Gryaznov¹, Juris Purans¹, Alexei Kuzmin¹, Eugene Kotomin^{1,2}, Natalia V. Skorodumova^{3,4}

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

²*Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart, Germany*

³*Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Uppsala, Sweden*

⁴*Department of Materials Science and Engineering, KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden*

In this study, focusing on the local atomic structure around Ir ions in ZnO thin films with different iridium content, we combine hybrid density functional theory (DFT) calculations and X-ray absorption spectroscopy (XAS) experiments to describe structural properties of Ir-O complexes embedded in ZnO matrix. As a follow-up to the structural investigations, we calculate thermoelectric of this material, such as the electronic conductivity and Seebeck coefficient, discussing its potential to become a p-type conductor.

We demonstrate that all explored complexes, at high enough Ir concentration, have a potential for p-type conductivity.

The financial support of ESF project 1.1.1./18/A/073 is greatly acknowledged.

Ar retzemju metālu joniem dopēto SrMoO₄ monokristālu luminiscences spektrāli kinētiskās īpašības

Viktorija Pankratova¹, Elizaveta E. Dunaeva², Anna P. Kozlova³, Roman Shendrik⁴, Anatolijs Šarakovskis¹ un Vladimirs Pankratovs¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts, Rīga, Latvija*

²*Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Maskava, Krievija*

³*National University of Science and Technology «MISIS», Maskava, Krievija*

⁴*Vinogradov Institute of Geochemistry, SB RAS, Irkutsk, Krievija*

Molibdāti ar formulu MMoO₄ (kur M = Ca, Sr, Pb, Cd) ir piesaistījuši ievērojamu interesi ņemot vērā to dažādās īpašības, galvenokārt saistībā ar katalīzi un pigmentiem, kā arī saistībā ar fluorescējošajiem un scintilējošajiem materiāliem. Īpaši CaMoO₄ ir pazīstams ar tā fluorescenci spektrālajā apgabalā no zilās līdz zaļajai gaismai atkarībā no dopēšanas un kristalizācijas pakāpes. Šajā darbā mēs ziņojam par ar retzemju metālu joniem (RE) dopētiem SrMoO₄ monokristāliem, jo to optiskās un luminiscences īpašības līdz šim tika slikti pētītas, salīdzinot ar citiem molibdātiem.

Optiski homogēni ar dažādām RE koncentrācijām dopēti SrMoO₄ monokristāli tika iegūti, izmantojot Čohraļska metodi ar audzēšanas un svara kontroles datorprogrammu. Nedopētu un ar RE (Eu, Pr) dopētu monokristālu luminiscences spektrāli kinētiskās īpašības, kā arī to temperatūras atkarība, tika pētītas, ierosinot ar pārskaņojamo lāzeru. Tiks prezentēta novērojamo matricas un RE luminiscences spektrāli kinētisko īpašību detalizēta analīze. Tiks skaidrots un apspriests enerģijas pārnese procesu mehānisms no matricas uz RE elementiem un RE lādiņa kompensācija.

Time-resolved luminescence of rare-earth doped SrMoO₄ single crystals

Viktorija Pankratova¹, Elizaveta E. Dunaeva², Anna P. Kozlova³, Roman Shendrik⁴, Anatolijs Šarakovskis¹ and Vladimir Pankratov¹

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

²*Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

³*National University of Science and Technology «MISIS», Moscow, Russia*

⁴*Vinogradov Institute of Geochemistry, SB RAS, Irkutsk, Russia*

Molybdates MMoO₄ (where M = Ca, Sr, Pb, Cd) have attracted considerable interest in view of various features, mainly related not only to catalysis and color pigments but also including fluorescent and scintillating materials. In particular, CaMoO₄ is known for its fluorescence ranging from blue to green emission, depending on specific doping and crystallinity. In this work, we report results for rare-earth (RE) doped SrMoO₄ single crystals because their optical and luminescence properties are poorly studied so far comparing with other molybdates.

The Czochralski method with a special growth and weight control PC program was used to obtain optically homogeneous SrMoO₄ single crystals doped with different concentrations of RE elements. Time-resolved luminescence characteristics as well as their temperature dependencies of undoped and RE (Eu, Pr) doped single crystals have been measured and under tunable laser excitations. The detailed analysis of the observed time-resolved luminescence properties of intrinsic and RE emissions will be presented. The mechanism of energy transfer processes from host lattice to RE elements and RE charge compensation will be elucidated and discussed.

Viktorija Pankratova acknowledges the financial support of ISSP UL Scientific Research Project for Students and Young Researchers (SJZ/2020/05).

Ar Yb³⁺ un Tm³⁺ aktivētu nanodaļiņu augšup-pārveidotās luminiscences pielietošana fotolitogrāfijā, optiskā ieraksta veidošanai negatīva toņa SU8 fotorezista struktūrā.

Ernests Tropiņš, Jūlija Perveņeckā, Kaspars Vītols, Viesturs-Tenis Viksna, Jānis Teterovskis, Jurgis Grūbe, Aivars Vembris, Jeļena Butikova, Guna Kriekē un Māris Sprīngis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Augšup-pārveidota luminiscence ir process, kas notiek ar retzemju joniem aktivētos materiālos, optiski tos ierosinot, kā rezultātā izstarotais starojums ir anti-Stoksa nobīdīts attiecībā pret ierosmes starojumu. Mūsdienās perspektīvs augšup-pārveidotās luminiscences pielietošanas virziens ir fotolitogrāfija. Tradicionāli ekspozīcija ar UV starojumu notiek caur virsmu, kur limitējošais faktors ir fotojutīga slāņa biezums. Biezos paraugos (>10 μm) lielākā starojuma daļa tiek absorbēta struktūras virsējos slāņos, kā rezultātā fotorezista dziļākie slāņi netiek eksponēti. Taču sajaucot fotorezistu ar retzemju elementiem aktivētām nanodaļiņām, kurās notiek augšup-pārveidotā luminiscence, ekspozīcija notiktu no iekšienes visā viesā-saimnieka (nanodaļiņu/fotorezista) sistēmas tilpumā. Līdzīgi augšup-pārveidotā luminiscence būtu izmantojama fotorezista un organisku hromoforu molekulu sistēmu eksponēšanai, jo hromoforu augstā absorbcija fotolitogrāfijā izmantotajā UV starojumam nozīmē, ka tradicionāli eksponējot fotojutīgās hromoforu molekulas tiek iznīcinātas. Turpretim sajaucot sistēmu, piemēram, ar Yb³⁺ un Tm³⁺ retzemju jonu aktivētām nanodaļiņām, tās ekspozīcijai varētu izmantot starojumu, kuru hromoforu molekulas absorbētu daudz mazāk, kā rezultātā tas netiktu sagrautas.

Darba ietvaros ar Yb³⁺ un Tm³⁺ aktivētas nanodaļiņas iejauktas fotorezistā SU8. Pētītas šīs sistēmas pielietošanas iespējas optiskā ieraksta veidošanai fotorezista tilpumā nanodaļiņās, ar 975 nm lāzerdiodi, ierosinot augšup-pārveidoto luminiscenci. Izvērtējot sistēmu turpmākās pielietošanas iespējas, organiskās hromoforas saturošu sistēmu veidošanai un pielietošanai medicīnā, telekomunikācijās u.c. tehnoloģijās pieprasīto, gaismu emitējošo mikro-struktūru veidošanai.

With Yb³⁺ and Tm³⁺ activated nanoparticle up-conversion luminescence application in photolithography, for optical writing in the structure of negative SU8 photoresist.

Ernests Tropiņš, Jūlija Perveņeckā, Kaspars Vītols, Viesturs-Tenis Viksna, Jānis Teterovskis, Jurgis Grūbe, Aivars Vembris, Jeļena Butikova, Guna Kriekē un Māris Sprīngis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Up-conversion luminescence is a process that occurs in materials activated with rare-earth ions, when they are optically excited, which results in emission of radiation with an anti-Stokes offset in relation to excitation radiation. Nowadays perspective application for up-conversion luminescence is in photolithography. Traditional exposure with UV radiation happens through the surface, and it is limited by the thickness of photo sensitive layer. In thick samples (>10 μm) most of the radiation is absorbed in the upper layers, which results in unexposed deeper layers. This issue could be solved by mixing photoresist with nanoparticles activated with rare-earth ions, in which up-conversion luminescence occurs, so exposure would happen in material volume and all of the photoresist would get exposed. Similarly, up-conversion luminescence could be used to expose a photoresist mixed with organic chromophores. This mixture cannot be exposed traditionally because chromophores absorb most of the UV radiation. However, if up-converting nanoparticles are added, radiation which is absorbed less could be used, resulting in better exposure.

In this work system of SU8 photoresist mixed with up-converting nanoparticles were created. We will show that it is possible to create optical writing in systems volume, by exciting nanoparticles with a 975 nm laser diode. The possible application in creation of systems containing organic chromophores for use in medicine, telecommunications and other technologies demanded light emitting micro-structure creation will be discussed.

This research is funded by the Latvian Council of Science, project "Up-conversion luminescence photolithography in organic compounds using nanoparticles/photoresist composition", project No. lzp-2019/1-0422.

Ar tuliju un iterbija aktivētu NaYF₄ nanodaļiņu sintēze intensīvas augšup-pārveidotās luminiscences iegūšanai

Viesturs Tenis Vīksna, Jānis Teterovskis un Jurgis Grūbe
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Šajā darbā ir tiks apskatīts luminiscējošu nanodaļiņu sintēzes process, kuras tiek aktivētas ar Tm un Yb joniem. Retzemju joni nodrošina to, ka sintezētajās nanodaļiņās var novērot augšup-pārveidoto luminiscenci zilajā un ultravioletajā spektrālajā apgabalā, ierosinot ar infrasarkanā starojumu (976 nm). Sajaucot šādas sintezētas nanodaļiņas ar fotorezistu, ir iespējams eksponēt fotorezistu materiāla tilpumā, kas ļauj izmantot šādu materiālu fotolitogrāfijā.

Nanodaļiņu sintēzei tiek izmantota termolīzes metode. Darba veikšanai tika izveidota nanodaļiņas sintēzes iekārta: trīsskakla kolba, kura ir ievietota magnētiskajā sildītājā. Lai sintēzes process noritētu sekmīgi, lielākā daļa sintēzes ir jānotiek argona atmosfērā (tiek veikti trīs vakuuma un argona aerācijas cikli). Nanodaļiņas augšanas process notiek pie 300 °C, kad mainot karsēšanas ilgumu ir iespējams izaudzēt nanodaļiņas ar dažādiem izmēriem. Darbā tiek sintezētas nanodaļiņas, kuras var raksturot ar Core and Core+Shell struktūru, lai iegūtu vēlamās spektrālās īpašības. Nanodaļiņu izmēri tiek noteikti ar elektronu mikroskopijas palīdzību. Sintezētajiem paraugiem tika uzņemti augšup-pārveidotā luminiscences spektri zilajā un ultravioletajā spektra apgabalā, ierosinot ar infrasarkanā starojumu (976 nm), lai salīdzinātu luminiscences joslu attiecības.

Synthesis of thulium and ytterbium activated NaYF₄ nanoparticles for intense up-conversion luminescence

Viesturs Tenis Vīksna, Jānis Teterovskis un Jurgis Grūbe
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

In this work the process of synthesis of luminescent nanoparticles, which are activated by Tm and Yb ions, will be considered. Rare earth ions ensure that up-conversion luminescence can be observed in the synthesized nanoparticles in the blue and ultraviolet spectral regions when excited by infrared radiation (976 nm). By mixing such synthesized nanoparticles with photoresist, it is possible to expose the photoresist in a volume of material, which allows such a material to be used in photolithography.

The thermolysis method is used for the synthesis of nanoparticles. To perform the work, the nanoparticle synthesis setup was created: a three-necked flask, which is placed in a magnetic heater. For the synthesis process to be successful, most of the synthesis must take place under an argon atmosphere (three vacuum and argon aeration cycles are performed). The nanoparticles growth process takes place at 300 °C whereby changing the heating time it is possible to grow nanoparticles with different sizes. Synthesized nanoparticles can be characterized by the Core and Core+Shell structure to obtain the desired spectral properties. Nanoparticle sizes are determined by the electron microscopy. Up-conversion luminescence spectra in the blue and ultraviolet spectral regions were measured for the synthesized samples, excited by infrared radiation (976 nm) to compare luminescence bands ratios.

This research is funded by the Latvian Council of Science, project "Up-conversion luminescence photolithography in organic compounds using nanoparticles/photoresist composition", project No. lzp-2019/1-0422

AlN:Mn un AlN:Eu luminiscences mehānismi

Rihards Ruska, Baiba Bērziņa, Laima Trinklere, Janis Čīpa
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Jaunu sarkano gaismu starojošo materiālu meklējumos, tika pētīta ar Mn un Eu aktivētu AlN materiālu luminiscence. Pētīšanas metodes ietvēra fotoluminiscences (PL) un tās ierosmes spektru mērījumus dažādās temperatūrās. Bez tam tika pētīta arī rentgenluminiscence un tās dzišana.

AlN:Mn nano pulveru PL spektros dominēja labi zināmā Mn^{2+} jonu luminiscences josla ar maksimumu pie 600 nm. To varēja ierosināt ar gaismu no diviem spektrālajiem rajoniem, kuru maksimumi atradās pie 260 nm un 520 nm. Bez tam tika novērota arī nezināmu defektu luminiscence pie 650 nm. AlN:Mn tika novērota Mn jonu ilgstoša luminiscence.

AlN:Eu keramikās ar vairākām Eu koncentrācijām tika pētīta Eu jonu luminiscence. To PL spektros tika novērota josla gan pie 530 nm, gan 600 nm, kuras atbilstoši attiecina uz Eu^{2+} un Eu^{3+} jonu spīdēšanu. Tās varēja ierosināt kā ar redzamo, tā arī ar UV gaismu. Pētījumā galvenā vērība tika pievērsta 530 nm joslai, jo tā nepārklājās ar citu defektu luminiscenci.

Eksperimentālo rezultātu analīze ļauj piedāvāt vairākus mehānismus, kas ir atbildīgi par novēroto Mn un Eu jonu luminiscenci. Tie ir iekšcentra un rekombinācijas mehānismi, kas ir tieši atkarīgi no ierosinošās gaismas spektrālā rajona un kas ļauj izskaidrot paraugos novērotos procesus.

Luminescence mechanisms of AlN:Mn and AlN:Eu

Rihards Ruska, Baiba Berzina, Laima Trinkler, Janis Čīpa
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

In search of new red light emitting materials, the luminescence of Mn- and Eu-activated AlN materials was studied. Research methods included measurements of photoluminescence (PL) and its excitation spectra at different temperatures. Besides, X-ray luminescence spectra and luminescence lifetimes were also studied.

The PL spectra of AlN:Mn nano powders were dominated by the well-known Mn^{2+} ion luminescence band with a maximum at 600 nm. It could be excited by light from two spectral regions with peaks at 260 nm and 520 nm. Luminescence of unknown defects at 650 nm was also detected. Phosphorescence of Mn ions in AlN:Mn was observed.

The luminescence of Eu ions was studied in AlN:Eu ceramics with several different Eu concentrations. PL bands at 530 nm and 600 nm were observed. They are commonly attributed to the luminescence of Eu^{2+} and Eu^{3+} ions, respectively. These bands could be excited by both visible and UV light. The research focused on the 530 nm band because it did not overlap with the luminescence of other defects.

The analysis of the experimental results allows proposal of several mechanisms that are responsible for the observed luminescence of Mn and Eu ions. They include intra-center and recombination mechanisms that are directly dependent on the spectral region of the excitation light and that allow to explain the processes observed in samples.

The financial support of Latvian Sciences Council Grant No. lzp-2019/1-0443 and CAMART² is greatly acknowledged.

ZnO plāno kārtiņu temperatūras atkarīgā fotoluminiscence

Ramūnas Nedzinskas¹, Laima Trinklere², Liuwen Chang³, Mitch Chou³

¹*Fizikas un tehnoloģijas zinātņu centrs, Viļņa, Lietuva*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts, Rīga, Latvija*

³*Valsts Sun Jat Sena Universitātes Kristālu pētniecības centrs, Kaosunga, Taivāna*

Zinka oksīds (ZnO) ir pusvadītāju materiāls, kas, pateicoties platai aizliegtai zonai (3.37 eV) un lielai eksitona saites enerģijai (60 meV) pie istabas temperatūras, ir piemērots izmantošanai optoelektroniskām ierīcēm UV spektrālā rajonā. Lielākais izaicinājums ZnO pielietojumam elektroniskās ierīcēs ir saistīts ar kvalitatīvu un stabilu *p*-tipa ZnO izveidošanu. Saskaņā ar pēdējiem zinātniskiem atklājumiem, IB grupas elementi, ieskaitot varu (Cu), tiek uzskatīti par visdaudzsološākiem piemaisījumiem, kas varētu nodrošināt *p*-tipa vadāmību ZnO.

Šajā darbā tiek pētītas virtcīta tipa ZnO plāno kārtiņu optiskās īpašības, izmantojot fotoluminiscences (PL) mērījumus plašā temperatūras diapazonā (3-300 K). Novērotās PL joslas tiek izskaidrotas ar lādiņu nesēju dinamikas dažādiem procesiem ZnO plānajās kārtiņās. Piemēram, šaurā josla augstāko enerģiju rajonā rodas pateicoties starpzonu optiskajām pārejām ZnO epitaksiālajā kārtiņā, bet PL joslas zemāko enerģiju rajonā ir saistītas ar defektu stāvokļiem materiāla aizliegtajā zonā. Bez tam, izmantojot aktivācijas enerģijas aprēķinus tiek apspriesti iespējamie lādiņa nesēju pārvietošanās mehānismi.

Temperature-dependent photoluminescence of ZnO (0002) thin films grown on Cu (111) substrate by electrodeposition

Ramūnas Nedzinskas¹, Laima Trinkler², Liuwen Chang³, Mitch Chou³

¹*Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius, Lithuania*

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

³*Center of Crystal Research, National Sun Yat-sen University, Kaohsiung, Taiwan*

Zinc oxide (ZnO) is an attractive semiconductor material for near-ultraviolet (UV) optoelectronic devices, owing to the wide bandgap (3.37 eV) and high exciton binding energy (60 meV) at room temperature. However, the major challenge for ZnO-based device applications lies in achieving the high-quality and stable ZnO of *p*-type. According to the recent scientific findings, group IB elements including copper (Cu) are suggested as the most promising to realize the *p*-type conductivity of ZnO.

In this work, optical properties of wurtzite-ZnO thin films, electrodeposited on Cu (111) substrate, are investigated using temperature-dependent (3-300 K) photoluminescence (PL) spectroscopy.

The PL features observed are attributed to different processes of carrier dynamics in the ZnO thin film structures studied. In particular, the sharp high-energy feature is due to near-band-edge optical emission from ZnO epitaxial layer, while low-energy PL bands are related to the presence of defect states within a bandgap of ZnO. Additionally, possible transfer mechanisms of charge carrier are discussed in regard to activation energies calculated.

The financial support of m-era.net project "ZnMgO materials with tunable band gap for solar-blind UV sensors" (ZMOMUVS) is greatly acknowledged.

Anti-bakteriālo, anti-virālo un pretraugu WO₃-x/Cu/WO₃-x pārklājumu izstrāde, izmantojot magnetrona izputināšanas tehnoloģiju.

Mārtiņš Zubkins¹, Viktors Vibornijs¹, Vera Skvortcova¹, Olga Muter², Anna Zajakina³, Ksenija Korotkaja³, Linda Mezule⁴, Halil Arslan¹, Edvards Strods¹, Vitalijs Olševskis¹, Līga Bikše¹, Juris Purāns¹

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

² *Institute of Microbiology & Biotechnology, University of Latvia,*

³ *Latvian Biomedical Research and Study Centre (LBMC)*

⁴ *Riga Technical University*

WO₃-x/Cu/WO₃-x un WO₃-x:Cu plānās kārtiņas tika uzklātas, izmantojot līdzstrāvas (DC) un augstas jaudas impulsu (HiPIMS) magnetronās izputināšanas tehnoloģijas. Kārtiņas tika uzklātas uz PET plēves un nātrija-kalcija stikla pamatnēm ar vidējo redzamās gaismas caurlaidību, attiecīgi 76% un 47%. Izmantojot dažāda tipa un dažādu sugu mikroorganismus, paraugiem tika testētas anti-bakteriālās, anti-virālās un pretraugu īpašības. Testēšanas rezultātā WO₃-x/Cu/WO₃-x kārtiņai tika novērota izteikta anti-mikrobiālā efektivitāte (KVV logaritmiskas pakāpes samazināšanas līdz 4.86 pakāpei *L. plantarum* baktērijas gadījumā). Pret-vīrusu iedarbība tika testēta uz rekombinanta nereplicējoša Semliki meža vīrusa, kurš pieder pie alfavīrusu ģints. Tika novērota būtiskā vīrusa infekciozo vienību skaita samazināšanās (līdz 5.9 RLU) pēc vīrusa daļiņu inkubācijas uz testējamajām virsmām. Tika noskaidrots, ka WO₃-x/Cu/WO₃-x uz dažādām mikroorganismu sugām iedarbojas ar atšķirīgu efektivitāti, kā arī var secināt, ka anti-mikrobiālās iedarbības efektivitāte ir atkarīga no dažādiem izputināšanas parametriem. Dažos gadījumos WO₃-x/Cu/WO₃-x paraugi uz PET pamatnēm uzrādīja pat augstāku anti-mikrobiālo efektivitāti nekā tūra vara kārtiņas. Tas norāda uz vara un volframa oksīda pastiprinātu kombinēto anti-mikrobiālo efektu. WO₃-x:Cu, savukārt, uzrādīja ievērojami zemāku anti-mikrobiālo efektivitāti. Vara un volframa oksīdu veidotie anti-mikrobiālie un caurspīdīgie pārklājumi ir potenciāli izmantojami medicīnas nozarē.

Development of antiviral, antibacterial and yeasticidal WO₃-x/Cu/WO₃-x coatings deposited by magnetron sputtering.

Mārtiņš Zubkins¹, Viktors Vibornijs¹, Vera Skvortsova¹, Olga Muter², Anna Zajakina³, Ksenija Korotkaja³, Linda Mezule⁴, Halil Arslan¹, Edvards Strods¹, Vitalijs Olševskis¹, Līga Bikše¹, Juris Purāns¹

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

² *Institute of Microbiology & Biotechnology, University of Latvia,*

³ *Latvian Biomedical Research and Study Centre (LBMC)*

⁴ *Riga Technical University*

Thin film coatings of WO₃-x/Cu/WO₃-x and WO₃-x:Cu (5, 10, and 20 at.% Cu) were deposited using direct current magnetron sputtering (DCMS) and high power impulse magnetron sputtering (HiPIMS) techniques. The coatings were deposited on soda-lime glass and PET substrates with partial to high (from 47% to 76%) average visible light transmittance. Samples antibacterial, yeasticidal and anti-viral properties were tested. The antibacterial activity tests were performed on various microorganism types and species. Testing results demonstrated the biocidal efficiency of the WO₃-x/Cu/WO₃-x coatings against bacterial growth (up to 4.86 log reduction for *L. plantarum*). The antiviral properties of the coatings were analyzed using recombinant replication deficient alphavirus as a model virus, which were preincubated incubated on the coated surfaces. The significant decrease of the virus infectious units caused by virus preincubation on the deposited coatings was demonstrated (in one case higher than 5.9 RLU). The optimal synthesis parameters for the antimicrobial activity of WO₃-x/Cu/WO₃-x strongly depend on the microorganisms, the deposition technique, and the coater device. In some cases, the WO₃-x/Cu/WO₃-x coatings, especially on PET substrates, even showed higher antimicrobial activity than the pure Cu films, most likely due to the combined effect of Cu and WO₃ on microorganisms causing the mutual reinforcement. However, the WO₃-x:Cu films showed significantly lower antimicrobial activity. The Cu and WO₃ based multilayer coatings have potential to provide antibacterial, yeasticidal and anti-viral protection on surfaces for broad biomedical applications. In addition, the external layer of WO₃ is more suitable than the Cu film due to its relative physicochemical stability and optical properties.

The research was funded by the Ministry of Education and Science, Republic of Latvia, Project "Integration of reliable technologies for protection against Covid-19 in healthcare and high-risk areas", Project No. VPP-COVID-2020/1-0004.

Itrija oksīdu plāno kārtiņu iegūšana un īpašības

Halil Arslan, Mārtiņš Zubkins, Anatolijs Šarakovskis, Juris Purāns
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Retzemju (RE) oksihidrīdi ir jauna materiālu klase, kam piemīt fotohromais efekts, savukārt RE monoksīdiem piemīt unikālas elektroniskās un magnētiskās īpašības.

Šī pētījuma ietvaros mēs esam izstrādājuši metāla mērķa reaktīvo magnetronu izsmidzināšanu Y-O-H, kā arī itrija monoksīda YO_x plānās kārtiņas. Mainot izsmidzināšanas atmosfēru O₂ / Ar, ieguvām plašu YO_x plāno kārtiņu klāstu. Ļoti zemā O₂ koncentrācijā (zem 0,1%) tika iegūtas metāla itrija kārtiņas ar heksagonālu struktūru. Palielinoties O₂ koncentrācijai (0,2%), sākas itrija monoksīda (YO) veidošanās. Savukārt, pie 0,5% veidojas Y₂O₃ plānās kārtiņas. Raksturošanai tika izmantoti XRD, optiskie un elektriskie mērījumi.

Deposition and properties of yttrium oxides thin films

Halil Arslan, Mārtiņš Zubkins, Anatolijs Šarakovskis, Juris Purāns
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Rare-earth (RE) oxy-hydrides is a new class of materials that exhibits photochromic effect while RE monoxides possess unique electronic and magnetic functionalities.

In the scope of the present research, we have developed a reactive magnetron sputtering of metal target for the deposition of Y-O-H as well as novel semiconducting yttrium monoxide YO_x thin films. A wide range of YO_x thin films was obtained by mixing sputtering atmosphere O₂/Ar. At very low O₂ concentration (below 0.1%) metallic yttrium films with a hexagonal structure were deposited. With increasing O₂ concentration (0.2%) the formation of yttrium monoxide (YO) starts. Finally at 0.5% the formation of Y₂O₃ thin films occurs. XRD, optical and electrical measurements were used for characterisation.

Magnetronā uzputināšanā iegūto daudzslāņu volframa oksīda plāno kārtiņas triboloģiskās īpašības

Vera Skvorcova¹, Mārtiņš Zubkins¹, Viktors Vibornijs¹, Jelena Arhipova¹, Juris Purāns¹, Armands Leitāns², Jānis Lungevičs²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Mehānikas un mašīnbūves institūts*

Jaunie WO₃/Cu/WO₃ caurspīdīgie daudzslāņu materiāli, kas iegūti, izmantojot plazmas vakuuma tehnoloģijas, darbojas kā antipatogēns pārklājums, vienā produktā apvienojot vairākas pretmikrobu un antibakteriālas īpašības. Jaunākās novatoriskās testa metodes liecina, ka virsma, kas pārklāta ar pretmikrobu materiālu, novērš galveno patogēno baktēriju augšanu, kas izraisa cilvēku slimības. Šādiem principiāli jaunas kvalitātes pārklājumiem vajadzētu būt antibakteriālai iedarbībai, vienlaikus saglabājot labu bioloģisko savietojamību un paaugstinātu bioaktivitāti, kā arī jānodrošina labu mehānisko un triboloģisko īpašību kopums: augsta cietība, zems elastības modulis, augsta elastība, zems berzes un nodiluma koeficients dažādās fizioloģiskās vidēs.

Šajā darbā WO_{3-x}/Cu/WO_{3-x}, WO_{3-x}:Cu, WO_{3-x} un Cu plānās kārtiņas pārklājumi tika uzklāti, izmantojot līdzstrāvas magnetrona izputināšanas metodoloģiju (DCMS). Pārklājumi tika uzklāti uz sodas-kaļķa stiklu.

Pārklājumu triboloģisko īpašību mērījumi tika veikti ar CSM Instruments (pin-on-disc) tipa tribometru (atbilstoši ASTM G99 standartam). Ir parādīts, ka daudzslāņu volframa oksīda plānajām kārtiņām ir zems berzes koeficients.

Tribological properties of multilayer tungsten oxide thin films deposited by magnetron sputtering

Vera Skvortsova¹, Martins Zubkins¹, Viktors Vibornijs¹, Jelena Arhipova¹, Juris Purans¹, Armands Leitāns², Janis Lungevics²

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

²*Institute of Mechanics and Mechanical Engineering, Riga Technical University*

The new WO₃/Cu/WO₃ transparent multilayer materials obtained using plasma vacuum technologies act as an anti-pathogenic coating, combining several antimicrobial and antibacterial properties in one product. The latest innovative test methods show that the surface covered with antimicrobial material prevents the growth of the main pathogenic bacteria that cause human disease. Such coatings of a fundamentally new quality should have antibacterial activity, while maintaining good biocompatibility and increased bioactivity, and also provide a set of good mechanical and tribological characteristics: high hardness, low elastic modulus, high elastic recovery, low coefficient of friction and wear rate in various physiological environments.

In this work thin film coatings of WO_{3-x}/Cu/WO_{3-x} and WO_{3-x}:Cu, WO_{3-x} and Cu were deposited using direct current magnetron sputtering (DCMS) techniques. The coatings were applied to soda-lime glass.

Tribological properties of the coatings were measured with a CSM Instruments (pin-on-disc) type tribometer (according to ASTM G99 standard). It is shown that the multilayer tungsten oxide thin films have a low coefficient of friction.

Volframa diselenīda plānu kārtiņu augšupēja sintēze un elektrisku kontaktu izgatavošana

Kevon Kadiwala, Edgars Butanovs, Mārtiņš Zubkins, Boris Polyakov
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Vairākos pētījumos daudziem pārejas metālu halkogenīdiem (TMD) ir demonstrētas pusvadītāju materiālu īpašības. TMD elektriskās un optiskās īpašības var tik uzlabotas vēl vairāk, tos samazinot līdz dažiem atomāriem slāņiem. Šī iemesla dēļ, zinātnieki visā pasaulē ir motivēti veidot vēl efektīvākas ierīces, salīdzinot ar tradicionālajām silīcija tehnoloģijām.

Šī darba fokusā ir potenciāls p-tipa TMD – WSe₂. Mēs pētījām divpakāpju WSe₂ sintēzi, selenizējot iepriekš uzklātas WO₃ un metāliska W kārtiņas. Uzklājot W metālu uz oksidētas silīcija pamatnes, var iegūt homogēnas kārtiņas, savukārt no WO₃ sākuma stadijā veidojas kristāliskas salas. Galvenie procesa parametri ir izejmateriālu kārtiņu biezums un selenizācijas temperatūra, kuri tika padziļināti pētīti lielā skaitā eksperimentu un šeit komentēti. Tālāk, lai izgatavotu elektroniskas ierīces no sintezētajām kārtiņām, tika lietotas specifiski izstrādātas fotolitogrāfijas maskas mērogojamai WSe₂ perforēšanai un metāla elektrodu uzklāšanai. Tika testētas šo ierīču fotoelektriskās īpašības. WSe₂ kārtiņas tika pētītas, izmantojot optisko mikroskopu, AFM, SEM, XPS un XRD metodes.

Bottom-up synthesis of tungsten diselenide thin films and electric contact fabrication

Kevon Kadiwala, Edgars Butanovs, Martins Zubkins, Boris Polyakov
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Many transition metal dichalcogenides (TMDs) have shown to exhibit properties of a semiconducting material in several studies. When reduced to few atomic layers, electrical and optical properties of TMDs might be enhanced further. Due to this reason, the possibility of making more efficient devices than the traditional silicon-based gadgets, has raced the researchers around the world to investigate these materials.

The focus of this work is on a possible p-type TMD - WSe₂. We have been investigating two-step synthesis of WSe₂ via selenization of pre-deposited WO₃ and metallic W films. Deposition of metal W on an oxidized Si substrate leads to homogenous films, whereas WO₃ forms crystalline islands at the initial stage. The thickness of deposited films and the selenization temperature are the main parameters, which have been investigated through numerous experiments and discussed here. Further on, to make electronic devices out of as-prepared films, specifically designed and fabricated photolithography masks are used for scalable WSe₂ patterning and metal electrode deposition. These devices are then tested for their photoelectric properties. WSe₂ films were studied using optical microscope, AFM, SEM, XPS and XRD techniques.

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2020/04 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.

Tehniskie risinājumi kā radīt miniatūru bora jonu implantācijas aparātu

Jānis Blahins

Latvijas Universitātes Atomfizikas un Spektroskopijas institūts

ERAF S369-ESS381-ZR-N-109 Projekta ietvaros esam uzņēmušies izstrādāt jaunu, lētu, mazgabarīta, augstas tīrības jonu implantēšanas aparāta koncepta prototipu. Ar šo referātu gribam demonstrēt svarīgākos mezgla punktus šādas idejas realizēšanas iespējamībai. Pirmkārt, bors ir grūti kustošs dielektrisks metāls, kas šo abu minēto iemeslu dēļ ir problemātisks aizdedzināšanai plazmas formā. Tāpēc līdz šim bora jonu avoti lieto bora-fluora gāzveida formas, kas izceļas ar gabarītiem un indīgumu. Mūsu mērķis ir lietot cietvielu boru, kur iespējas ir vairākas, sākot no Dobā Katoda izlādes, ko, kā atrodams pēdējo gadu pētījumu referencēs pasaulē, iespējams aktivēt ar ICP izlādi ienākošās nesējgāzes traktā, kā arī, var izmantot efektu, ka pasildot boru virs 600 C tam lēcienveidā zūd elektriskā pretestība par 6 kārtām. Tādējādi jonu avotu iespējams padarīt tīru un miniatūru. Tālāk iespējams jonu maselekcijas traktā aizvietot sektora magnētu ar RF-QMS masas filtru, kas dod uzlabojumu gan izmēros, gan cenā, gan tīrībā, turklāt QMS diezgan sarežģītajai elektronikai jau vairākus gadus eksistē moderns DDS risinājums. Visbeidzot, tā kā klasiski zināms risinājums ar augstas tīrības metāliska moliybdena vakumtraktu ir neiedomājami dārgs, tad esam atraduši, ka kvarca vakuumtrakts dod konkurējošu tīrības iespēju.

Technical solutions how to create miniature boron ion implantation apparatus

Janis Blahins

Institute of Atomic Physics and Spectroscopy, University of Latvia

Within the framework of the ERDF S369-ESS381-ZR-N-109 Project, we have to develop a new, inexpensive, small-sized, high-purity ion implantation device concept's prototype. With this report we want to demonstrate the most important stoppers are solvable for realizing such an idea. First, boron is a hard-melting dielectric metal that is problematic for plasma ignition for both of these reasons. Therefore, customarily boron ion sources use gaseous forms of boron-fluorine, which are leading to dimensions and toxicity. Our goal is to use solid boron, where there are several possibilities, from the Hollow Cathode discharge, which, as can be found in the worldwide recent research references, is activated by ICP discharge in the incoming carrier gas tract. Or concurrently, boron loses electrical resistance by 6 orders if warmed over 600 Centigrades. Thus, the ion source can be made clean and miniature. Next, it is possible to replace the sector magnet in the ion mass selection tract with an RF-QMS mass filter, which gives an improvement in size, price and purity, moreover, a modern DDS solution is known for some years for crucial simplification of rather complex electronics around of QMS. Finally, because classically known solution with high-purity metallic molybdenum vacuum chamber is incredibly expensive, we have found that quartz vacuum chamber and piping offers competitive purity.

Litija kapilāro poru sistēmu apstarošanas eksperimenti IVG1.M pētniecības reaktorā

Saulets Askerbekovs^{1,2}, Jurijs Ponkratovs³, Jurijs Gordienko³, Irina Tažibajeva³, Kairats Kadiržanovs², Ineša Kenžina¹

¹*Al-Farabi Kazahstānas Nacionālā universitāte,*

²*L.N. Gumiļova Eirāzijas Nacionālā universitāte,*

³*Kazahstānas Republikas Nacionālais kodolcentrs,*

Eksperimentālie rezultāti par ūdeņraža izotopu mijiedarbību ar litija kapilāro-poraino sistēmu (KPS) iegūti apstarošanas laikā reaktorā. Eksperimentiem ar litija KPS paraugiem pētniecības reaktorā IVG.1M (Kurčatova) izgatavota īpaša ampulu ierīce. Eksperimenti veikti ar dinamiskās sorbcijas metodi - pastāvīga deitērija plūsma cauri caurulei ar paraugu ar pastāvīgu degazēšanu un gāzes sastāva reģistrēšanu eksperimentālās ampulas ierīcē. Pirmējie dati ir iegūti par tritija izdalīšanos atkarībā temperatūras no litija KPS reaktora apstarošanā. Sākotnējā datu analīze parāda sekojošas tritija izdalīšanās iezīmes: nenozīmīga tritija izdalīšanās notiek no cieta litijā (paraugu temperatūra ir zemāka par 180 ° C), tritija izdalīšanās samazinās, ja šūnas centra temperatūra ~ 250 °C, tritija izdalīšanās nenotiek, tiek pārtraukta, ja šūnas centra temperatūra ~ 300 °C, seko tritija izdalīšanās palielināšanās, paaugstinoties temperatūrai. Izdarīts secinājums, ka tritija saķeršana ar litiju būtiski ietekmē tritija izdalīšanās procesu no litija CPS reaktora apstarošanas laikā.

Experiments on lithium capillary-porous systems irradiation at the IVG1.M research reactor

Saulet Askerbekov^{1,2}, Yuriy Ponkratov³, Yuriy Gordienko³, Irina Tazhibayeva³, Kairat Kadyrzhhanov², Inesh Kenzhina^{1*}

¹*Al-Farabi Kazakh National University,*

²*L.N. Gumilyov Eurasian National University*

³*National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan,*

The results of the experiments on hydrogen isotopes interaction with lithium capillary-porous systems (CPS) under reactor irradiation are obtained. A special ampoule device with a lithium CPS sample was designed for experiments at the IVG.1M research reactor (Kurchatov). The experiments were carried out by the method of dynamic sorption: a constant flow of deuterium was swept through the tube sample with constant degassing and registration of gas composition in the experimental ampoule device. The initial data on temperature dependencies of tritium release from lithium CPS under reactor irradiation is presented. The preliminary analysis showed some features of tritium release: insignificant tritium release occurred in solid lithium (samples temperature below 180 °C), tritium release decreased under temperature of cell's center of ~250 °C, tritium release stopped under temperature of cell's center ~ 300 °C; then tritium release increased with increase of temperature. The conclusion was made that tritium capture by lithium has a significant influence on the processes of tritium release from lithium CPS under reactor irradiation.

The work is supported by the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan with Grant No. AP08856056.

Ķīmiski kodināmi defektu agregāti ar ^{50}Ti joniem apstarotos LiF kristālos

Jelena Sušinska, Ilze Manika
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Apstarojot LiF kristālus ar dažiem augstas enerģijas vieglajiem joniem (^{12}C , ^3He u.c.), tie sadursmēs ar Li atomiem spēj izraisīt kodolreakcijas. To radītās daļiņas un sekundārais starojums rada radiācijas defektus arī apgabalā ārpus jonu implantācijas zonas [1]. Darbā pētīti radiācijas defekti ar 555 MeV ^{50}Ti joniem apstarotā LiF, izmantojot ķīmiskās kodināšanas metodi un papildinot to ar ASM. Apstaroto paraugu raksturošanai izmantotas optiskās absorbcijas spektroskopijas un mikrociētības metodes. Konstatēta komplekso krāsu centru (F_2 , F_3 un F_4) veidošanās tendence, kas saistāma ar defektu agregatizācijas procesu. Uzlabota ķīmiskās kodināšanas procedūra ļāva apgabalā aiz implantācijas zonas novērot specifisku klāsteru tipa defektu klātbūtni atšķirībā no dislokāciju struktūras, kas raksturīga implantācijas zonai. Minētie defekti nav identificēti, taču domājams, ka to sastāvā ir H centru agregāti un gāzu (F vai He) burbuļi. Paraugi, it īpaši pēc to atkvēlināšanas, uzrāda paaugstinātu ķīmisko aktivitāti defektu tuvumā, kas var liecināt par radiolīzes produktu emisiju.

Chemically etchable defect aggregates in LiF crystals irradiated with swift ^{50}Ti ions

Jelena Sušinska, Ilze Manika
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

By irradiating LiF crystals with some light ions (^{12}C , ^3He , etc.), they can cause nuclear reactions in collisions with Li atoms. Secondary radiation and particles caused by the reactions create radiation defects also in the area beyond the ion range [1].

In this work, radiation defects in LiF irradiated with 555 MeV ^{50}Ti ions were studied using the chemical etching method and supplementing it with AFM. Optical absorption spectroscopy and microhardness methods were used to characterize the irradiated samples. A tendency to form complex color centers (F_2 , F_3 and F_4) has been observed. An improved chemical etching procedure allowed the observation of a specific structure in the area beyond the irradiated zone, consisting of cluster-type defects, which are different from the dislocation structure typical for the implantation zone. These defects have not yet been identified, but the presence of H center aggregates and gaseous bubbles (F, He) is suggested. Samples, especially after annealing, show increased chemical activity near defects, which may indicate the emission of radiolysis products.

[1] I.Manika, R. Zabels, et al., *J. Nucl. Mater.* 507 (2018) 241-247.

25. februāris

Materiāli sensoriem

Optiskie materiāli

Segnetoelektriskie materiāli

Pusvadītāju fizikas problēmu laboratorijas priekšvēsture un sakums

Jānis Jansons

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Pēc Latvijas Zinātņu akadēmijas Fizikas un matemātikas institūta dibināšanas 1946. gada 1. aprīlī un Rīgas Politehniskā institūt atjaunošanas 1958. gadā Latvijas Valsts universitātes (LVU) Fizikas un matemātikas fakultātē palikušajiem fiziķiem samazinājās pedagoģiskais darbs, bet ar eksperimentālo zinātņi pienācīgā līmenī nebija iespējams strādāt, jo trūka modernas aparatūras un līdzekļi tās iegādei. Šajā sakarā doc. E. Krauliņa, doc. O. Šmits, doc. J. Eiduss, asist. I. Vītols mēģināja dibināt Spektroskopijas daudznozaru zinātniski pētniecisku laboratoriju. Bet LVU vadība tam nepiekrīta.

Fiziķiem kļuva zināms, ka Rīgā slepenībā sāka būvēt rūpnīca pusvadītāju ierīču ražošanai. Cietvielu fiziķi O. Šmits un I. Vītols sazinājās ar jaunbūvējamās rūpnīcas vadību un uzzināja, ka arī viņiem būs vajadzīga līdzīga laboratorija, kādu bija iecerējuši LU fiziķi, bet galvenokārt pusvadītāju pētniecībai. O. Šmits un I. Vītols steidzīgi uzsāka Pusvadītāju fizikas problēmu laboratorijas (PFPL) organizēšanas projekta dokumentu izstrādi. Rezultātā LPSR Ministru padomes Augstākās un vidējās speciālās izglītības valsts komiteja 1960. gada 18. maijā izdeva pavēli Nr. 278 par LVU Pusvadītāju fizikas problēmu laboratorijas organizēšanu. Galīgo lēmumu Nr. 78-27 par LVU Pusvadītāju fizikas problēmu laboratorijas radīšanu pieņēma Padomju Savienības Komunistiskās partijas Centrālā komiteja kopā ar PSRS Ministru padomi 1961. gada 24. janvārī.

Referātā tiek izklāstīta visa PFPL radīšanas gaita, ieskaitot priekšvēsturi.

Background and rooting of the Semiconductor Physics Problem Laboratory

Janis Jansons

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Following the founding of the Latvian Academy of Sciences Institute of Physics and Mathematics on 1 April 1946 and the renewal of the Riga Polytechnic Institute in 1958, teaching work was reduced for physicists remaining in the State University of Latvia's (LVU) Physical and Math Faculty, but experimental science was not able to work at an appropriate level due to the lack of modern hardware and hardware. means of purchasing it. Doc. E. Kraulina, doc. O. Schmidt, doc. J. Eiduss, asist. I. Vitols attempted to establish a Spectroscopy multi-sectoral research laboratory. But THE management of THE LVU did not agree with this.

It became known to physicists that a factory for the production of semiconductor devices was started under secrecy in Riga. Solid-state physicists O. Schmidt and I. Vitols contacted the management of the newly built plant and learned that they would also need a similar laboratory as LU physicists intended, but mainly semiconductor research. O. Schmidt and I. Vitos hastily started the development of project documents for the Organisation of the Bioconductor Physics Facilities Laboratory (PFPL). As a result, on 18 May 1960, the State Committee for Higher and Medium Special Education of THE LPSR Council of Ministers issued Order 278 on the organisation of THE LVU Semiconductor Physics Facilities Laboratory. The final decision No 78-27 on the creation of THE LVU Semiconductor Physics Facilities Laboratory was adopted by the Central Committee of the Communist Party of the Soviet Union together with the Council of Ministers of the USSR on 24 January 1961.

The paper outlines the whole process of creating PFPL, including the background.

Hibrīda organisko-neorganisko vielu sistēmas izpēte rentgenstaru detektēšanai

Normunds Strautnieks, Kaspars Pudžs, Andrejs Tokmakovs, Inga Pudža, Aleksejs Kuzmins
¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Rentgenstarojums un ar to saistītās tehnoloģijas ir plaši izmantotas mūsdienu medicīnā, drošības kontrolē kā arī zinātniskās pētniecības sfērā. Tas rada nepieciešamību pēc efektīviem rentgenstaru detektoriem. Šobrīd aktīvi lietotajiem pusvadītāju kristālu rentgenstaru detektoriem ir vairākas negatīvas īpašības – tiem ir ierobežots izmērs, lieli darba spriegumi, vāja rentgenstaru absorbcijas spēja un nepiemīt plastiskums un lokanums. Šīs problēmas varētu risināt veidojot jauna tipa rentgenstarojuma detektorus izmantojot organisko materiālu matricas.

Darba gaitā tika izveidoti un veikti mērījumi ar hibrīdām organisko-neorganisko vielu plāno kārtiņu sistēmām, ar mērķi detektēt uz tām krītošo rentgenstaru starojumu. Šīs hibrīdās sistēmas tika veidotas iejaucot dažādu smago metālu – stroncija un cinka volframātu nanodaļiņas organisko materiālu matricās, kas veidotas no P3HT/PCBM un PEDOT:PSS. Tika veidotas dažādas plāno kārtiņu struktūras un veikta to apstarošana ar rentgenstariem, lai noteikto to rentgenstaru detektēšanas spēju un jūtību. Darba gaitā iegūtas voltampēru raksturlīknes un rentgenstaru radītās strāvas līknes, kā arī aprēķināta iegūto sistēmu jutība. Nanodaļiņu raksturošanai tika izmantota skenējošā elektronu mikroskopija. Iegūtie rezultāti ir salīdzināti ar literatūrā pieejamajiem datiem un tika izdarīti secinājumi par konkrēto sistēmu pielietojšanas efektivitāti.

Investigation of a hybrid organic-inorganic system for X-ray detection

Normunds Strautnieks, Kaspars Pudžs, Andrey Tokmakov, Inga Pudža, Alexei Kuzmin
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

X-rays and their related technologies are widely used in modern medicine, security control, as well as in the field of scientific research. This creates the need for efficient X-ray detectors. Currently used semiconductor crystal X-ray detectors have several negative properties - they have a limited size, high operating voltages, poor X-ray absorption capacity and no plasticity and flexibility. These problems could be solved by developing new types of X-ray detectors using matrices of organic materials.

In the course of this work, measurements were developed and performed with hybrid organic-inorganic thin film systems, with the aim of detecting X-rays induced current. These hybrid systems were developed by mixing various heavy metals - strontium and zinc tungstate nanoparticles in organic material matrices made of P3HT/PCBM and PEDOT: PSS. Various thin film structures were formed and irradiated with X-rays to determine their X-ray detection capability and sensitivity. Current-voltage characteristics and X-ray current curves were obtained during the work, as well as the sensitivity of the obtained systems was calculated. Scanning electron microscopy was used to characterize the nanoparticles. The obtained results are compared with the state of the art data available in the literature and conclusions were made about the efficiency of the application of the specific systems.

Mehanoluminiscentu materiālu izpēte un pielāgošana optoelektrisko sensoru izveidei

Ernests Einbergs, Aleksejs Zolotarjovs, Ivita Bite, Virgīnija Vītola, Donāts Millers
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Mehanoluminescence (ML) ir spontāna gaismas emisija mehāniskas mijiedarbības rezultātā. Kaut gan efekts tika atklāts simtiem gadu atpakaļ, tas vēl neatrada plašu praktisku pielietojumu. Viens no limitējošajiem faktoriem ML plašai pielietošanai ir šaurais izpētīto materiālu klāsts, kuriem piemīt intensīva un pašatjaunojama luminiscence. Pēdējos gados strauji pieaug ar lantanīdiem legētu materiālu pētījumu skaits, kuri gan paaugstina materiālu luminiscences intensitāti, gan paplašina ar ML iegūstamo emisijas viļņa garumu diapazonu.

Darba mērķis ir pārbaudīt izvēlētu ML materiālu īpašības un pielāgot koncentrāciju attiecības sprieguma sensora izveidei. Mērķa sasniegšanai tiek izveidota iekārta un paralēli tiek veikta industriāli ražota ar eiropiju legēta stroncija alumināta un saistvielas saderības izpēte. Epoksīda sveķi ir pietiekoši elastīgi un saderīgi ar stroncija aluminātu, lai varētu tikt izmantoti turpmāk pētījuma, no līdz šim aplūkotajām saistvielām.

Research and adaptation of mehanoluminiscents for the development of optoelectric sensors

Ernests Einbergs, Aleksejs Zolotarjovs, Ivita Bite, Virgīnija Vītola, Donāts Millers
¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

Mechanically excited spontaneous emission of light is called mechanoluminescence (ML). Effect has been known for hundreds of years but has not yet found any practical application. One of the limiting factors for wide practical applicability is the narrow selection of ML materials with respectable intensity and self-renewing luminescence. Recent studies have shown that activation with rare earth ions starkly increases the intensity and colour range achievable of ML which has garnered a growing interest.

The goal of this work is to explore ML properties and to optimized material and binder ration for strain sensing. To achieve our goal, a measurement system is being built and in conjunction compatibility between different binders and industrially produced europium activated strontium aluminate is being explored. None of the up until now selected binders has shown resistance to impact and compatibility with material. Epoxy resin will be used in the remainder of this study. From up until now considered binders epoxy resin has shown reasonable elasticity and compatibility with strontium aluminate and it could be used for the remainder of this study.

The financial support of ISSP UL project SJZ/2020/13 is greatly acknowledged

Arduino kontrolēts četru kanālu LED starotājs vāļišu fotoreceptoru spektrālās jutības salīdzināšanai ar optiskā flikera metodi

Dāvis Zāģers¹, Zane Jansone-Langina², Nicola Rizzieri³, Māris Ozoliņš^{1,2}, Varis Karitāns¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Latvijas Universitātes Fizikas matemātikas un optometrijas fakultāte*

³*Rizzieri Optometristi, Italy*

Portatīvi elektroniskie kontroleri (*Arduino, Raspberry*, u.c.) ar attiecīgām jaudas pastiprinātāju pakāpēm var nodrošināt optisko komponentu, saturošu vairāku krāsu LEDus, izveidi. Mēs esam izveidojuši četru kanālu optisko starotāju, kas veidots uz sarkano, zaļo, ciāna un zilo LEDu bāzes, acs tīklenes fotoreceptoru spektrālās jutības salīdzināšanai. Pārslēdzot laikā divu kanālu starojumus ar frekvenci acs krāsu uztverošo vāļišu fūziju frekvences rajonā, novērotājs novēro mirgošanu, ja spektrālo kanālu starojuma intensitāte nav apgriezti proporcionāla acs spektrālai jutībai, savukārt mirgošana pazūd līdz ar starojumu uztveres līdzsvarošanu. Ierīci vada Arduino Uno kontroleris ar frekvenci 30-120 Hz robežās, kas ir pietiekams acs flikera efekta novērošanai. Jaudas pakāpe uz MOSFETA tranzistoriem stūrē uz 10cm PMMA diska ar biezumu 9mm aploces izvietotām 4x3 gaismas diodēm ar katras LED maksimālo efektīvo strāvu 350mA. Aktīvais izkliedējošais starotāja laukums ir aplis centrā ar diametru 5cm, pārējā diska virsma pārklāta ar pašlīmējošu alumīnija foliju. Kontrolera programmatūra stūrē starojumu intensitātes, reģistrē atbildes reakcijas un grafiski izvada rezultātu attēlošanu, lai noteiktu vāļišu jutību subjektīvās ekvivalences punktu. Ierīci izmantos acs tīklenes vāļišu jutību maiņas noteikšanai senilajiem pacientiem, krāsu redzes deficīta un/vai acs lēcas kataraktas iestāšanās gadījumos.

Arduino controlled four channel LED optical flicker for comparison of eye cone photoreceptor spectral sensitivity

Dāvis Zāģers¹, Zane Jansone-Langina², Nicola Rizzieri³, Maris Ozolinsh^{1,2}, Varis Karitāns¹

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

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

³*Rizzieri Optometristi, Italy*

Portable electronic controllers (*Arduino, Raspberry*, etc.) with appropriate power amplifiers can provide the creation of optical components containing multi-colored LEDs. We have developed a four-channel optical emitter based on red, green, cyan and blue LEDs for spectral comparison of retinal photoreceptor sensitivity. When switching between two-channel emission at a frequency around the retinal fusion frequency of the eye cones, the observer detects flicker if the radiation intensity of the spectral channels is not inversely proportional to the cone spectral sensitivity, while the flicker disappears as the channels' perception is balanced. The device is controlled by an Arduino Uno controller with a frequency in the range of 30-120 Hz, which is sufficient to monitor the retinal flicker effect. The optical intensity of LEDs is steered on a 10cm PMMA disk with a thickness of 9mm surrounded by 4x3 LEDs with a maximum effective current of 350mA for each LED. The active diffusing emitter area is a circle in the disk centre with a diameter of 5 cm, the rest of the disc surface is covered with self-adhesive aluminium foil. The controller software controls the radiation intensities, records the responses, and graphically displays the results to determine the subjective equivalence point of the cone sensitivities. The device will be used to detect changes in the sensitivity of the cones in elderly patients, in cases of color vision deficiency and/or ocular lens cataract cases.

Support of Camart² [Horizont 2020] and VIAA projects [KC-PI-2017/105 and KC-PI-2020/10] is greatly acknowledged.

Saules un rentgena starojuma izraisītās termoluminiscences īpašības AlN keramikā

Jānis Čīpa¹, Laima Trinklere¹, Baiba Bērziņa¹
¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

AlN ir dielektrisks materiāls ar aizliegtās zonas platumu 6.2 eV. Šim materiālam piemīt labas dozimetriskās īpašības, kā plats dozas lineārās atkarības apgabals, augsta jutība attiecībā pret apstarošanu un UV absorbcijas līdzība cilvēka ādai. Lai uzlabotu dozimetriskās īpašības ir nepieciešama izpratne par rekombinācijas procesiem materiālā, ko ir iespējams pilnveidot, apstarojot materiālu ar Saules gaismu vai rentgenstarojumu. Termoluminiscence (TL) ir viena no metodēm, ar kuru var netieši izskaidrot rekombinācijas procesus. AlN TL līknes un emisijas spektri atšķiras pēc apstarošanas ar rentgenstarojumu vai Saules gaismu. Ar Saules gaismu apstarotajam AlN TL līkņu īpašības var izskaidrot ar Saules starojuma spektru, kas jūras līmenī sākas no 290 nm, un ar vienlaicīgu TL signāla radīšanu (ar $\lambda < 450$ nm) un tā izdēšanu (ar $\lambda > 450$ nm). Padziļināta izpratne par defektu rekombinācijas procesiem var labāk palīdzēt atrast risinājumus TL signāla fedingam kas ir galvenais trūkums šim materiālam. Pašlaik AlN varētu izmanto īslaičīgas UV starojuma dozas noteikšanai kā, piemēram, kosmosa tehnoloģijas, vai ūdens attīrīšanā.

Sun and X-ray radiation induced thermoluminescence properties of AlN ceramics

Janis Cipa¹, Laima Trinkler¹, Baiba Berzina¹
¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

AlN is a dielectric material with a band gap of 6.2eV. This material has good dosimetric properties such as a large linear dynamic dose range, high response to irradiation and similarity of UV absorption to human skin. To improve dosimetric properties, it is necessary to understand the recombination processes in the material, which can be improved by irradiating the material with sunlight and X-rays. Thermoluminescence (TL) is one of the methods by which recombination processes can be indirectly explained. The TL glow peaks and emission spectra of AlN differs after irradiation with X-rays or sunlight. Specific properties of the Sun irradiation induced TL characteristics are explained by the Sun emission spectrum at the ground level beginning at 290 nm and simultaneous production of the TL signal (by $\lambda < 450$ nm) and its destruction (by $\lambda > 450$ nm). An in-depth understanding of defect recombination processes can help to better find solutions for TL signal fading, which is a major drawback of this material. Currently, AlN could be used for short-term UV light dosing, such as space technology, or in water treatment.

The present research has been sponsored by the Latvian Council of Science, Grant No. Izp-2018/1-0361. The Institute of Solid State Physics, University of Latvia as the Centre of Excellence has received funding from the European Union's Horizon 2020 Framework Programme H2020-WIDESPREAD-01-2016-2017-TeamingPhase2 under grant agreement No.73950, project CAMART²

Ar hromu leģēts alumīnija oksīds kā termoluminiscences dozimetriskais materiāls

Ernests Einbergs, Aleksejs Zolotarjovs, Ivita Bite, Jānis Čīpa, Virgīnija Vītola, Katrīna Laganovska,
Laima Trinklere

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Daļā medicīnisko izmeklējumos izmanto jonizējošo starojumu. Lai gan pieejamais dozimetru klāsts ir relatīvi plašs, dozimetru linearitātes apgabals un ķīmiskā stabilitāte ir ierobežota. Jonizējoša starojuma plaša adaptācija medicīniskiem izmeklējumiem, preču un medicīnas instrumentu sterilizācijai, sēklu un ķīmisko reaģentu apstarošanai un citur ir veicinājusi pieprasījumu pēc jauniem un uzlabotiem dozimetriskajiem materiāliem.

Šī pētījuma ietvaros tiek apskatīts ar hromu leģēts alumīnija oksīds un tā pielietojamība dozimetrijā augstu dozu noteikšanā. Tika apskatīta ar sol-gel metodi sintezēto poraino mikrokeramiku thermostimulētās luminiscences signāla atkarība no dozas, izmantojot divus dažādus jonizējoša starojuma avotus, kā arī noteikta signāla dzišana laikā. Lai gan materiālam tika novērota ievērojama dzišana laikā (intensitāte saruka par aptuveni 50% 30 dienu laikā), ar hromu leģēts alumīnija oksīds, ar atbilstošu optimizāciju, var tikt izmantots augstas dozas rentgenstaru un beta starojuma dozimetrijai. Ar hromu(III) leģēts alumīnija oksīds ir daudzsološs kandidāts dozimetriskiem pielietojumiem medicīnā un industrijā tā plašā augstu dozu linearitātes apgabala, augstās ķīmiskās stabilitātes, vēlamo mehānisko īpašību un zemo ražošanas izmaksu dēļ.

Chromium doped alumina as a thermoluminescence dosimetry material

Ernests Einbergs, Aleksejs Zolotarjovs, Ivita Bite, Jānis Čīpa, Virgīnija Vītola, Katrīna Laganovska,
Laima Trinkler

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Many medical examinations involve ionizing radiation. Although the range of available dosimeters is rather wide, their linearity and chemical stability is limited. Recently, there has been a growing interest in new, improved dosimetric materials for emerging applications in medicine and other fields like sterilisation of consumer goods and medical instruments, irradiation of seeds, chemical agents and others.

In this study, we explored alumina doped with chromium porous microparticles synthesized with sol-gel method as a possible high dose dosimeter and evaluated its thermostimulated luminescence signal, dose response with two irradiation sources and measured long-time fading. It was found that although the long-term fading is significant (around 50% in the span of 30 days), with sufficient optimisation the material can be used as a high-dose dosimeter for X-Ray and beta irradiation. Wide high dose linearity range, physical and chemical characteristics, as well as low production costs and ease of synthesis make chromium (III) doped alumina a compelling candidate for applicability in various medical and industry fields.

Financial support provided by Scientific Research of “Luminescence Mechanisms and Dosimeter Properties in Prospective Nitrides and Oxides Using TL and OSL Methods” LZZP FLPP Nr. LZZP-2018/1-0361 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged. Authors acknowledge Institute of Solid State Physics, University of Latvia as the Center of Excellence has received funding from the European Union’s Horizon 2020 Framework Programme H2020-WIDESPREAD-01-2016-2017-TeamingPhase2 under grant agreement No. 739508, project CAMART².

Ar mangānu aktivētu kalcijs aluminātu luminiscence optiskiem pielietojumiem

Meldra Ķemere¹, Pāvels Rodionovs¹, Uldis Rogulis¹, Kaspars Vītols¹, Andris Antuzevičs¹, Anatolijs Šarakovskis¹, Māra Šmite²

¹Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

²Light Guide Optics International, Līvāni

Optiskie temperatūras sensori, kuros izmantota fotoluminiscences joslu intensitātes temperatūras atkarība, tiek plaši pētīti, šādi sensori ir pielietojami specifiskos apstākļos [1]. Ir svarīgi izpētīt pārejas metālu īpašības un pielietojamību temperatūras sensoros. Literatūrā minēta intensīva mangāna jonu luminiscence kalcijs aluminātos [2].

Darba gaitā sintezēti ar mangāna joniem (0-2 mol%) aktivēti paraugi ar dažādām kalcijs alumināta kristāliskajām fāzēm, izmantojot cietfāzu sintēzes metodi, karsējot gaisā.

Paraugiem veikti rentgenstaru difrakcijas analīzes un EPR mērījumi. Iegūti fotoluminiscences ierosmes un emisijas spektri istabas temperatūrā, kā arī, izdarīti fotoluminiscences mērījumi, sildot paraugu līdz 300 °C temperatūrai.

Paraugos novērota Mn²⁺ raksturīgā luminiscences josla, kuras pozīcija dažādās kristāliskās fāzēs ir atšķirīga. Dažos gadījumos novērojamas Mn⁴⁺ raksturīgās joslas. Luminiscences temperatūras atkarības mērījumi rāda, ka, pieaugot temperatūrai, izteikti samazinās Mn⁴⁺ luminiscences intensitāte, bet Mn²⁺ intensitāte – mainās maz.

Photoluminescence of manganese doped calcium aluminates for optical applications

Meldra Ķemere¹, Pāvels Rodionovs¹, Uldis Rogulis¹, Kaspars Vītols¹, Andris Antuzevičs¹, Anatolijs Šarakovskis¹, Māra Šmite²

¹Institute of Solid State Physics, University of Latvia

²Light Guide Optics International, Līvāni

Optical temperature sensors exploiting the temperature dependence of intensity of photoluminescence bands are widely investigated, they can be used in harsh environment [1]. It is important to investigate properties and the perspective of transition metal ions in temperature sensors. In the literature, intensive photoluminescence of manganese ions in calcium aluminates is reported [2].

In this work, various calcium aluminate crystalline phases containing 0-2 mol% of manganese ions were synthesized using a solid-state reaction method under air.

The X-ray diffraction and EPR measurements of the samples were conducted. Photoluminescence excitation and emission measurements at room temperature were done as well as measurements while heating the sample up to 300 °C.

The characteristic photoluminescence band of Mn²⁺ ion was observed, and its position varied in different crystalline phases. In some cases, emission bands of Mn⁴⁺ were observed as well. Temperature-dependent photoluminescence experiments showed that with the temperature increase, the intensity of Mn⁴⁺ luminescence strongly decreased, while only slight decrease of Mn²⁺ photoluminescence intensity was observed.

The financial support of ERDF project Nr.1.1.1.1/19/A/020 is greatly acknowledged.

[1] Q. Wang, et. al., *J. Alloys Compd.* (2020): 156744.

[2] J. Park et. al, *Ceramics International* (2013): 39, S623-S626.

Sarkanas ilgstošās pēcspīdēšanas un ķērājcentru īpašības gaisā un reducējošā atmosfērā sintezētā $\text{MgGeO}_3\text{:Mn}^{2+}$ materiālā

Guna Doke, Andris Antuzevičs, Guna Krieķe, Aija Kalniņa, Māris Sprinģis, Anatolijs Šarakovskis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Šobrīd ir plaši pieejama informācija par ilgstošās pēcspīdēšanas materiāliem, kuru emisija ir zilajā un zaļajā spektra diapazonā, savukārt publikāciju skaits par pēcspīdēšanu sarkanajā un tuvā infrasarkanajā diapazonā ir ievērojami mazāks.

Šī darba gaitā, izmantojot cietfāzu sintēzi, gaisā un reducējošā atmosfērā, tika sintezēts $\text{MgGeO}_3\text{:}0,1 \text{ mol\% Mn}^{2+}$ materiāls. Materiālam novērojama plata luminiscences un pēcspīdēšanas josla ar maksimumu ap 680 nm, ko var ierosināt gan ar ultravioleto, gan rentgenstarojumu. Pēc apstarošanas pārtraukšanas pēcspīdēšanu var novērot līdz 15 h.

Luminiscences dzišanas kinētika norāda, ka pēcspīdēšana šajā materiālā ir sarežģīts process, kas ietver dažādu ķērājcentru mijiedarbību. Lai izdarītu secinājumus par ķērājcentru īpašībām, tika izmantotas dažādas termiski stimulētas luminiscences un elektronu paramagnētiskās rezonanses metodes.

Tika secināts, ka paraugos ir vairāki ķērājcentri ar aktivācijas enerģiju no 0.60 līdz 1.55 eV, turklāt sintēze reducējošā atmosfērā veicina papildus dziļo ķērājcentru izveidi.

Red persistent luminescence and trap properties of $\text{MgGeO}_3\text{: Mn}^{2+}$ material synthesized in air and reducing atmosphere

Guna Doke, Andris Antuzevics, Guna Krieke, Aija Kalnina, Maris Sprinģis, Anatolijs Sarakovskis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Currently, there is widely available information on the long persistent luminescence materials with emission in the blue and green spectral range, while the number of publications on the afterglow in the red and near-infrared spectral range is considerably lower.

In the course of this work MgGeO_3 material doped with 0.1 mol% Mn^{2+} was produced using solid-state reaction synthesis in ambient and reducing atmospheres. The material exhibits a broad luminescence and afterglow band with a peak around 680 nm, excited by either X-rays or UV. After cessation of irradiation, the afterglow up to 15 hours can be observed.

Decay kinetics of the samples indicate that persistent luminescence in this material is a complex process that includes several different traps. To draw conclusions about the nature of the traps different thermally stimulated luminescence and electron paramagnetic resonance techniques were employed.

It was concluded that multiple traps with activation energy between 0.60 – 1.55 eV are present in the samples, furthermore the synthesis in reducing atmosphere promotes creation of additional closely overlapping deep traps.

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

Hroma jonu lokālā struktūra LaOCl

Haralds Ozols, Andris Antuzevičs, Guna Kriekē, Andris Fedotovs, Anatolijs Šarakovskis, Aleksejs Kuzmins

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Materiālu pētījumos ar elektronu paramagnētiskās rezonanses (EPR) spektroskopiju kā aktivatorus (zondes) tipiski izmanto Pārejas metālu jonus. Pētot Cr kā aktivatoruhroma iebūvēšanos LaOCl, ir novērota netipiska iebūvēšanās 5+ lādīņstāvoklī, asimetriski deformējot kristālrežģi.

Darba gaitā sintezēti LaOCl:Cr paraugi ar Cr koncentrācijām 0.1-10 mol% diapazonā. Tika arī veidoti paraugi, karsējot reducējošā H₂/Ar atmosfērā.

LaOCl:Cr spektros novērojama superhipersīkstruktūra (SHFS), ko var izskaidrot ar Cr mijiedarbību ar apkārtējiem La kodoliem. To apstiprina elektronu kodolu dubultās rezonanses (ENDOR) mērījumi. Pie augstākām aktivatoru koncentrācijām Cr⁵⁺ EPR signāla intensitāte palielinās. Reducējošā atmosfērā karsēto LaOCl:Cr paraugu EPR spektros novērojamas transformācijas uz Cr³⁺ raksturīgiem signāliem.

Apkopojot magnētisko rezonānšu (EPR, ENDOR), rentgenstaru fotoelektronu (XPS) un rentgenstaru absorbcijas (XANES) spektroskopijas metožu rezultātus, tiks izdarīti secinājumi par hroma iebūvēšanos LaOCl.

Chromium ion local structure in LaOCl

Haralds Ozols, Andris Antuzevics, Guna Kriekē, Andris Fedotovs, Anatolijs Sarakovskis, Alexei Kuzmin

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Transition metal ion activators (probes) are typically used for electron paramagnetic resonance (EPR) studies of materials. EPR spectra of chromium doped LaOCl revealed an unusual incorporation in the 5+ valence state producing asymmetric distortions to the crystal lattice.

In this work LaOCl:Cr samples have been studied with Cr concentrations in 0.1-10 mol% range. Effects of annealing in reducing conditions at different temperatures have been investigated as well.

Superhyperfine structure (SHFS) is resolved in the EPR spectra of LaOCl:Cr, which can be explained with electron-nuclear spin interactions between Cr and the surrounding La nuclei. This is confirmed by electron nuclear double resonance (ENDOR) measurements. At higher activator concentrations EPR signal associated with Cr⁵⁺ increases. Annealing of LaOCl:Cr in reducing H₂/Ar atmosphere results in chromium transformations into Cr³⁺.

Based on the experimental results of magnetic resonance (EPR, ENDOR), X-ray photoelectron (XPS) and X-ray absorption (XANES) spectroscopy methods local structure of chromium LaOCl will be discussed.

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

Ar Cr³⁺ joniem aktivēta MgGeO₃ ilgspīdošā luminiscence

Aija Kalniņa, Guna Doķe
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Luminiscējoši materiāli tiek plaši pielietoti gan zinātniskiem, gan sadzīviskiem mērķiem, piemēram gaismas avotos, bioluminiscentajos marķieros, medicīnas diagnostikas iekārtās, agronomijā, elektronikā u.c. Pēdējos gados aizvien lielāka uzmanība tiek pievērsta sarkaniem un infrasarkanajiem ilgspīdētājiem.

Viens no materiāliem, kas ar attiecīgajiem piejaukumiem var nodrošināt ilgu pēcspīdēšanu sarkanajā un tuvajā infrasarkanajā spektra diapazonā, ir MgGeO₃. Par šī materiāla luminiscences īpašībām atrodams neliels skaits publikāciju, kurās visbiežāk aprakstīts MgGeO₃, kas aktivēts ar Mn²⁺ joniem. Ilgu pēcspīdēšanu infrasarkanajā diapazonā dažādās matricās nodrošina arī Cr³⁺ piejaukumu joni.

Darba gaitā uzsintezēti astoņi dažādi MgGeO₃:Cr³⁺ paraugi ar Cr³⁺ jonu koncentrācijām 0 mol%, 0.1 mol%, 0.25 mol%, 0.5 mol%, 0.75 mol%, 1 mol%, 2 mol% un 5 mol%. Paraugos, kas ierosināti gan ar UV starojumu, gan rentgenstarojumu novērojama intensīva luminiscence ar maksimumu ap 780 nm un detektējama pēcspīdēšana vairāk kā 30 stundu garumā.

Darba gaitā uzņemti ierosmes spektri, luminiscences un pēcspīdēšanas spektri, izmērītas dzišanas kinētikas, veikti termiski stimulētās luminiscences, rentgenstaru difrakcijas u.c. mērījumi.

Persistent luminescence of Cr³⁺doped MgGeO₃

Aija Kalniņa, Guna Doķe
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Luminescent materials are widely used for scientific and domestic purposes such as light sources, bioluminescent markers, medical diagnostic equipment, agronomy, electronics, etc. In recent years, there has been an increasing focus on red and infrared persistent phosphors.

One of the materials that can provide persistent afterglow in the red and near-infrared spectral range with the appropriate impurities is MgGeO₃. There are few publications on the luminescence properties of this material, most often describing MgGeO₃ activated with Mn²⁺ ions. Long afterglow in the infrared range in different matrices is also provided by Cr³⁺ impurity ions.

In the course of this research eight different MgGeO₃:Cr³⁺ samples with Cr³⁺ concentration of 0 mol%, 0.1 mol%, 0.25 mol%, 0.5 mol%, 0.75 mol%, 1 mol%, 2 mol%, 5 mol% were prepared. Samples excited by both UV and X-rays exhibit intense luminescence and afterglow for more than 30 hours with a peak around 780 nm.

During the research the excitation, luminescence and afterglow spectra were taken, the decay kinetics were measured, thermal stimulated luminescence, X-ray diffraction etc. measurements were made.

(0.8Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃ -0.2BaTiO₃)-CaTiO₃ struktūras dielektriskās un elektromehāniskās īpašības

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

Uz Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃ (NBT) bāzes veidoti cietie šķīdumi tiek plaši pētīti saistībā ar nepieciešamību aizvietot apkārtējai videi kaitīgus svīnu saturošus segnetoelektriskus ierīcēs, kurās tiek izmantots pjezoelektriskais efekts.

Darba mērķis ir izpētīt (1-x)(0.8NBT-0.2BaTiO₃)-xCaTiO₃ cietos šķīdumus, meklējot tādu savienojuma koncentrāciju, pie kuras ir augsta ar lauku inducēta deformācija istabas temperatūras rajonā. 0.8NBT-0.2BaTiO₃ kā bāzes sastāva izvēle tiek pamatota ar augstu tetragonalitāti šajā koncentrācijas rajonā cietajā šķīdumā (1-y)NBT-yBaTiO₃. Savukārt CaTiO₃ tiek pievienots, lai samazinātu fāzu pārejas temperatūru, kas ir svarīgs nosacījums, lai iegūtu augstu deformāciju pie istabas temperatūras.

Ar rentgena difrakcijas metodi tika noteikts režģa parametra un tetragonalitātes atkarība no CaTiO₃ koncentrācijas. Tika veikti dielektriskās caurlaidības, polarizācijas un elektromehānisko īpašību pētījumi atkarībā no elektriskā lauka pie dažādām temperatūrām.

Secināts, ka pie (1-x)(0.8NBT-0.2BaTiO₃)-xCaTiO₃ koncentrācijām x = (0.075; 0.100) temperatūras robežās no 23 līdz 85 °C novērojama ar lauku inducēta fāzu pāreja no nepolāra uz segnetoelektrisku stāvokli, par ko liecina dubultā histerēzes cilpa. Šajā stāvoklī novērota augsta ar elektrisko lauku inducētā deformācija (līdz pat 0.25 % pie E = 70 kV/cm), savukārt deformācija ir proporcionāla polarizācijas kvadrātam, kas atbilst elektrostrikcijas mehānismam.

Dielectric and electromechanical properties in (0.8Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃ -0.2BaTiO₃)-CaTiO₃ structure

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

Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃ (NBT) - based compositions are widely studied due to environmental requirements to replace lead-containing ferroelectrics in a large variety of devices, where piezoelectric effect is applied.

The aim of the present work is to study electromechanical properties of (1-x)(0.8NBT-0.2BaTiO₃)-xCaTiO₃ solid solutions, searching compositions with high values of electric field induced strains at the room temperature. The choice of 0.8NBT-0.2BaTiO₃ as a starting composition is motivated by large tetragonality in this concentration range of (1-y)NBT-yBaTiO₃ solid solutions. Whereas, CaTiO₃ is added to reduce the phase transition temperature, which is an important condition to achieve large strains at room temperature.

Using X-Ray Diffraction, the value of lattice parameter and tetragonality was determined depending on the CaTiO₃ concentration. Dielectric permeability, polarisation and electromechanical properties from electric field were measured at different temperatures.

It was found that, in (1-x)(0.8NBT-0.2BaTiO₃)-xCaTiO₃ composition with x = (0.075; 0.100) in the temperature range from 23 to 85°C field induced transition from nonpolar to ferroelectric phase was observed because of the existence of the double hysteresis loop. At this phase transition, strains above 0.25% at E = 70 kV/cm were obtained while the strain is proportional to polarisation squared which is a characteristic mechanism of electrostriction.

Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃ keramikas mikrostruktūra un ķīmiskais sastāvs atkarībā no apdedzināšanas temperatūras.

Marija Dunce, Ēriks Birks, Maija Antonova, Līga Bikše, Sanija Dutkeviča,
Otto Freimanis, Arturs Atvars, Māris Līviņš
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃ (NBT) un tā cietie šķīdumi ir viens no perspektīvākiem kandidātiem mūsdienās plaši pielietoto svīnu saturošu segnetoelektriķu aizvietošanai. Lai gan NBT cietie šķīdumi tiek intensīvi pētīti attiecībā uz to īpašību modificēšanu, ir ļoti maz uzmanības veltīts šo savienojumu raksturošanai no keramikas un tās izgatavošanas viedokļa. Šajā darbā mēs esam veikuši detalizētu pilnīgas mikrostruktūras izpēti NBT keramikai, kas izgatavota ar tradicionālo keramikas sintēzes metodi pie dažādām apdedzināšanas temperatūrām plašā diapazonā no 1020°C līdz 1240°C. Sastāvs un homogenitāte tika aplūkoti, izmantojot XRD, SEM un EDX metodes.

SEM mikrostruktūras attēlu analīze norāda uz monotonu vidējā graudu izmēra palielināšanos un graudu izmēra sadalījuma paplašināšanos, pieaugot apdedzināšanas temperatūrai. Savukārt porainība ir minimāla pie ~1160°C. Ir parādīts, ka pie apdedzināšanas temperatūras virs 1160°C, pamatieguldījuma porainība dod makro-poras. Dažāda rakstura ieslēgumi ir novēroti dažādos apdedzināšanas temperatūru diapazonos. Ir lokāli analizēti dažādu ieslēgumu, kā arī matricas graudu sastāvā esošie ķīmiskie elementi un to koncentrācijas. Novirzes no stehiometriskā sastāva pētītās keramikas matricas graudos netika novērotas.

Microstructure and Chemical Composition of Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃ Ceramics as a Function of Sintering Temperature

Marija Dunce, Eriks Birks, Maija Antonova, Līga Bikše, Sanija Dutkeviča,
Otto Freimanis, Arturs Atvars, Maris Livins
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃ (NBT) and its solid solutions are one of the most perspective candidates for replacement of nowadays widely used lead-containing ferroelectrics. Although NBT-based compositions are intensively studied with respect to modification of their properties, there is very little attention paid to their characterization from the aspect of ceramics and process of its producing. Here, we report on detailed study of complete microstructure of NBT ceramics prepared by conventional ceramics sintering method with various sintering temperatures in a wide range from 1020°C to 1240°C. Content and homogeneity were studied by means of XRD, SEM and EDX techniques.

Analysis of the SEM micrographs indicates smooth increasing of the average grain size and broadening of the grain size distribution, upon increasing of the sintering temperature. Whereas, porosity is minimal at ~1160°C. It is shown that, at sintering temperatures above 1160°C, macro-pores give the main contribution to porosity. Inclusions of different character are detected in different sintering temperature ranges. The constituent elements and their concentrations in different inclusions, as well as in the matrix grains were locally analyzed. Deviations from stoichiometric content of chemical elements in the matrix grains were not found.

This work has been funded by the European Regional Development Fund in the framework of the postdoctoral research project No. 1.1.1.2/VIAA/3/19/558.

Ar Er^{3+} un Yb^{3+} aktivēta $\text{Na}_{0,5}\text{Bi}_{0,5}\text{TiO}_3$ luminiscences intensitātes modulācija elektriskajā laukā

Dace Nilova, Guna Kriekē, Ēriks Birks
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Ar retzemju (RE) elementiem aktivētā $\text{Na}_{0,5}\text{Bi}_{0,5}\text{TiO}_3$ (NBT) ir novērojamas augšup-pārveidotās (AP) luminiscences intensitātes atšķirības nepolārā un ar elektrisko lauku inducētā polārā stāvoklī, kas ļauj veikt luminiscences intensitātes modulāciju ar elektrisko lauku.

Darba gaitā tika pētīti $\text{Na}_{0,5}\text{Bi}_{0,5}\text{TiO}_3$: Er^{3+} , Yb^{3+} paraugi kas aktivēti ar 0.1-1.2 mol% Er^{3+} un 0.0-1.5 mol% Yb^{3+} .

Ierosinot Er^{3+} jonu luminiscenci pētītajos paraugos ar 980 nm starojumu un vienlaikus pieliecot elektrisko lauku, tika izmērīta AP luminiscences intensitātes atkarība no pieliktā lauka stipruma un polarizācijas histerēzes cilpas. Paraugos arī apskatīta otrās optiskās harmonikas ģenerācija, kas ir jūtīga pret kristāliskā režģa simetrijas maiņu. Konstatēts, ka pieliecot mainīgu elektrisko lauku AP luminiscences intensitāte pieaug. Otrās harmonikas intensitātes mērījumi liecina, ka palielinot elektrisko lauku polārās fāzes koncentrācija pieaug. Palielinot paraugu temperatūru, novērojamas izteiktākas luminiscences intensitātes izmaiņas. Tās skaidrojamas ar pilnīgāku pāreju uz nepolāro fāzi noņemot lauku pie augstākām temperatūrām, ko apstiprina polarizācijas histerēzes cilpu mērījumi.

Apkopojot rezultātus, tika izdarīti secinājumi par luminiscences modulācijas lielumu ar elektrisko lauku un parauga temperatūras ietekmi uz modulācijas stiprumu.

Modulation of luminescence intensity with electric field in Er^{3+} doped $\text{Na}_{0,5}\text{Bi}_{0,5}\text{TiO}_3$

Dace Nilova, Guna Kriekē, Ēriks Birks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Deviations in up-conversion (UC) luminescence intensities of non-polar and electric field-induced polar states has been observed in rare earth (RE) doped $\text{Na}_{0,5}\text{Bi}_{0,5}\text{TiO}_3$ (NBT) which allows to modulate luminescence intensity with electric field.

In the course of this work, $\text{Na}_{0,5}\text{Bi}_{0,5}\text{TiO}_3$: Er^{3+} , Yb^{3+} samples doped with 0.1-1.2 mol% Er^{3+} and 0.0-1.5 mol% Yb^{3+} were analyzed.

UC luminescence spectra and polarization hysteresis loops were measured for the samples using 980 nm excitation and simultaneous application of an electric field. In addition, second harmonic generation was analyzed, which is sensitive to the change of crystal lattice symmetry. It was found that when variable electric field was applied to the sample, the UC luminescence intensity increased. Measurements of the second harmonic generation intensity showed that as the electric field increases, the concentration of the polar phase increases. As the temperature of the samples increased, more pronounced changes in luminescence intensity were observed. This effect can be explained by a more thorough transition to the non-polar phase at high temperatures when the electric field was removed, which is confirmed by polarization hysteresis loops. Summarizing the results, conclusions about the magnitude of the luminescence modulation with the electric field and the effect of the sample temperature on the modulation strength were made.

	Exner K.S.....	34
	F	
	Fedotovs A.....	57
	Fomins S.....	17
	Freimanis O.....	60
	G	
	Gabrusenoks J.....	19, 20, 21
	Gopejenko A.....	32
	Gordienko J.....	46
	Grigalevicius S.....	31
	Grīnberga L.....	13
	Grjaznovs D.....	33, 35
	Grūbe J.....	37, 38
	Gvardina I.....	14
	H	
	Hodakovska J.....	12
	I	
	Ivanova A.....	34
	J	
	Jansone-Langina Z.....	52
	Jansons J.....	49
	Jurjāns M.....	59
	K	
	Kaare K.....	23
	Kadiržanovs K.....	46
	Kadiwala K.....	44
	Kajihara K.....	8
	Kalniņa A.....	56, 58
	Kaļinko A.....	18, 22
	Kaparkalējs R.....	25
	Kaprāns K.....	11
	Karaušs M.....	11
	Karitāns V.....	52
	Kenžia I.....	46
	Kleperis J.....	24
	Knoks A.....	13, 24
	Korotkaja K.....	41
	Kotomins J.....	33, 35
	Kozlova A.P.....	36
	Krieķe G.....	32, 37, 56, 57, 61
A		
Aiello G.....		21
Annus P.....		15
Antonova M.....		60
Antuzevičs A.....		55, 56, 57
Arhipova J.....		43
Arslan H.....		41, 42
Askerbekovs S.....		46
Atvars A.....		60
Augustovs P.....		27
B		
Bajārs G.....		10, 11, 12
Bakradze G.....		22
Balasubramani S.....		27
Bērziņa A.....		28
Bērziņa B.....		39, 53
Bērziņš U.....		16
Bikše L.....		41, 60
Birks Ē.....		59, 60, 61
Bite I.....		6, 7, 8, 9, 51, 54
Blahins J.....		45
Bočarovs D.....		34
Bundulis A.....		28, 30
Butanovs E.....		44
Butikova J.....		37
Bžiškjans A.....		16
C		
Chang L.....		40
Chou M.....		40
Cintiņš A.....		18
Česnokovs A.....		34, 35
Čikvaidze G.....		20
Čipa J.....		39, 53, 54
D		
Dobele G.....		23
Doķe G.....		56, 58
Drebot A.....		14
Dunaeva E.E.....		36
Dunce M.....		60
Dutkeviča S.....		60
E		
Einbergs E.....		51, 54

Kristiņš A.	14, 15
Krūze B.	12
Kučinskis G.	10, 11, 12
Kundziņš M.	59
Kuzmins A.	18, 22, 35, 50, 57
Ķemere M.	55

L

Laganovska K.	54
Leimane M.	8, 9
Leitāns A.	43
Lesničenoks P.	13, 24
Lisovskis O.	32
Līviņš M.	60
Lukoševičs I.	20, 24
Lungevičs J.	43

M

Manika I.	47
Markāns M.	30
Melderis J.	14
Mezule L.	41
Miķelsone J.	29
Millers D.	6, 7, 51
Muter O.	41

N

Nedzinskas R.	40
Ņesterova I.	10, 12
Ņilova D.	61

O

Oliņš R.	24
Ollier N.	8
Olševskis V.	41
Ozoliņš M.	52
Ozols A.	27
Ozols H.	57

P

Pankratova V.	36
Pankratovs V.	36
Perveņeckā J.	37
Piskunovs S.	32
Plāvniece A.	23
Podelinska A.	21
Polyakov B.	44
Ponkratovs J.	46
Popov A.	21

Pudža I.	18, 50
Pudžs K.	50
Purāns J.	35, 41, 42, 43

R

Rizzieri N.	52
Rodionovs P.	55
Rogulis U.	55
Ruska R.	32, 39

S

Scherer T.A.	21
Seņko M.	6, 7
Shendrik R.	36
Siliņš A.	8
Sīlis R.	29
Skorodumova N.V.	35
Skuja L.	8, 9
Skvorcova V.	41, 43
Sprīģis M.	37, 56
Sprūģis E.	25
Spustaka A.	6, 7
Strautnieks N.	50
Strods E.	41
Stūre V.	14
Sušinska J.	47
Šarakovskis A.	36, 42, 55, 56, 57
Šmite M.	55
Šmits K.	6, 8
Šternbergs A.	5

T

Tažibajeva I.	46
Teterovskis J.	37, 38
Tipaldi Č.F.	19
Tokmakovs A.	50
Trinklere L.	32, 39, 40, 53, 54
Tropiņš E.	37

V

Vaivars G.	25
Vanags A.	16
Veinbergs J.	14
Vembris A.	29, 31, 37
Vibornijs V.	41, 43
Vīksna T. V.	38
Vīksna V.T.	37
Vītola V.	51, 54
Vītols K.	37, 55

Volperts A.....23

Z

Zajakina A.....41

Zavickis D.....33

Zāģers D..... 17, 52

Zolotarjovs A.....6, 51, 54

Zommere M.A.31

Zubkins M.....41, 42, 43, 44

Zvejnieks G.....33

Žūriņš A.....23