

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



ABSTRACTS
of the 34th Scientific Conference

**February 20– 22, 2018
Riga**

LU Cietvielu fizikas institūta 34. zinātniskā konferences tēzes latviešu un angļu valodā.
Konference veltīta – Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūta 40. gadadienai un
Segnetoelektriķu un pjezoelektriķu fizikas problēmu laboratorijas 50. gadadienai.

Atbildīgais redaktors: Dr. phys. Anatolijs Šarakovskis.

Salikums: Līga Klēbaha.

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

Konferencē ir paredzētas 7 sekcijas:

- Segnetoelektriskie materiāli un materiālu struktūra
- Funkcionālie materiāli: iegūšana, apstrāde, īpašības
- Organiskie materiāli un fotonika
- Optiskās īpašības un defekti materiālos
- Enerģētika
- Stenda referāti
- Teorija un modelēšana

Referātu tēzes sekcijās ir sakārtotas to nolasīšanas secībā.

20. februāris

**SEGNETOELEKTRISKIE
MATERIĀLI UN MATERIĀLU
STRUKTŪRA**

SEGNETOELEKTRIKU UN PJEZOELEKTRIKU FIZIKAS PROBLĒMU LABORATORIJAI – 50: ATTĪSTĪBA UN PĒTĪJUMU VIRZIENI

Andris Šternbergs, Ēriks Birks
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Segnetoelektriku un Pjezoelektriku Fizikas Problēmu Laboratoriju (SPFPL) 1968.gadā nodibināja Profesors Voldemārs Fricbergs. Latvijas Universitātes Cietvielu Fizikas Institūta sastāvā Laboratorija iekļāvās 1978.gadā. Laboratorijā bija izveidots jauns virziens segnetoelektrisko cieto šķīdumu izpētē. Ķīmiskā sastāva variēšana, kas daudzos gadījumos ir praktiski neiespējama audzējot monokristālus darīja keramiskos cietos šķīdumus ērtus dažādu fizikālo parādību, it sevišķi fāžu pāreju dabas izpētē. Izplūdušo fāžu pāreju aprakstam tika attīstīta fenomenoloģiska teorija. Šos agrīnos darbus visai pamatoti var uzskatīt par tagad plaši pazīstamo segnetoelektrisko relaksoru tematikas aizsākumu. Astoņdesmito gadu sākumā izmantojot tam laikam visai izsmalcinātu nanotehnoloģisku pieeju Laboratorijā tika iegūta augstas kvalitātes caurspīdīga segnetokeramika un veikta virkne jaunu keramikas īpašību, t.sk. optisko un elektrooptisko parametru izpēte, kā arī izstrādāta virkne ierīču: gaismas slēdži, modulatori, lāzera stara deflektori uc.. Deviņdesmitajos gados galvenie akcenti tika likti uz segnetoelektrisko plāno kārtiņu un heterostruktūru iegūšanu un to īpašību izpēti, izvēršot plašu starptautisko sadarbību šajā jomā. Savukārt pēdējās dekādēs pētījumu tematika fokusēta uz bezsvina keramikas iegūšanu un materiāla iespējamo pielietojumu elektromehāniskās un elektrokāloriskās ierīcēs.

PROBLEM LABORATORY OF FERROELECTRIC AND PIEZOELECTRIC PHYSICS – 50: DEVELOPMENT AND RESEARCH AREAS

Andris Sternberg, Eriks Birks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Problem Laboratory of Ferroelectric and Piezoelectric physics was founded in 1968 by Professor Voldemārs Fricbergs, and in 1978 Laboratory joined the ISSP UL. The research was focused on systematic studies of ferroelectric solid solutions. Wide modification possibilities of chemical compositions makes ceramic solid solutions convenient for study of various physical phenomena comprising phase transitions. The phenomenological theory for description of diffuse phase transitions was developed. These early studies can be recognized as some kind of outset until now progressing field of relaxors. At the beginning of eighties by use of rather sophisticated nanotechnology high quality transparent ferroelectric ceramic were obtained in Laboratory, and up to this time unusual qualities of ceramics as optical and electrooptical properties, photoconductivity, photorefraction, nonlinear optical properties, thermo-optical phenomena are discovered and design of electrooptical modulators, light switches, laser deflectors etc. managed. In nineties the research activities in progressing international cooperation were changed-over obtaining and study of ferroelectric thin films and heterostructures. During the last decades studies are focused on lead-free ferroelectric ceramics for proposed application in electromechanical and electrocaloric devices.

NESTEHOMETRIJAS IETEKME UZ MIKROSTRUKTŪRU UN FIZIKĀLAJĀM ĪPAŠĪBĀM TĪRĀ UN AR LANTANĪDIEM LEĢĒTĀ NBT

Laura Eglīte^{1,2}, Maija Antonova¹, Kārlis Kudziņš¹, Ēriks Birks¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Tehniskās fizikas institūts*

Modificēti NBT cietie šķīdumi tiek plaši pētīti ar mērķi uzlabot to īpašības, galvenokārt elektromehāniskās. Šīs īpašības iespējams ievērojami mainīt arī veidojot nestehiometriskus sastāvus ar dažādu Bi/Na attiecību. Palielinot Bi/Na attiecību, būtiski samazinās vadītspēja pie augstām temperatūrām, pie tam dominē elektronu vadītspēja. Savukārt samazinoties Bi/Na attiecībai, par dominējošo kļūst skābekļa jonu vadītspēja. Ievērojami mainās arī depolarizācijas temperatūra. Bi/Na attiecības ietekme uz mikrostruktūru vēl nav izpētīta, bet ir aktuāla pētījumu tēma ņemot vērā to, ka sastāvos ar Bi virsstehiometriju var veidoties šķidrā fāze, kas ietekmē gan mikrostruktūru, gan īpašības.

Darbā tiek pētīta nestehiometrijas ietekme uz tīra un ar lantanīdiem leģēta NBT mikrostruktūru un fizikālajām īpašībām. Novērots, ka stehiometriskiem NBT sastāviem pārsvarā piemīt bimodāls graudu izmēru sadalījums, kas izskaidrojams ar anomālo graudu augšanas mehānismu (AGG). Bi virsstehiometrija ievērojami ierobežo lielo graudu veidošanos, ko var izskaidrot ar šķidrās fāzes veidošanos saķepšanas laikā. Lielo graudu koncentrāciju iespējams samazināt arī izmantojot divpakāpju saķepšanas metodi.

EFFECTS OF NONSTOICHIOMETRY ON MICROSTRUCTURE AND PHYSICAL PROPERTIES OF PURE AND LANTHANIDE-DOPED NBT

Laura Eglite^{1,2}, Maija Antonova¹, Karlis Kudzins¹, Eriks Birks¹

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

²*Institute of Technical Physics, Riga Technical University*

NBT based solid solutions are being extensively studied in order to improve their properties, mainly electromechanical. These properties can be significantly altered by creating nonstoichiometric compositions with various Bi/Na ratios, too. Increasing of Bi/Na ratio creates reduction of conductivity at high temperatures, while electron conduction dominates. If Bi/Na ratio decreases oxygen ionic conduction becomes dominating. Depolarization temperature also is shifted remarkably. Influence of Bi/Na ratio on microstructure has not been studied sufficiently, still is actual topic taking into account possible presence of liquid phase in compositions with over-stoichiometric content of Bi and its role on microstructure and properties.

In this work effects of nonstoichiometry on microstructure and physical properties in pure and lanthanide (Er, Yb) modified NBT are studied. It is found that stoichiometric NBT based compositions generally have bimodal grain size distribution which is in conjunction with anomalous grain growth mechanism (AGG). Over-stoichiometric Bi noticeably suppresses AGG because of apparent presence of liquid phase during sintering. Reduction of AGG can also be achieved through two step sintering.

CuMoO₄ UN CuMo_xW_{1-x}O₄ LOKĀLĀS STRUKTŪRAS UN TERMOHROMO ĪPAŠĪBU PĒTĪJUMI, IZMANTOJOT RETNGENABSORBCIJAS SPEKTROSKOPIJU

Inga Jonāne, Arturs Cintiņš, Andris Anspoks, Aleksejs Kuzmins
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Vara molibdāts (CuMoO₄) ir funkcionāls materiāls ar termohromajām un pjezohromajām īpašībām, kas izpaužas plašā temperatūru diapazonā. Normālos apstākļos CuMoO₄ ir α fāzē, kam raksturīga zaļa krāsa. Temperatūras un/vai spiediena ietekmē materiāls pakāpeniski maina savu krāsu no zaļas uz tumši brūnu, gan režģa deformācijas, gan elektronu-fononu mijiedarbības dēļ. Manipulējot ar CuMoO₄ sastāvu (piemēram, aizstājot Mo⁶⁺ jonus ar W⁶⁺ joniem), arī ir iespējams mainīt materiāla optiskās īpašības un iegūt kādu no CuMoO₄ fāzēm, kas ir stabilas pie paaugstināta spiediena.

Šajā darbā tiek izmantota rentgenabsorbcijas spektroskopija (XAS) un apgrieztā Monte-Karlo metode ar evolucionārā algoritma pieeju (RMC/EA), lai pētītu saistību starp CuMoO₄ optiskajām un strukturālajām īpašībām temperatūru diapazonā no 10 līdz 973 K, kā arī tiek pētīta volframa koncentrācijas ietekme uz CuMo_{1-x}W_xO₄ atomāro struktūru un īpašībām.

STUDY OF THE LOCAL STRUCTURE AND THERMOCHROMIC PROPERTIES IN CuMoO₄ AND CuMo_xW_{1-x}O₄ USING X-RAY ABSORPTION SPECTROSCOPY

Inga Jonane, Arturs Cintins, Andris Anspoks, Alexei Kuzmin
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Copper molybdate (CuMoO₄) is a functional material with thermochromic and piezochromic properties in a wide temperature range. At room temperature and atmospheric pressure CuMoO₄ is in α phase with green colour. By the influence of temperature or pressure, the colour changes into dark brown due to the lattice deformation and electron-phonon interaction. By manipulating with CuMoO₄ composition (for instance, by substituting some Mo⁶⁺ ions with W⁶⁺ ions), optical properties of the material can be affected and high pressure modifications of CuMoO₄ can be achieved.

In this study we use X-ray absorption spectroscopy (XAS) and reverse Monte Carlo method with evolutionary algorithm approach (RMC/EA) to investigate the relationship between structural effects and optical properties of CuMoO₄ in the temperature range between 10 and 973 K. The influence of tungsten on the atomic structure and properties of CuMo_{1-x}W_xO₄ solid solutions is also investigated.

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2017/5 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.

DZELZS FĀŽU PĀREJU ANALIZE AR RENTGENABSORBCIJAS SPEKTROSKOPIJU

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

Dzelzs (Fe) ir pamata elements, kurš ir sastopams daudzos savienojumos un tiek lietots dažādiem pielietojumiem kā sakausējumos, tēraudos u.c. Ražošanas procesā, dzelzs pakļaujas fāžu pārejai no α -Fe (BCC) uz γ -Fe (FCC) struktūras [1]. Tamdēļ, ir daudzas publikācijas saistībā ar tīru Fe, bet diemžēl, nav ļoti daudz publikācijas saistībā ar rentgenabsorbciiju spektroskopiju (RAS)

Šajā darba tika veikta *in-situ* rentgenabsorbciijas analīze Fe K-malai, izpētot lokālās struktūras izmaiņas pie dažādas termiskās apstrādes temperatūras (20-1000°C), ieskaitot pāreju no α -Fe (BCC) uz γ -Fe (FCC).

Fe K-malas rentgenabsorbciijas spektru piemalas sīkstruktūru (XANES) datu analīze deva kvalitatīvu informāciju par Fe lokālo struktūru dzelzs matricā, un tās atkarību no apstrādes temperatūras. Izmantojot rentgenabsorbciijas spektra sīkstruktūru (EXAFS) datus, veicām lokālas struktūras analīzi un veicām koordinācijas sfēras rekonstrukciju.

IRON PHASE TRANSITION ANALYSIS USING X-RAY ABSORPTION

Arturs Cintins, Andris Anspoks, Alexei Kuzmin, Juris Purans
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Iron (Fe) is the most common element, present in many compounds of high practical importance like steel and alloys. In many real-life manufacturing processes iron undergoes phase transition from α -Fe (BCC) to γ -Fe (FCC) structure¹ and vice versa. However, there aren't many publications on X-ray absorption spectroscopy for Fe, especially with temperature dependence.

In this study, we performed *in-situ* X-ray absorption spectroscopy for the Fe K-edge as a tool to understand the local structure evolution of the iron matrix during the thermal treatment in a wide range of temperatures (20-1000 °C) including a transition from α -Fe to γ -Fe phase.

Analysis of Fe K-edge X-ray absorption near edge structure (XANES) revealed qualitative information about dependency of local structure in iron (Fe) and extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) spectra allowed us to obtain information of local structure parameters and reconstructed radial distribution function of Fe.

[1] S. Basnski, W. Hume-Rothery, F.R.S. and A.L. Sutton, Proc. The Royal Society A, 459 lpp.

20. februāris

**FUNKCIONĀLIE MATERIĀLI:
IEGŪŠANA, APSTRĀDE,
ĪPAŠĪBAS**

DEFEKTU AGREGĀTU UN DISLOKĀCIJU VEIDOŠANĀS AR ^3He UN ^4He JONIEM APSTAROTOS LiF KRISTĀLOS

Roberts Zabels¹, Ilze Manika¹, Jānis Maniks¹, Kurts Švarcs², Rolands Grants¹,
Tamāra Krasta¹, Aleksejs Kuzmins¹
¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*
²*GSI, Darmštate, Vācija*

Pētīta defektu agregātu un dislokāciju veidošanās, kā arī mehānisko un optisko īpašību izmaiņas ar 13.5 MeV ^3He un 5 MeV ^4He joniem apstarotos LiF kristālos. Defektu evolūcijas raksturošanai jonu trajektorijā izmantotas selektīvās ķīmiskās kodināšanas, fotoluminescences, dislokāciju kustīguma un nanoindentēšanas metodes. Jonu treku pārklāšanās rezultātā, uzkrājoties defektiem, novērota ievērojama dislokāciju kustīguma samazināšanās un cietības palielināšanās. Pie augstām dozām (fluence 10^{15} ions/cm², doza 166 MGy, vidējā absorbētā enerģija 2.3×10^{24} eV/cm³) cietība sasniedz piesātinājumu ~ 3.5 GPa, kas divkārt pārsniedz neapstarotam kristālam raksturīgo, apliecinot apstarošanas ar vieglajiem joniem efektivitāti struktūras un mehānisko īpašību modifikācijā. Jonu izraisītie efekti tika novēroti arī apgabalā, kas ievērojami pārsniedz jonu iespiešanās dziļumu. To rašanās saistāma ar sekundāro starojumu, ko rada He jonu kodolreakcijas ar LiF atomu kodoliem. Veiktie novērtējumi ļauj secināt, ka nozīmīgāko ieguldījumu defektu radīšanā aiz jonu iespiešanās dziļuma dod reakcijās veidotie protoni, kā arī γ -stari un elektroni.

FORMATION OF DEFECT AGGREGATES AND DISLOCATIONS IN LiF CRYSTALS IRRADIATED WITH ^3He AND ^4He IONS

Roberts Zabels¹, Ilze Manika¹, Janis Maniks¹, Kurt Schwartz², Rolands Grants¹,
Tamara Krasta¹, Alexey Kuzmin¹
¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*
²*GSI, Darmstadt, Germany*

Influence of the irradiation with 13.5 MeV ^3He and 5 MeV ^4He ions on the formation of aggregate color centers (F_2), evolution of dislocation structure, and change of mechanical and optical properties of LiF single crystals was studied. The depth profiles of nanoindentation, dislocation mobility, selective chemical etching and photoluminescence served for the characterization of damage. Strong ion-induced increase of hardness and decrease in dislocation mobility at the stage of track overlapping due to accumulation of ion-induced dislocations and other etchable extended defects was observed. At high fluences (10^{15} ions/cm², dose 166 MGy, average absorbed energy 2.3×10^{24} eV/cm³) the hardness saturates at about 3.5 GPa (twofold increase in comparison to a virgin crystal) thus confirming high efficiency of light projectiles in modification of structure and properties. The ion-induced effects were observed also at depths from few tens to hundred micrometers beyond the calculated ion range. Estimates show that the irradiation with secondary products of nuclear reactions of ions with target nuclei including protons and other particles as well as emission of γ -rays, electrons, etc. could be considered as a cause of damage beyond the range.

The financial support of the Latvian national program IMIS2 is greatly acknowledged.

1D UN 2D ReS₂ NANOSTRUKTŪRU FOTODETEKTORI

Edgars Butanovs, Boriss Poļakovs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

1D un 2D materiālu izmantošana elektronikā un optoelektronikā ir aktuāls pētījumu temats ne tikai iespējamās iekārtu miniaturizācijas, bet arī materiālu atšķirīgo īpašību dēļ nanomērogā. Pēdējos gados lielu zinātnieku interesi ir piesaistījuši pārejas metālu halkogenīdu materiāli, it īpaši WS₂ un MoS₂, to neparasto īpašību dēļ, tādējādi paverot iespējas tos izmantot pielietojumos elektronikā un optoelektronikā. Mazāk pētīts, taču potenciāli tikpat nozīmīgs ir ReS₂ [1].

Darba gaitā tika sintezētas ReS₂ nanostruktūras: izmantojot ar magnetronu uzputinātas rēnija oksīda plānas kārtiņas sulfurēšanu, tika iegūtas ZnS-ReS₂ nanovadu *core-shell* heterostruktūras, kā arī tika iegūta ReS₂ mikrokristālu suspensija etanolā ar ķīmisko tvaiku transportu audzētu kristālu ultraskaņas sonikāciju.

Iegūtās nanostruktūras tika raksturotas ar transmisijas elektronu mikroskopu un rentgenstaru difrakciju, kā arī tika noteiktas to fotoelektriskās īpašības pie dažādu viļņu garumu gaismas. Tika izdarīti secinājumi par ReS₂ izmantošanas iespējām fotodetektoros.

1D AND 2D ReS₂-BASED NANOSTRUCTURE PHOTODETECTORS

Edgars Butanovs, Boris Polyakov
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Potential applications of 1D and 2D materials in electronics and optoelectronics is a topical research subject due to the possible miniaturization of currently used devices and due to interesting properties, that materials exhibit in nanoscale. In recent years, transition metal dichalcogenide materials, especially WS₂ and MoS₂, have attracted significant attention due to their unusual properties, therefore offering numerous potential applications in optoelectronics, sensing and microelectronics. Less studied however potentially as important is ReS₂ [1].

In our work we synthesized ReS₂ nanostructures: ZnS-ReS₂ nanowire *core-shell* heterostructures were grown by sulfurizing rhenium oxide thin film obtained via magnetron sputtering, and ReS₂ microcrystal suspension in ethanol using ultrasound sonication of ReS₂ macrocrystals grown via chemical vapour transport.

Obtained nanostructures were characterized with scanning and transmission electron microscopy, X-ray diffraction, as well as photoelectric properties were determined at different illumination wavelengths. Applicability of ReS₂-based photodetectors is discussed.

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2017/1 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged, financial support by National research program IMIS2 is highly appreciated.

References:

[1] M. Rahman, K. Davey, and S.-Z. Qiao. Advent of 2D Rhenium Disulfide (ReS₂): Fundamentals to Applications. *Adv. Funct. Mater.*, vol. 27, no. 10, p. 1606129, 2017.

TERMOELEKTRISKO ĪPAŠĪBU PĒTĪJUMI TETRATIOTETRACĒNU ATVASINĀJUMU PLĀNĀS KĀRTIŅĀS

Jānis Užulis¹, Kaspars Pudžs¹, Mārtiņš Rutkis¹, Simon Woodward²

¹Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

²GSK Carbon Neutral Laboratories for Sustainable Chemistry, University of Nottingham

Radikāliem jonu sāļiem, kas veidoti oksidējot elektroniem bagātus acēnus un tetratiotetracēnus (TTT) ir potenciāli plašs pielietojums, veidojot organiskos metālus un termoelektriskas ierīces, pateicoties to spējai veidot elektriski vadošus viendimensionālus kvazikristālus.

Šajā darbā ir pētītas TTT atvasinājumu plānās kārtiņas, kas ir iegūtas ar termiskās iztvaicēšanas vakuumā metodi. Plāno kārtiņu elektriskā vadītspēja ir robežās no $1.02 \times 10^{-5} \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ di(MeO)TTT līdz $3.74 \times 10^{-4} \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ MeTTT. Attiecīgi plāno kārtiņu Zēbeka koeficients ir robežās no 230-870 $\mu\text{V}\cdot\text{K}^{-1}$. Plāno kārtiņu morfoloģija ir pētīta ar skenējošo elektronu mikroskopiju (SEM). Tā parāda asmeņu, adatveida un izliektu diegveida struktūras.

Plānās kārtiņas dopējot ar jodu ir iegūts p-tipa pusvadītāju īpašības, sasniedzot elektrisko vadītspēju $6.44 \times 10^{-3} \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ un Zēbeka koeficientu 175 $\mu\text{V}\cdot\text{K}^{-1}$.

Pētījums ir finansiāli atbalstīts ERAF projekta Nr. 1.1.1.1/16/A/046 un Valsts Pētījumu Programmas Daudzfunkcionālie Materiāli un kompozīti, fotonika un nanotehnoloģijas (IMIS2) ietvaros.

THERMOELECTRICAL PROPERTIES OF THIN FILMS OF TETRATHIOTETRACENES DERIVATIVES

Janis Uzulis¹, Kaspars Pudzs¹, Martins Rutkis¹, Simon Woodward²

¹Institute of Solid State Physics, University of Latvia

²GSK Carbon Neutral Laboratories for Sustainable Chemistry, University of Nottingham

Radical ion salts from the oxidation of the electron-rich acene tetrathiotetracenes (TTTs) are potentially of wide use in synthetic organic metals and thermoelectric devices due to their ability to form quasicrystalline one dimensional electrical conductors.

In this work we report studies of vacuum deposited thin films of TTT derivatives. It shows final electrical conductivities, σ (in plane) from $1.02 \times 10^{-5} \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ di(MeO)TTT to $3.74 \times 10^{-4} \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ MeTTT. A associated range of Seebeck coefficients from 230-870 $\mu\text{V}\cdot\text{K}^{-1}$ (vs. 855 $\mu\text{V}\cdot\text{K}^{-1}$ for TTT) was also determined. Well defined micro crystallites showing blade, needle or mossy like habits are observed by scanning electron microscopy.

Doping of TTT derivatives with iodine produces optimal p-type behaviour where: electrical conductivity in plane is $6.44 \times 10^{-3} \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ and Seebeck coefficient 175 $\mu\text{V}\cdot\text{K}^{-1}$.

Acknowledgement: This work has been supported by ERAF project Nr. 1.1.1.1/16/A/046 and National Research program “Multifunctionalmaterials and composites, photonics and nanotechnology (IMIS2)”.

STRĀVAS IMPULSI UN PLAZMAS EMISIJAS SPEKTRS Ar UN Ar/O₂ HiPIMS IZLĀDĒ

Mārtiņš Zubkins, Halil Arslan
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Augstas jaudas impulsu magnetronā izputināšana (HiPIMS) ir moderna plāno kārtiņu uzklāšanas tehnoloģija, kurā jauda tiek pievadīta ar īsiem un retiem, bet ļoti intensīviem impulsiem (darbības cikls < 10 %, frekvence < 10 kHz). Rezultātā liela daļa no izputinātajiem atomiem un gāzes atomiem mērķa tuvumā tiek jonizēti. Šī metode sniedz plašākas kārtiņu īpašību kontroles iespējas.

Šajā darbā tiek izmantots Zn/Al (98:2 svara %) mērķis, jo to bieži lieto caurspīdīgo un elektrovadošo Al:ZnO (AZO) kārtiņu izgatavošanā. Elektrisko impulsu un plazmas optiskās emisijas spektru izmaiņa līdz ar procesa parametru (frekvence, impulsa garums, skābekļa plūsma) izmaiņu tika reģistrēta.

Pīķa strāva palielinās, ja tiek samazināta frekvence vai impulsa garums. Samazinot frekvenci, plazmas emisijas spektros strauji palielinās ierosinātu Zn un O atomu līniju intensitāte, bet ierosinātu Ar līniju intensitāte samazinās. Pie zemām frekvencēm ir novērojama arī Zn jonu emisijas līnija ar nelielu intensitāti. Palielinot skābekļa plūsmu, strāvas pīķa forma izmainās un maksimālā vērtība pieaug.

Ar HiPIMS procesa parametriem iespējams būtiski izmainīt plazmas sastāvu un kārtiņas uzklāšanas nosacījumus.

CURRENT PEAK AND PLASMA EMSSION SPECTRUM CHARACTERISTICS OF THE Ar AND Ar/O₂ HiPIMS DISCHARGE

Martins Zubkins, Halil Arslan
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

High-power impulse magnetron sputtering (HiPIMS) is a new advance thin film deposition technology in which the power is supplied by short and rare impulses, but very intense ones (duty cycle < 10 %, frequency < 10 kHz). As a result, large fraction of the sputtered atoms and near-target gas atoms are ionized. This technique provides wider control possibilities of the films properties.

In this study the Zn/Al (98:2 wt.%) target is selected because it is often used to deposit transparent conductive Al:ZnO (AZO) thin films. The changes in the electrical impulses and plasma optical emission spectra were recorded along with the change in process parameters (frequency, pulse time, oxygen flow).

The peak current increases if the frequency or pulse time is reduced. When the frequency decreases the intensity of the excited Zn and O atom emission lines increases, but the intensity of excited Ar atom lines reduces. At low frequency there is also Zn ion emission line with a low intensity. The form of the current peak changes and the peak current increases if the oxygen flow is increased.

With the HiPIMS process parameters, it is possible to significantly change the plasma composition and the film deposition conditions.

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2017/4 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged

20. februāris

**ORGANISKIE MATERIĀLI UN
FOTONIKA**

SKALĀRU HOLOGRĀFISKO REŽĢU VEKTORIERAKSTS MOLEKULĀRO STIKLU KĀRTIŅĀS

Andris Ozols, Pēteris Augustovs, Dmitrijs Saharovs, Elmārs Zariņš, Valdis Kokars
Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte

Kā zināms, polarizācijas jeb vektorhologrammas ir hologrammas, kas spēj atjaunot ne tikai signāla gaismas viļņa amplitūdu un fāzi, bet arī tā polarizāciju. Šajā darbā esam eksperimentāli pētījuši hologrāfisko režģu vektorierakstu ar ortogonālām cirkulārām polarizācijām azobenzola molekulāro stiklu kārtiņās ar dažādi ievietotām trifenilgrupām ZGD-1, ZGD-ZGD-1Q, ZGD-1T, ZGD-2, ZGD-2Q un konstatējuši, ka pie lielām ekspozīcijām vektorrežģi šajās kārtiņās darbojās kā skalāri režģi. Ieraksts tika veikts ar 532 nm gaismu, bet nolase-ar 632.8 nm staru. Paraugos ZGD-1 tika sasniegta maksimālā difrakcijas efektivitāte 57%. Pie mazām ekspozīcijām difragēto staru novērotās polarizācijas īpatnības atbilda fotoinducētās dubultlaušanas vektorrežģim, bet vēlāk -skalāram režģim. Maksimālā virsmas reljefa modulācija 1100 nm tika sasniegta ZGD-1Q kārtiņā. Šie mērījumi un aprēķini, kā arī salīdzinājums ar eksperimentālajām DE vērtībām ļāva secināt, ka pie lielām ekspozīcijām kārtiņās ZGD-1Q, ZGD-2 un ZGD-2Q dominē virsmas reljefa režģi, bet kārtiņās ZGD-1, ZGD-1T- tilpuma fāzes režģi ar skalāru difrakciju.

VECTOR RECORDING OF SCALAR HOLOGRAPHIC GRATINGS MOLECULAR GLASSY FILMS

Andris Ozols, Peteris Augustovs, Dmitrijs Saharovs, Elmars Zarins, Valdis Kokars
Faculty of Materials Science and Applied Chemistry,, Riga Technical University

Polarization holograms are holograms which reconstruct not only the amplitude and phase of the signal wave but also its polarization. In this paper, we have experimentally studied holographic grating vector recording by orthogonal circular polarizations in azobenzene molecular glassy films ZGD-1, ZGD-ZGD-1Q, ZGD-1T, ZGD-2, ZGD-2Q with differently incorporated bulky triphenyl groups and have concluded that at large exposures vector gratings in these films exhibit scalar grating diffraction properties. Recording was performed at 532 nm while readout at 632.8 nm. The highest diffraction efficiency (DE) of 57% was achieved in ZGD-1 samples. The polarization peculiarities of the diffracted beams corresponded to photoinduced birefringence vector grating at small exposures whereas they corresponded to scalar gratings at large enough exposures. The maximal surface relief modulation of 1100 nm was found in ZGD-1Q film. These measurements and calculations as well as comparison with experimental DE values led to the conclusion that surface relief gratings dominate at large exposures in ZGD-1Q, ZGD-2 and ZGD-2Q films whereas volume phase gratings enabling scalar diffraction are dominant in ZGD-1 and ZGD-1T films.

The financial support of Latvian-Ukrainian project LV-UA/2016/3 is greatly acknowledged.

TIEŠĀ OPTISKĀ IERAKSTA FOTOREZISTU IZSTRĀDE

Jānis Teteris

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Darbā apskatīts pašreizējais stāvoklis „*tiešā*“ optiskā ieraksta organisko un neorganisko fotorezistu izstrādē un izmantošanā materiālu virsmas strukturēšanas tehnoloģijās. Pētījumos tika izmantoti amorfo halkogenīdu (As-S, As-S-Se un Ge-S,Se sistēmas) un azobenzolu saturoši organiskie savienojumi.

Hologrāfiskā ieraksta atkarība no ieraksta lāzera viļņu garuma un staru polarizācijas konfigurācijas tiek analizēta. Pētīta ieraksta materiālu īpašību ietekme uz virsmas reljefa veidošanas efektivitāti.

Hologrāfiskais ieraksts, kā arī laboratorijā izstrādātā vienstara režģu ieraksta metode dod iespēju iegūt režģus ar periodu no 100 nm līdz 50 μm. Izmantojot immersijas hologrāfisko litogrāfiju ir iespējams iegūt difrakcijas režģus ar periodu ~150 - 250 nm.

DEVELOPMENT OF PHOTORESISTS FOR *DIRECT* OPTICAL RECORDING

Janis Teteris

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

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

Holographic recording conditions, which include recording wavelength and polarization state configuration of light beams, are analyzed. The influence of properties of recording material on surface relief formation efficiency is considered.

Holographic recording as well as the one beam method for the grating recording worked out at laboratory allows a recording of gratings with a period from 100 nm up to 50 μm. By means of immersion holographic lithography the surface relief gratings with a period of ~100 – 250 nm can be fabricated.

VIRSMAS RELJEFA HOLOGRAMMU DIFRAKCIJAS PARAMETRU UZLABOŠANAS METODES

Māra Reinfeldē, Jelena Miķelsone, Jānis Teteris
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Zināms, ka parādība, ko sauc par „hologrāfisko pašpastiprināšanos” ir spēkā hologrammām, kuru ieraksta pamatā ir gaismas intensitātes modulācija. Dotā darba pamatā ir līdzīga veida parādības pētījumi attiecībā uz virsmas reljefa hologrammām (VRHG), ko ierosina gaismas elektriskā lauka modulācija. Jāatzīmē, ka VRHG ir izteikti gaismas polarizācijas jūtīgas, t.i., ieraksts, nolasīšana, kā arī pastiprināšana ir atkarīga no gaismas staru polarizācijas nosacījumiem.

Šajā darbā kā bāzes materiāls izmantotas $\approx 3\mu\text{m}$ biezas azo-epoksīda plēvītes. Eksperimenta pirmais solis bija izvēlēties atbilstošus polarizācijas nosacījumus procesā iesaistītajam starojumam ($\lambda=532\text{ nm}$). Tika ierakstīti HG virsmas režģi ar nelielām difrakcijas efektivitātēm (DE). Tad viens no ieraksta stariem tika aizklāts un turpināts starot ar otru ierakstā izmantoto staru. Tika mērīta difragēto staru kinētika refleksijas režīmā ieraksta viļņa garumam, kā arī transmisijas režīmā maz absorbētam zondējošam staram ($\lambda=645\text{ nm}$). Mērījumu rezultāti parādīja, ka HG pastiprinājums pie fiksētām ierosmes intensitātēm ir atkarīgs no sākuma DE. Tai pat laikā, pie fiksētām sākuma DE, process ir atkarīgs no pastiprinošā stara intensitātes. Bez tam, noskaidrots, ka VRHG režģa parametrus ir iespējams ievērojami uzlabot, ja sākuma ieraksta procesā tiek izmantots papildus starojums ($\lambda=491\text{ nm}$).

IMPROVEMENT METHODS OF DIFFRACTION PARAMETERS FOR SURFACE RELIEF HOLOGRAMS

Mara Reinfeldē, Jelena Mikelsone, Janis Teteris
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

It is known, that the phenomenon called “holographic self-enhancement” for the holograms recorded under intensity modulated light illumination, takes place. The object of presented work are studies for the similar behavior on the surface relief holograms (SRHG) induced by the light electric field modulation. It should be noted that SRHG are strongly polarization sensitive, i.e., the recording, reading and enhancing depends on light beam polarization conditions.

In this work as base material $\approx 3\mu\text{m}$ thick azo-epoxy films were used. The first step of the experiment was to elect the adequate polarization relationship for the light beams ($\lambda=532\text{ nm}$) involved in the process. Next one was testing the behavior of surface holographic grating recorded with two beams up to tiny diffraction efficiency (DE) afterwards illuminated with one beam but the second one was closed. The kinetics of diffracted light was measured – reflected for recording wave length and transmitted for probing beam with small absorption ($\lambda=645\text{ nm}$). The measurements showed that the values of HG enhancement for excitation at fixed intensities depend on beginning (DE). At the same time, it was found, that the process was dependent on the excitation beam intensities as well. Furthermore, the parameter of recorded grating is possible to improve, if during recording, the assisting light ($\lambda=491\text{ nm}$) illumination takes place.

FOTOJUTĪGA REZISTA IZSTRĀDE HOLOGRĀFISKAM IERAKSTAM AR 532 nm LĀZERI

Jelena Mīkelsone, Jānis Teteris
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Darbā tiek veidots fotojutīgs rezists hologrāfiskajam ierakstam uz azo-epoksīda bāzes. Rezista veidošanai tiek izmantotas azo-krāsvielas, kuru absorbcijas josla ietilpst plaši izmantota un pieejamā lāzera ar viļņa garums 532 nm.

Tiek izstrādāta paraugu veidošanas metode, kura ļauj izveidot liela laukuma rezistus, kuru jutība būtu pietiekama, lai tajos varētu ierakstīt liela izmēra difrakcijas režģi.

Lai iegūtu nepieciešamu jutību un parauga optisku kvalitāti, tiek izmantotas azokrāsvielas 4-aminoazobenzene (AAB) un Disperse Orange 3 (DO3), epoksīdi - bisphenol A diglycidyl ether (BADGE) un Poly[(phenil glycidyl ether)-co-formaldehyde].

Darbā tiek pētīts kā fotorezista jutību ietekmē azo-krāsvielu koncentrācija paraugā, fizikālas virsmas reljefa pastiprināšanas metodes. Tiek apskatīti fotoinducētie procesi azo-epoksīdu savienojumos un to ietekme uz virsmas reljefa veidošanās procesu.

DEVELOPMENT OF PHOTSENSITIVE HOLOGRAPHIC RESIST BY 532 nm LASER

Jelena Mikelsone, Janis Teteris
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

In this work photosensitive resist on azo-epoxy base for holographic recording is developing. For resist development azo-dyes with absorption band saturating 532 nm wavelength are used. The wavelength of 532 nm has chosen because of wide availability of lasers with this wavelength.

In this work we describe sample preparation method allowing to obtain photoresists with large area, possessing high sensibility, in order to record large area diffraction gratings.

For sample preparation azo-dyes 4-aminoazobenzene (AAB) and Disperse Orange 3 (DO3) and epoxy - bisphenol A diglycidyl ether (BADGE) and Poly[(phenil glycidyl ether)-co-formaldehyde] were used.

We studied azo-dye mixture concentration impact on photo resist sensitivity, photoinduced processes and their impact on surface relief grating formation process, observed physical surface relief self-enhancement methods.

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2017/7 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.

METODES IZSTRĀDE INTRAOKULĀRO LĒCU IMPLANTU IETEKMES UZ KRĀSU REDZES JUTĪBU UN DISKRIMINĀCIJU NOVĒRTĒŠANAI

Māris Ozoliņš^{1,2}, Zane Jansone²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Latvijas Univ Fizikas un matemātikas fakultātes Optometrijas un redzes zinātnes nodaļa*

Acs lēca, kurā attīstījusies katarakta, mūsdienās tiek aizvietota ar plastikātu - PMMA, silikonu, akrilātu, kolamēru implantiem (IOL). Kataraktas izsuktās gaismas izkliedes rezultātā acs krāsu jutība tiek ievērojami izmainīta, īpaši zili-dzeltenās ass virzienā. Sakarā ar to, ka cilvēks ilgstoši atradies apstākļos, kad redzamā spektra īso viļņu garumu gaisma acī tiek intensīvi izkliedēta, acs spektrālās jutības un krāsu diskriminācijas izmaiņas ir būtiskas un, pat iespējams neatgriezeniskas. Mēs, izmantojot krāsu redzes deficīta standarta *Farnsworth D-15* testa piesātināto un nepiesātināto etalonu komplektu, piemērojām to, lai noteiktu implantējamo IOL lēcu iespaidu uz krāsu redzes jutības uzlabojumu un, lai detektētu gadījumus, kad uzlabojuma vērtība vairs nespēj jutību atgriezt uz ne-kataraktas acs jutības līmeni. Lai izmaiņas varētu skaitliski novērtēt, pamatā mēs izmantojām *Farnsworth D-15* etalonu izkārtojuma Bowmana krāsu diferencu summēšanas metodi, kā arī vidējojot krāsu diferencu vektorus saskaņā ar Vingri un King-Smita algoritmu.¹ Pēdējais ļauj ērti novērtēt IOL materiāla kombinācijā ar acs tālāko segmentu īpašībām pielietošanas sekmes normālas krāsu redzes atjaunošanā. Autori pateicas acs kataraktas pacientu atsaucībai eksperimentu laikā.

DEVELOPMENT OF TECHNIQUE TO ESTIMATE IOL IMPACT ON EYE COLOR SENSITIVITY AND DISCRIMINATION REMOVING CATARACT

Māris Ozolinsh^{1,2}, Zane Jansone²

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

²*Dept. of Optometry and vision science Fak. of Physics and Mathematics, University of Latvia*

Nowadays intra ocular lens (IOL) implants are manufactured from different colorless or tinted plastic materials: PMMA, silicone, hydrophobic acrylate, hydrophilic acrylate and collamers. To test patients with IOL implants color vision sensitivity we developed technique based on saturated and unsaturated Farnsworth D15 Color vision arrangement test. It is easy perceptible (that is essential to elder patients), and color sensitivity changes in tritan, protan, deutan confusion line directions can be detected. Results were analysed in three ways: by summing the color differences between adjacent caps according to Bowman, by averaging color difference vectors according to Vingry¹ and King-Smith, and using linear regression line which is created from incorrect error D-15 cap arrangements. It can find good eye clarity results after cataract surgery, however the color sensitivity and discrimination can be also irreversibly diminished yet for generally positive surgery cases. In our research participated patients' 26 eyes with cataract. We thank all these patients for their understanding. Authors supported by IMIS2.

References.

Vingrys, A.J. Quantitative Scoring Methods for D15 Panel Tests in the Diagnosis of Congenital Color Vision Deficiencies. *Optometry and Vision Science*, 68(1), 41-48 (1991).

FOTOLUMINISCENCES UN PASTIPRINĀTĀS SPONTĀNĀS EMISIJAS PĒTĪJUMI 4H-PIRĀNA ATVASINĀJUMA (MWK-1) AMORFAJĀS PLĀNAJĀS KĀRTIŅĀS

Jūlija Pervenecka¹, Aivars Vembris¹, Elmārs Zariņš², Valdis Kokars²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Lietišķās ķīmijas institūts*

Organiskie cietvielu lāzēri ir lāzēri, kuru aktīvās vides radīšanai tiek izmantotas dažāda, amorfas struktūras kārtiņas veidojošas, organiskās krāsvielu molekulas. Mūsdienās, līdz ar tehnoloģijas strauju attīstību, tā kļūst arvien perspektīvāka. Salīdzinājumā ar neorganiskiem lāzēriem, tie būtu daudz lētāki un vieglāk integrējami fotoniskās ierīcēs [1]. Taču ne visi savienojumi ir derīgi lāzēri aktīvās vides radīšanai, šim nolūkam var tikt izmantotas tikai tādas vielas, kuru plānajās kārtiņās ir ierosināma pastiprinātā spontānā emisija (ASE).

Darba gaitā tika pētīta fotoluminiscence un pastiprinātā spontānā emisija, amorfas struktūras kārtiņas no šķīduma veidojošās, 4H-pirāna atvasinājuma MWK-1 plānajās kārtiņās.

MWK-1 plānās kārtiņas ar spin-coating metodi tika uzklātas uz stikla pamatnes no hloroforma šķīduma. Fotoluminiscence un pastiprinātā spontānā emisija tika ierosinātas pie MWK-1 maksimālās absorbcijas viļņa garuma (491 nm). ASE ierosināšanai tika izmantots Ekspla 310 sērijas impulsa lāzēris. Apstarojamā laukuma forma uz parauga virsmas bija svītra ar izmēriem 3x0,4 mm². Gaismas emisija tika savākta parauga malā un mērīta ar spektrometru OceanOptics HR4000. Referātā tiks pastāstīts par MWK-1 fotoluminiscences un ASE eksperimentos apkopotajiem rezultātiem un savienojuma turpmākām izmantošanas perspektīvām.

INVESTIGATION OF PHOTOLUMINESCENCE AND AMPLIFIED SPONTANEOUS EMISSION PROPERTIES OF 4H-PYRAN DERIVATE (MWK-1) AMORPHOUS THIN FILMS

Julija Pervenecka¹, Aivars Vembris¹, Elmārs Zariņš², Valdis Kokars²

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

²*Institute of Applied Chemistry, Riga Technical University*

Organic solid-state lasers are one of in nowadays perspective and intensively developing technology in which as laser dyes are used non crystalline structure films forming organic molecules. In comparison with inorganic lasers, they would be more easily integrated into photonic devices and much cheaper [1]. However, not all organic compounds could be used as laser active medium. For preparation of a laser active medium can be used only materials, in thin films of which, it is possible to excite amplified spontaneous emission (ASE).

In this work were investigated photoluminescence and amplified spontaneous emission properties of one original 4H-pyran derivative MWK-1 that form amorphous thin films from solution.

Thin films of investigated compound on glass substrate were made from chloroform solution by spin-coating method. Photoluminescence and Amplified spontaneous emission of MWK-1 were excited at to the compound absorption maximum wavelength: 491 nm. For the excitation of ASE, a pulse laser of the Ekspla 310 series was used. The irradiation area on surface of the sample was stripe form with dimension 3x0.4 mm². Light emission was collected at the edge of the sample and measured by spectrometer OceanOptics HR4000.

Photoluminescence and ASE properties of MWK-1 pure thin films will be discussed.

This work was supported by European Regional Development Fund within the Project No. Nr.1.1.1.1/16/A/046 and A.Riekstina SIA "Mikrotīkls" donation, administered by University of Latvia Foundation.

[1] Sebastien Forget, Sebastien Chenais, "Organic Solid-State Lasers", Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2013, Volume 175, p. 179.

20. februāris

**OPTISKĀS ĪPAŠĪBAS UN
DEFEKTI MATERIĀLOS**

III ELEMENTU GRUPAS NITRĪDU NANODAĻĪNAS - LUMINISCENTI MARĶIERI BIOĻĪSKOS MATERIĀLOS

Baiba Bērziņa, Laima Trinklere, Valdis Korsaks
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Nanobiofizika ir jauns virziens dabas zinātnēs, kur sasniegumi nanozinātnēs tiek pielietoti bioloģisku materiālu izpētē. Tas ļauj pētīt bioloģiskus procesus molekulārā līmenī, kas savukārt ir aktuāli pielietojumiem medicīnā un nanobiotehnoloģijās.

LU CFI Platzonu materiālu laboratorijā jau daudzu gadu garumā tiek pētītas luminiscences īpašības III elementu grupas nitrīdiem tādiem kā AlN un hBN nanopulveri, lietojot spektrālās raksturošanas metodes.

Pētījuma mērķis ir noteikt piemērotākās luminiscējošās nanodaļiņas, kas varēt kalpot par marķieriem bioloģiskos materiālos - šūnu membrānās un to sastāvdaļās.

Tiek izvērtēti un salīdzināti luminiscences un tās ierosināšanas spektri parastiem un dopētiem AlN nanopulveriem un hBN pulveriem ar dažādiem graudu izmēriem.

Veiktie pētījumi ļauj secināt, ka vispiemērotākie bioloģisku materiālu marķēšanai varētu būt dopētie AlN nanopulveri tādi kā AlN:Tb, AlN:Mn uc.

LUMINESCENT NANO PARTICLES OF III ELEMENT GROUP NITRIDES - MARKERS IN BIOLOGICAL MATERIALS

Baiba Berzina, Laima Trinkler, Valdis Korsaks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Development of nanobiophysics is a new field in natural sciences in which the knowledge in nanosciences is applied to biological materials. It allows investigation of biological processes at the molecular level being topical for medical and nanobiotechnology applications.

Luminescence properties of nanopowders of III group element nitrides such as AlN, hBN and others have been studied in laboratory of Wide Band Gap Materials at ISSP LU for many years using spectral characterization methods.

Task of the present investigation is estimation of luminescent nano-particles for use as markers in biological materials – cell membranes and their components.

Luminescence and its excitation spectra are analysed and compared for doped and conventional nanopowders of AlN and hBN with different grain sizes.

In conclusion it can be considerate that the doped AlN nanopowders such as AlN:Tb, AlN:Mn , etc. are the best candidates for luminescent markers in biological materials.

This investigation is a part of the International Project Horizon -2020–MSCA–RISE-2015; Proposal Nr. 690853; acronym – assymcurv;

LiGaO₂ LUMINISCENCES POLARIZĀCIJAS ĪPAŠĪBAS

Laima Trinklere, Anatolij Truhins, Baiba Bērziņa, Valdis Korsaks
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Litija metagalāts LiGaO₂ (LGO) ir platzonu ($E_g \approx 6$ eV) oksīds, kuru varētu izmantot dažādiem praktiskiem pielietojumiem optoelektronikā un pusvadītāju epitaksijā. Kristāla luminiscences spektrā ir vairākas joslas pie 280, 330, 520 un 700 nm. Šis darbs ir veltīts LGO īso viļņu joslas izpētei, izmantojot fotoluminiscences un polarizētās luminiscences metodes pie zemām temperatūrām. 280 nm luminiscenci var interpretēt ar donoru-akceptoru pāru tuneļa rekombināciju, kur defektu savstarpējo attālumu nosaka gadījuma sadalījums. Šīs luminiscences ierosināšanas spektrs atrodas fundamentālās absorbcijas rajonā ($\lambda < 210$ nm) un tiek izskaidrots ar eksitonu un starpzonu pāreju kombināciju. Polarizētās luminiscences mērījumi liecina, ka gan 280 nm luminiscences josla, gan tās ierosināšanas spektrs satur vairākas apakšjoslas ar dažādu luminiscences polarizāciju. Luminiscences un ierosināšanas apakšjoslām ar savstarpēji ortogonālu polarizāciju ir atšķirīga intensitātes atkarība no temperatūras un atšķirīgs spektrālais izvietojums. Polarizētās luminiscences pētījumi dod papildus informāciju par luminiscence mehānismiem LiGaO₂ kristālā.

POLARIZATION PROPERTIES OF LiGaO₂ LUMINESCENCE

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

Lithium metagallate LiGaO₂ (LGO) is a wide band gap ($E_g \approx 6$ eV) oxide compound potentially attractive for various practical applications, including use as a substrate for semiconductor heteroepitaxy and optoelectronics. The luminescence spectrum contains the 280, 330, 520 and 700 nm bands. Here we present a detailed study of the most short wave luminescence done by methods of photoluminescence and polarised luminescence at low temperatures. Luminescence at 280 nm is assigned to tunnel recombination of donor-acceptor pairs with random distribution of separation distance. Excitation spectrum of the 280 nm emission band located entirely in the spectral range of fundamental absorption ($\lambda < 210$ nm) corresponds to superposition of exciton and band-to-band transitions of LiGaO₂ crystal. Measurements of polarised luminescence demonstrate that both 280 nm luminescence emission and excitation bands consist of several subbands with different luminescence polarisation. The emission and excitation subbands with mutually orthogonal polarisation are characterised with different thermal evolution of intensity and spectral position of maximum. Studies of the polarised luminescence provide additional information about luminescence processes in LiGaO₂ crystal.

S-STĀVOKĻA JONU STRUKTŪRA UN ĪPAŠĪBAS SrF₂ NANODAĻIŅĀS

Andris Antuzevičs, Meldra Ķemere, Guna Kriekē
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Ar retzemju elementiem aktivēti nanostrukturēti fluorīdi ir perspektīvi materiāli optiskos pielietojumos. Jonu iebūvēšanās ir daudzpusīgi raksturota SrF₂ monokristālos un polikristālos, taču par piejaukuma centru lokālo struktūru un īpašībām nanokristāliskā SrF₂ literatūrā informācijas ir mazāk.

Darba gaitā, izmantojot nogulsņēšanas metodi, tika iegūtas ar mangānu, gadolīniju un eiropiju aktivētas SrF₂ nanodaļiņas, kuras pēc tam tika karsētas dažādos apstākļos. Pētījumi ar elektronu paramagnētiskās rezonanses (EPR) un optiskās spektroskopijas metodēm liecina, ka aktivatoru lokālo struktūru būtiski ietekmē karsēšanas temperatūra, kā arī izvēlētais gāzu sastāvs.

Kubisku Mn²⁺ centru veidošanās tika novērota inertā atmosfērā karsētiem SrF₂ paraugiem pēc superhipersīkstruktūras parādīšanās EPR spektros. Trīsvērtīgie gadolīnija joni zemās temperatūrās karsētajos paraugos arī pamatā veido kubisku apkārtni, taču, pieaugot termiskās apstrādes temperatūrai un kristalītu izmēram, sāk dominēt zemākas simetrijas Gd³⁺ centru EPR signāli. Atšķirīgās kristāliskā lauka apkārtnes gadolīnija un eiropija jonu aktivatoriem konstatētas arī fotoluminiscences spektros.

STRUCTURE AND PROPERTIES OF S-STATE IONS IN SrF₂ NANOPARTICLES

Andris Antuzevics, Meldra Kemere, Guna Kriekē
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Rare earth doped nanostructured fluorides are perspective materials for optical applications. Incorporation of ions has been thoroughly characterized in SrF₂ single crystals and polycrystals, however, nanocrystalline SrF₂ has not been investigated as much.

In this work SrF₂ nanoparticles doped with manganese, gadolinium and europium ions were synthesized using the precipitation method and annealed afterwards under different conditions. Studies with electron paramagnetic resonance (EPR) and optical spectroscopy methods revealed that activator local structure is dependent on temperature as well as the gas composition during the heat treatment procedure.

Formation of cubic Mn²⁺ centres was observed in SrF₂ samples annealed in inert atmosphere from the superhyperfine structure of EPR spectra. After relatively low heating temperatures trivalent gadolinium ions also incorporate in SrF₂ nanoparticles retaining the cubic environment, however, after increased annealing temperatures lower symmetry Gd³⁺ centre EPR signals start to dominate. The differences in crystalline field symmetry have also been observed in the photoluminescence spectra of gadolinium and europium.

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2017/2 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.

KRISTALIZĀCIJA UN ERBIJA JONU LUMINISCENCE $Ba_4Lu_3F_{17}$ SATUROŠĀ STIKLA KERAMIKĀ

Guna Kriekē, Anatolijs Šarakovskis, Māris Sprinģis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Bārija retzemju fluorīdu nanokristālus saturošas stikla keramikas ir perspektīvi luminofori pielietojumiem, kam nepieciešami caurspīdīgi materiāli.

Šajā pētījumā iegūtas caurspīdīgas ar Er^{3+} joniem aktivētas stikla keramikas, kas satur $Ba_4Lu_3F_{17}$ nanokristālus. Stiklos iegūtas divas kristāliskās fāzes – kubisks un romboedriski deformēts kubisks $Ba_4Lu_3F_{17}$. Izmantojot Er^{3+} jonus kā zondes struktūras analīzei, pētīta fāžu pāreja starp šīm divām modifikācijām. Romboedrisku $Ba_4Lu_3F_{17}$ saturošās stikla keramikās novērota efektīva augšpārveidotā luminiscence, kas ir vismaz par divām kārtām lielāka nekā amorfos oksifluorīdu stiklos. Salīdzinot spektroskopiskās īpašības ar polikristālisku Er^{3+} aktivētu $Ba_4Lu_3F_{17}$, stikla keramikās novērtēta Er^{3+} jonu koncentrācija nanokristālos, un tā ir lielāka nekā līdzīgās stikla keramikās.

Pētījumā noskaidrots, ka $Ba_4Lu_3F_{17}$ nanokristālus saturošas stikla keramikas ir piemērotas matricas Er^{3+} joniem un tām ir raksturīga efektīva augšpārveidotā luminiscence, ko nodrošina fluorīdu kristāliem raksturīga zema fononu enerģija un liela Er^{3+} koncentrācija kristāliskajā fāzē.

CRYSTALLIZATION AND ERBIUM LUMINESCENCE IN $Ba_4Lu_3F_{17}$ CONTAINING GLASS CERAMICS

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

Oxyfluoride glass ceramics containing barium rare earth fluoride nanocrystals are excellent luminophores for applications, in which transparency is required.

In this research transparent Er^{3+} doped glass ceramics containing $Ba_4Lu_3F_{17}$ nanocrystals were successfully prepared. Two crystalline phases were formed in the investigated glasses – cubic and rhombohedrally distorted cubic $Ba_4Lu_3F_{17}$. Phase transition between the two modifications was studied using Er^{3+} as a structural probe. Efficient upconversion luminescence was detected in these materials and it was at least two orders of magnitude higher than that in the precursor glass. The activator content in the crystalline phase was estimated using polycrystalline Er^{3+} doped $Ba_4Lu_3F_{17}$ as the reference and it was found to be higher compared to similar glass ceramics.

Glass ceramics containing $Ba_4Lu_3F_{17}$ nanocrystals were proven to be suitable hosts for Er^{3+} ions combining low phonon energy characteristic to fluoride crystals and allowing for high content of Er^{3+} ions in the crystalline phase resulting in the intense upconversion luminescence.

The financial support of National Research Program IMIS² and Arnis Riekstins "MikroTik" donation is greatly acknowledged. Donations are administered by the University of Latvia Foundation.

RENTGENA STAROJUMA IEROSINĀTAS LUMINISCENCES PĒTĪJUMI SrAl₂O₄:Eu,Dy MATERIĀLĀ

Virgīnija Vītola, Donāts Millers, Krišjānis Šmits, Aleksejs Zolotarjovs, Ivita Bite
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

SrAl₂O₄:Eu,Dy un citi ar eiropiju aktivēti elementi alumināti ir ļoti efektīvi luminofori ar plašām pielietojšanas iespējām – energoefektīvs apgaismojums, pulksteņu ciparnīcas, luminescentas krāsas, utt. Šajā pētījumā mēs apskatījām ar rentgena starojumu ierosinātu luminescenci neaktivētā SrAl₂O₄, SrAl₂O₄:Dy un SrAl₂O₄:Eu,Dy materiālā, tai skaitā pēcspīdēšanas mērījumus zemās temperatūrās. Gan pēcspīdēšanā, gan termostimulētās luminescences (TSL) mērījumos tika novērotas gan Eu, gan Dy raksturīgās luminescences joslas. Pēcspīdēšanas kinētiku izpēte atklāj to, ka zināmu ieguldījumu luminescences procesos un ierosināta luminescences centra radīšanā dod elektronu tunelēšana no kāda ķērājcentra uz Eu³⁺. Temperatūru diapazonā 10-70K nav novēroti TSL maksimumi, kas ir spēcīgs pamatojums apgalvojumam, ka 10K temperatūrā lādiņi netiek termiski atbrīvoti no ķērājcentriem. Nesenos pētījumos ir tikusi apskatīta elektronu tunelēšana no ķērājcentriem uz Eu un šajā pētījumā mēs nonācam pie secinājuma, ka rentgenstarojuma ierosmes laikā Eu²⁺ un Dy³⁺ kalpo par caurumu ķērājcentriem; elektronu tunelēšana notiek gan SrAl₂O₄: Eu, Dy, gan SrAl₂O₄: Dy, un luminescence 10 K temperatūrā rodas no ierosinātu Eu²⁺ un Dy³⁺ centru pārejas pamatstāvoklī, kas radušies, elektronam tunelējot no lādiņu ķērājcentra uz Eu³⁺ un Dy⁴⁺ joniem. Apskatīta arī neaktivēta SrAl₂O₄ luminescence, lai atklātu pašvielas defektu lomu.

X-RAY EXCITED LUMINESCENCE OF SrAl₂O₄:Eu, Dy AT LOW TEMPERATURES

Virgīnija Vītola, Donāts Millers, Krišjānis Šmits, Aleksejs Zolotarjovs, Ivita Bite
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

SrAl₂O₄:Eu,Dy, as well as other aluminates doped with europium, are very efficient phosphors with wide range of possible applications – emergency signage, watch dials, luminous paints, in vivo imaging, etc. We carried out the study of X-ray excited luminescence of undoped SrAl₂O₄ as well as SrAl₂O₄:Dy and SrAl₂O₄:Eu,Dy samples, including the measurements of afterglow at low temperatures within extended time scale. We observed at low temperature both Eu and Dy luminescence peaks in the afterglow and TSL spectra. The study of afterglow kinetics reveals that electron tunneling from some trap to Eu³⁺ is involved in the creation of the excited state of Eu²⁺. No thermally stimulated luminescence glow peaks were observed in the TSL within 10-70K and this is the strong evidence for the claim that at 10K electrons are not thermally released from the trap centers. In recent articles the tunneling of electron from trap levels to excited Eu luminescence center was discussed, and in this research we conclude that under X-ray irradiation Eu²⁺ and Dy³⁺ serve as hole traps; electron tunneling is present in both SrAl₂O₄:Eu,Dy and SrAl₂O₄:Dy, and luminescence afterglow at 10 K arises from decay of excited Eu²⁺ and Dy³⁺ centers created via electron tunneling from host trap to Eu³⁺ and Dy⁴⁺ ions. The luminescence of undoped SrAl₂O₄ is observed and the role of intrinsic defects is discussed.

ENERĢIJAS PĀRNESES PĒTĪJUMI AR RETZEMJU JONIEM KO-AKTIVĒTOS CaF_2 UN SrF_2 NANOKRISTALĪTUS SATUROŠOS STIKLOS UN STIKLA KERAMIKĀS

Meldra Kemere, Uldis Rogulis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Oksifluorīdu stikla keramiku struktūra un optiskās īpašības tiek plaši pētītas, ar mērķi pielietot dažādos sensoros un optiskās ierīcēs. Ar Dy^{3+} joniem aktivēti materiāli tiek plaši pielietoti optiskās ierīcēs, tai skaitā baltās gaismas luminoforos. Eu^{3+} jonu pievienošana spēj uzlabot materiāla izstarotās gaismas krāsu parametrus.

Sintezēti oksifluorīdu stikli ar sastāvu $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-Na}_2\text{O-SrF}_2$, kuri aktivēti ar Dy^{3+} un Eu^{3+} joniem (0.5-2 mol%). Karsējot stikla paraugus 650, 700 un 750 °C temperatūrās 1-4 stundas, iegūtas stikla keramikas, kuras satur SrF_2 nanokristalītus. Veikti fotoluminiscences, luminiscences ierosmes un dzišanas kinētiku mērījumi. Rezultāti salīdzināti ar iepriekš novēroto $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-CaO-CaF}_2$ sastāva paraugu sērijā.

SrF_2 kristalītus saturošajās stikla keramikās novērota Dy^{3+} jonu luminiscences dzišanas laiku palielināšanās, salīdzinot ar stikliem, tas liecina par retzemju jonu iebūvēšanos SrF_2 kristalītos. Salīdzinot ar CaF_2 kristalītus saturošiem paraugiem, SrF_2 saturošajos paraugos dzišanas laiki ir garāki, taču novērotā enerģijas pārnese efektivitāte ir nedaudz zemāka. Analizēti enerģijas pārnese procesus ietekmējoši faktori abās paraugu sērijās.

ENERGY TRANSFER STUDIES IN RARE EARTH CO-DOPED GLASSES AND GLASS-CERAMICS CONTAINING CaF_2 AND SrF_2 NANOCRYSTALLITES

Meldra Kemere, Uldis Rogulis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The structure and optical properties of oxyfluoride glass-ceramics have been widely investigated for uses in sensors and optical devices. Dy^{3+} doped materials are widely used in optical devices, including white light luminophores. Adding of Eu^{3+} ions can improve the emission colour properties of the material.

In the present study, oxyfluoride glasses with the composition $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-Na}_2\text{O-SrF}_2$, activated with Dy^{3+} and Eu^{3+} ions (0-2 mol%) have been synthesized. Glass-ceramic samples containing SrF_2 nanocrystallites were obtained by heating the precursor glasses at 650, 700 and 750 °C temperatures (1 to 4 hours). Luminescence emission, excitation and decay measurements have been made. The obtained results were compared with the previous series of composition $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-CaO-CaF}_2$.

In the SrF_2 containing glass-ceramics the luminescence lifetimes have increased compared to the precursor glasses. It indicates that rare earth ions have been incorporated in SrF_2 nanocrystallites. Compared to CaF_2 containing samples, the SrF_2 series show longer luminescence lifetimes, but the energy transfer efficiency is lower. The energy transfer efficiency and its impact factors in both series were analyzed.

This work was carried out thanks to SIA "Mikrotik" donation. Donations are administered by the University of Latvia Foundation.

21. februāris

ENERĢĒTIKA

KAS SLĒPJAS ZEM MATERIĀLIEM ENERĢIJAS IEGŪŠANAI UN UZKRĀŠANAI?

Jānis Kleperis, Līga Grīnberga, Gunārs Bajārs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Šis ir laiks, kad atjaunojamie energoresursi un alternatīvās enerģijas sistēmas tiek ieviestas daudzās pasaules valstīs, lai samazinātu fosilo energoresursu lietošanu un vides piesārņošanu. Tas ir ceļš ne tikai uz tīrāku vidi, bet arī mieru pasaulē. Intensīvi tiek meklēti lēti un plaši pieejami materiāli enerģijas iegūšanai un uzkrāšanai no Saules, Vēja, Ūdens un citiem atjaunojamiem resursiem.

Gandrīz katru no materiāliem, kurš tiek pētīts LU CFI, kaut kādā mērā var pieskaitīt materiāliem, kurš pielietojams enerģētikā gaismas, siltuma, elektriskā un magnētiskā lauku, vibrāciju, apkārtējās vides atmosfēras un citu ietekmju uztveršanai un reģistrācijai, saglabāšanai un atgriešanai.

Apvienotajā ūdeņraža enerģētikas un cietvielu jonikas materiālu laboratorijā tiek sintezēti un pētīti ne tikai inovatīvi materiāli litija, nātrija, magnija jonu baterijām, bet arī materiāli, kas izmantojami ūdeņraža un ogļskābās gāzes saistīšanai; ūdeņraža iegūšanai, CO₂ reformēšanai. Novārtā nav atstāti arī reciklējami materiāli, tādi kā grafiņa tīģeļi un krāsaino metālu industrijas, izlietotās auto riepas, no kuriem iespējams iegūt mikronu un nano izmēru struktūras dažādiem tautsaimniecībā noderīgiem pielietojumiem.

WHAT LIES BENEATH THE MATERIALS FOR ENERGY HARVESTING AND STORAGE

Jānis Kleperis, Līga Grīnberga, Gunārs Bajārs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

This is the time when renewable energy sources and alternative energy systems are being introduced in many countries around the world to reduce the use of fossil energy and environmental pollution. This is a path not only for a cleaner environment, but also for peace in the world. Intensive search for cheap and widely available materials for energy from solar, wind, water and other renewable resources.

Almost every material that is being studied in the University of Latvia's CFI can to some extent be attributed to materials used to capture and register, maintain and return the light, heat, electric and magnetic fields, vibrations, ambient atmospheres and other influences in energy.

The combined hydrogen and solid-state ionic materials laboratory synthesizes and explores not only innovative materials for lithium, sodium, magnesium ion batteries, but also materials that can be used to link hydrogen and carbon dioxide; hydrogen, CO₂ reforming. Also, recyclable materials such as graphite crucibles and non-ferrous metal industries, used car tires, which can be obtained from micron and nano-sized structures for various useful applications in the national economy, have also been neglected.

The financial support of CO₂EXIDE, LATENERGI, IMIS2 is greatly acknowledged.

GRAFĒNU INTERKALĀCIJA AR CU DEFEKTU ZONĀS UN UZ PLĀKSNĒM CO₂ REĢENERĀCIJAI

Jānis Kleperis, Pēteris Lesničenoks
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Grafēna plākšņu aglomerātu (GSS) elektrodu materiāla sintēze izmantojot elektroķīmiskās eksfoliācijas metodi dod iespēju ātri un lēti sintezēt lielus tilpumus pulvera. Tā pēcstrādē iegūstams ultraskaņas vannā sadalīts, reducēts (Ar/H₂) – no sulfātiem attīrīts pulveris. Šī brīža tehnoloģija neļauj pilnīgi novērst elektroda karšanu un skābes tvaiku nonākšanu uz elektriskā kontakta ar grafitā darba elektrodu. Tāpēc izstrādāta sintēzes tehnoloģija un piedāvāts modulēta signāla sintēzes paņēmieni un analizētas atšķirības sintezētajā materiālā. SEM pētījumi, kā arī potenciālais elektrodu dizains apspriests CO₂ reģenerēšanai ķīmijas tehnoloģijās pielietojamā izejvielā.

GRAPHENE INTERKALATION WITH CU ON DEFECTS AND ON PLATE SURFACE FOR CO₂ REGENERATION

Janis Kleperis, Peteris Lesnicenoks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Graphene Sheet Stack (GSS) electrode material synthesis by electrochemical exfoliation is a method which to acquire large volume of material quick and cheap. After sonication and reduction in Argon – hydrogen gas mix clean and sulfur less material. Technology at this moment does not allow to avoid heating of the work electrode, as well as exposure of the electrical contact to the graphite electrode to the acid fumes. Because of this, we consider new synthesis method – modulation of the synthesis signal and we compare the materials. Published SEM research and potential electrode design for regeneration of CO₂ in a chemically usable gas.

Authors Greatly acknowledge NRP IMIS² and COEXIDE for financial support.

MODIFICĒTO DIVFĀZU KERAMIKAS TRITIJU ĢENERĒJOŠO MINILODĪŠU RADIĀCIJAS STABILITĀTE

Artūrs Zariņš^{1,2}, Jānis Čipa¹, Larisa Baumanē³, Laima Trinklere⁴, Arnis Supe¹, Gunta Ķizāne¹

¹*Ķīmiskās fizikas institūts, Latvijas Universitāte*

²*Dabas zinātņu un matemātikas fakultāte, Daugavpils universitāte*

³*Latvijas Organiskās sintēzes institūts*

⁴*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Modificētās litija ortosilikāta/metatitānāta ($\text{Li}_4\text{SiO}_4/\text{Li}_2\text{TiO}_3$) minilodītes ir piesaistījušas starptautisku uzmanību kā alternatīvs kandidāts tritija ģenerēšanai nākotnes kodoltermiskās sintēzes reaktoros. Šajā pētījumā apskatīti radiācijas izraisītie procesi Li_4SiO_4 minilodītēs ar dažādu Li_2TiO_3 daudzumu, kas apstarotas ar 5 MeV paātrinātiem elektroniem ($D < 5000$ MGy, $T = 300\text{--}1285$ K, argona atmosfēra), lai novērtētu un salīdzinātu Li_4SiO_4 minilodīšu radiācijas stabilitāti. Li_4SiO_4 minilodītes pirms un pēc apstarošanas analizēja ar elektronu paramagnētiskās rezonances, termostimulētās luminiscences, difūzās izkliedes, pulvera rentgendifrakcijas, Furjē transformāciju infrasarkanās un skenējošās elektronu mikroskopijas metodi. Iegūtie rezultāti parāda, ka modificētām Li_4SiO_4 minilodītēm ar Li_2TiO_3 piedevām ir augsta radiācijas stabilitāte salīdzinājumā ar references Li_4SiO_4 minilodītēm (bez Li_2TiO_3 piedevām), kopējā paramagnētisko radiācijas defektu un radiolīzes produktu radiācijas ķīmiskais iznākums (G) ir zem 0,8 defekti/produkti uz 100 eV un radiolīzes pakāpe (α) ir mazāka par 1 mola% pēc apstarošanas ar 5000 MGy absorbēto dozu.

RADIATION STABILITY OF MODIFIED TWO-PHASE CERAMIC TRITIUM BREEDER PEBBLES

Artūrs Zariņš^{1,2}, Jānis Čipa¹, Larisa Baumanē³, Laima Trinklere⁴, Arnis Supe¹, Gunta Ķizāne¹

¹*Institute of Chemical Physics, University of Latvia*

²*Faculty of Natural Science and Mathematics, Daugavpils University*

³*Latvian Institute of Organic Synthesis*

⁴*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

Modified lithium orthosilicate/metatitanate ($\text{Li}_4\text{SiO}_4/\text{Li}_2\text{TiO}_3$) pebbles have attracted international attention as an alternative candidate for the tritium breeding in the future nuclear fusion reactors. In this research, the radiation-induced processes in the Li_4SiO_4 pebbles with various contents of Li_2TiO_3 were analysed, which were irradiated with 5 MeV accelerated electrons ($D < 5000$ MGy, $T = 300\text{--}1285$ K, dry argon atmosphere), in order to estimate and compare the radiation stability of the Li_4SiO_4 pebbles. The Li_4SiO_4 pebbles were analysed by electron spin resonance, thermally stimulated luminescence, diffuse reflectance, powder X-ray diffraction, Fourier transform infrared and scanning electron microscopy technique. The obtained results revealed that the modified Li_4SiO_4 pebbles with additions of Li_2TiO_3 have a high radiation stability in comparison to the reference Li_4SiO_4 pebbles (without additions of Li_2TiO_3), the total radiation chemical yield (G) of paramagnetic radiation-induced defects and radiolysis products is below 0.8 defects/products per 100 eV and the radiolysis degree (α) is under 1 mol% after irradiation up to 5000 MGy absorbed dose.

The authors greatly acknowledge the technical and experimental support of O. Leys, M. H.H. Kolb and R. Knitter (Karlsruhe Institute of Technology, Institute for Applied materials, Germany). The work is performed in the frames of the University of Latvia financed project No. Y9- B044-ZF-N-300, "Nano, Quantum Technologies, and Innovative Materials for Economics".

POLIĒTERĒTERKETONA-IMIDAZOLIJA DIMETILFOSFĀTA JONU ŠĶIDRUMU KOMPOZĪTMEMBRĀNU PROTONU VADĪTSPĒJA PAAUGSTINĀTĀ TEMPERATŪRĀ

Einārs Sprūģis¹, Guntars Vaivars^{1,2}

¹*Latvijas Universitātes Ķīmijas fakultāte*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Jonu šķidrums (JŠ) ir savienojumi, kuriem raksturīga liela molekulārās uzbūves un līdz ar to arī fizikālo un ķīmisko īpašību daudzveidība. Pētījumi rāda, ka JŠ molekulārajai struktūrai ir ievērojama ietekme arī uz šo savienojumu protonu vadītspēju. Uz imidazolija dimetilfosfātu balstītie JŠ visai neseni jaunpienācēji JŠ saimē. Tiem raksturīga augsta termiskā stabilitāte, labas bionoārdīšanās spējas, arī samērā lētas un vienkāršas sintēzes metodes. Šajā darbā tika pētīta trīs dažādu imidazolija dimetilfosfātu JŠ saturošu poliēterēterketona kompozītmembrānu protonu vadītspēja temperatūrās virs 100 °C. Šādu kompozītmembrānu potenciālais pielietojums ir protonu apmaiņas membrānu degšūnās, kurās šobrīd plašāk izmantoto membrānu darba temperatūra nevar pārsniegt 80 °C, jo par protonu nesēju tajās kalpo ūdens.

Analīzei tika izgatavotas 3 dažādu JŠ kompozīti, katrs ar šādām JŠ masas daļām: 10%, 20%, 30% 40%. Vadītspējas noteikšanai pielietoja impedances spektroskopijas metodi. Mērījumus veica temperatūru intervālā 100 – 150 °C bezūdens atmosfērā. Tika konstatēta vadītspējas samazināšanās, pieaugot JŠ alkilķēdes garumam, kā arī augsta temperatūras ietekme uz kompozītmembrānu vadītspēju.

PROTON CONDUCTIVITY OF POLY(ETHER ETHER KETONE)- IMIDAZOLIUM DIMETHYLPHOSPHATE JONIC LIQUID COMPOSITE MEMBRANES AT ELEVATED TEMPERATURE

Einārs Sprugis¹, Guntars Vaivars^{1,2}

¹*Faculty of Chemistry, University of Latvia*

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

Ionic liquids (ILs) are chemical compounds possessing high variety of molecular structure and thus high variety of physical and chemical properties. Research shows that molecular structure of IL have considerable influence on the proton conductivity of these substances. Imidazolium dimethylphosphate based ILs are relative newcomers to the IL family. They are characterized by their high thermal stability, high biodegradability as well as cheap and simple methods of synthesis. In this work, proton conductivity of poly(ether ether ketone) composite membranes containing three different imidazolium dimethylphosphate based ILs were investigated at temperatures above 100 °C. Potential application of these composites is in proton exchange membrane fuel cells where operating temperature of currently most commonly used membrane are limited to 80 °C due to water being a proton carrier.

For analysis, composite membranes incorporating 3 different ILs each with following IL content were prepared: 10%, 20%, 30%, 40%. Conductivity was determined using the impedance spectroscopy method. Measurements were conducted at a temperature interval from 100 °C to 150 °C in anhydrous atmosphere. Decrease of conductivity was detected as the length of the alkyl chain in IL increased. Also, high temperature influence on the conductivity of composite membranes was observed.

PRIEKŠLIKUMS ALTERNATĪVO ENERĢIJU LABORATORIJAI LU AKADĒMISKAJĀ CENTRĀ

Jānis Kleperis¹, Ilze Dimanta², Justs Dimants³, Biruta Sloka⁴,

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts,*

²*Latvijas Universitātes Bioloģijas fakultāte,*

³*Latvijas Universitātes BVEF Ekonomikas un vadības zinātniskais institūts,*

⁴*Latvijas Universitātes Biznesa, vadības un ekonomikas fakultāte*

Šis ir laiks, kad atjaunojamie energoresursi un alternatīvās enerģijas sistēmas tiek ieviestas daudzās pasaules valstīs, lai samazinātu fosilo energoresursu lietošanu un vides piesārņošanu. Tas ir ceļš ne tikai uz tīrāku vidi, bet arī uz citu ekonomiku un mieru pasaulē. Grūti iedomāties zinātņu nozari, kura tieši vai netieši nebūtu saistīta ar atjaunojamiem energoresursiem un alternatīvās enerģijas sistēmām, jo tas ir pamats ilgtspējīgai sabiedrībai uz tīras planētas.

Tādēļ pašsaprotama ir Alternatīvo Enerģiju Laboratorijas klātbūtne Latvijas Universitātes Akadēmiskajā centrā (LU AC). Laboratorijā ietilpst saules fotovoltaisko paneļu (lapas Saules koku zaros LU AC centrālajā laukumā) un dažāda tipa vēja enerģijas ģeneratoru (vertikālas ass Vēja ziedi Saules koka zaros, elektrostriktīva polimēra mazās Saules koka lapas) saražotās enerģijas uzkrāšana akumulatoros un ūdeņraža gāzē adsorbētā (metālhidrīdā)/saspiestā (balonos) veidos; sistēmas vadības bloks, kā arī laboratorijas darbu iekārtas un plakāti alternatīvo enerģijas tehnoloģiju izmantošanai studentiem un demonstrācijām.

PROPOSITION OF RENEWABLE ENERGY LABORATORY FOR THE ACADEMIC CENTRE OF THE UNIVERSITY OF LATVIA

Janis Kleperis¹, Ilze Dimanta², Justs Dimants³, Biruta Sloka⁴

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

²*Faculty of Biology, University of Latvia,*

³*Economics and Management Scientific Institute of FBME, University of Latvia*

⁴*Faculty of Business, Management and Economics, University of Latvia*

This is the time when renewable energy sources and alternative energy systems are being introduced in many countries around the world to reduce the use of fossil energy and environmental pollution. This is a path not only for a cleaner environment, but also for another economics and peace in the world. It is hard to imagine a science sector that is not directly or indirectly related to renewable energy and alternative energy systems, as it is the basis for a sustainable society on a clean planet.

Therefore, the presence of the Alternative Energy Laboratory at the Academic Center of University of Latvia's is self-explanatory. The laboratory includes the system of storage green electric energy in accumulators and in hydrogen gas (absorbed in metal hydride/compressed in cylinders). Green electric energy is produced in Solar Trees that "grows" in the central square of the Academic Center. The Solar Tree has large leafs from solar photovoltaic panels, small leafs from electrostrictive polymers (wind power generators) and Wind Blossoms as vertical ass wind power generators. There are also energy management system unit, as well as demonstration equipment and posters for teaching alternative energy technologies in the laboratory.

The financial support of ERDF and University of Latvia are greatly acknowledged.

ELEKTROKATALĪTISKA CO₂ PĀRVĒRŠANA LIETDERĪGĀ DEGVIELĀ: ELEKTRODU MATERIĀLU APSKATS

Ainārs Knoks, Jānis Kleperis, Līga Grīnberga, Pēteris Lesničenoks, Jūlija Hodakovska,
Mārtiņš Vanags
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Globālu klimata pārmaiņu mazināšanai ir nepieciešams samazināt gāzveida izmešu daudzumu. Avotu samazināšana ne vienmēr ir iespējama, bet to emisijas var samazināt ar dažādām metodēm. CO₂ emisijas ir ne tikai dūmeņos krāsnīm, kurās tiek dedzināti fosilie vai bioloģiskie energoresursi, bet arī pārtikas rūpniecībā dažādos pārtikas ražošanas procesos, piemēram rūgšanas reaktorus alus darītavās. Šādu CO₂ iespējams pārveidot par lietderīgu ķīmisku produktu, piemēram, metānu vai etilēnu. Reducēšanai nepieciešami katalizatoru materiāli ar specifiskām īpašībām, lielas virsmas laukums, pietiekams potenciāls reakciju nodrošināšanai, pietiekoša CO₂ molekulu adsorbcija u.c.

Šajā darbā apskatīti elektrodu materiāli CO₂ reducēšanai par lietderīgu produktu, fokusējoties uz etilēna iegūšanu. Materiālu apskate veikta, ņemot vērā materiālu ražošanas potenciālu un reducēšanas iespējas mērogošanu, kā arī skatītas elektrodu ģeometrijas un iespējamās sintēzes metodes.

ELECTROCATALYTIC CO₂ REDUCTION INTO USEFUL FUEL: INVESTIGATION OF ELECTRODE MATERIAL

Ainars Knoks, Janis Kleperis, Liga Grinberga, Peteris Lesnicenoks, Julija Hodakovska,
Martins Vanags
¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

To reduce global climate change it is necessary to lower the amount of harmful emissions into atmosphere. Source reductions are not always feasible, but their emissions can be reduced by different methods. CO₂ emissions are not limited to chimneys for burning fossil or biological energy resources, but also for the food industry in various food production processes, such as fermentation reactors in breweries. These emissions could be separated and reformed into useful chemical products such as methane or ethylene.

In this work overview of possible electrode materials for catalytic CO₂ reformation into methane and ethylene was performed. Discussion of material design, structural properties as well as synthesis methods is carried out. Focus is put on materials suitable for synthesis of desired chemical product and potential for scaling up. Based on the overview results the conclusions on most suitable materials are made.

The financial support of H2020 project CO2EXIDE is greatly acknowledged.

SINHRONĀ INTEGRĀCIJA BIOIMPEDANCES NELIELU VARIĀCIJU NOTEIKŠANAI

Paul Annus¹, Alberts Kristiņš²

¹ Tallinas Tehnoloģiskās universitātes Tomasa Johana Zēbeka elektronikas nodaļa.

² Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Lai efektīvi noteiktu biomodulāciju, mērot elektrisko bioimpedanci, tiek piedāvāta metode, kā izvēlēties atbildes signāla vērtību starpību. Būtībā atšķirības starp blakus esošajām nolasēm tika apstrādātas un pēc tam digitalizētas (saciparotas). Tā ir vienkāršāka nekā iepriekšējā tiešā nesēja kompensācijas metode un tāpēc tā ir izdevīgāka pārnēsājamo medicīnas instrumentu projektēšanā. Ideālā gadījumā, pie klasiskās vienmērīgas nolasījumu ņemšanas, ieejas signāla vērtība tiek uztverta bezgalīgi īsā laikā. Reāli nolasījumu ņemšana aizņem zināmu laiku, pat ja tas tiek ņemts pēc iespējas īsāks. Bet, kas notiktu, ja paraugu ņemšanas periodu apzināti pagarinātu un aizstātu ar integrēšanu, izmantojot sinhrono integrēšanu visā pētītā signāla periodā? Pēc rūpīgas pārbaudes izrādījās, ka rezultāts ir lineāri saistīts ar minētā signāla atvasinājumu, tāpēc tam ir līdzīgas īpašības kā klasiskajai nolasījumu ņemšanas metodei, bet ar papildus ieguvumu – pateicoties integrēšanai ir mazāka trokšņu sastāvdaļa. Ļoti ieteicama ir iegūtā signāla iepriekšēja filtrēšana, lai samazinātu nevēlamus papildu traucējumus. Sinhronais „lock-in” priekšfiltrs, kurš ir ideāli salāgots ar ierosmes signālu, ļauj novērtēt arī impedances bāzes vērtības lēno mainību un elektrodu stiprinājumu kvalitāti.

Lai noteiktu nelielas bioimpedances variācijas, tika piedāvāta un modelēta jauna „lock-in” integrēšanas metode. Tās pielietošana kopā ar „lock-in” filtru ļauj ar vienkāršiem mazjaudas ievadiem iegūt bioimpedances mērījumus ar pastiprinātu aizsardzību pret artefaktiem. Var būtiski samazināt prasības analogai- ciparu pārveidošanai, kuru izmanto pēc detektēšanas shēmas.

SYNCHRONOUS INTEGRATION FOR DETECTION OF TINY BIOIMPEDANCE VARIATIONS

Paul Annus¹, Alberts Kristiņš²

¹ Thomas Johann Seebeck Department of Electronics, Tallinn University of Technology (TTU)

² Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Sampling of the response signal differences during electrical bioimpedance measurement has been proposed as method of choice for effective bio modulation detection. Essentially differences between adjacent samples were processed, and then digitized. It is simpler than earlier direct carrier compensation method, and is therefore practical for design of wearable medical instruments. Ideally the value of the input signal is captured during infinitely short time instance in case of classical uniform sampling. In real applications sampling takes some time, even if it is kept as short as possible. But what if the sampling period is deliberately prolonged and replaced with integration instead, by taking synchronous integrals over the period of investigated signal? Result is linearly related to the derivative of said signal as it turns out after closer inspection, and as such has similar properties as sampling method, but with added benefit of lesser noise contribution due to integration. Pre-filtering of the acquired signal is highly recommended to minimize the contribution of unwanted additive disturbances. Synchronous lock-in pre-filter, which is ideally matched to the excitation signal, will also enable assessment of the slowly varying base value of the impedance, and enables assessment of the quality of the electrode attachment.

Novel lock-in integration for detection of tiny bioimpedance variations has been proposed and simulated. When applied together with lock-in filtering it enables design of simple low power front ends for bioimpedance acquisition with enhanced protection against artefacts. Requirements for the analog to digital conversion used after the detection circuitry can be substantially relaxed.

ATOMU KODOLU STRUKTŪRAS PĒTĪJUMI LATVIJĀ (1961.-2017.gg.)

Tamāra Krasta, Ļubova Simonova
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

1958.gadā LZA Fizikas institūtā tika izveidota Reaktora laboratorija, par kuras vadītāju tika iecelts Pēteris Prokofjevs. Laboratorijas uzdevums bija pētnieciskā kodolreaktora celtniecība Latvijā un tā turpmākās izmantošanas plānošana. Līdz ar Salaspils reaktora sekmīgo palaišanu ekspluatācijā 1961.gada 26.septembrī, laboratorija sadalījās vairākās atsevišķās struktūrvienībās. Pētera Prokofjeva vadībā tika izveidota Kodolreakciju laboratorija atomu kodolu struktūras fundamentāliem pētījumiem. Eksperimentālo mērījumu veikšanai tika uzbūvēta unikāla iekārta – beta-spektrogrāfs, kas pēc saviem parametriem toreiz bija viena no labākajām pasaulē. Tika arī izveidots augsti kvalificētu kodolfiziķu kolektīvs, kas ļāva nodibināt un uzturēt plašu starptautisku sadarbību ar citiem kodolpētniecības centriem (Dubnā, Rosendorfā, Minhenē, Grenoblē, Brukheivenā, Livermorā, Režā, u.c.). 80.-jos gados jaunu eksperimentālo struktūras pētījumu veikšanai Salaspilī tika uzbūvēta iekārta ātro neitronu neelastīgās izkliedes ($n,n'\gamma$) reakcijas mērījumiem. Starptautiskā sadarbība sekmīgi turpinājās arī pēc Salaspils pētnieciskā reaktora slēgšanas, veicot eksperimentus citos kodolpētniecības centros, bet mērījumu rezultātu analīzi un teorētisko interpretāciju - Latvijā. Kopumā laboratorija piedalījās pāri par 80 kodolu struktūras izpētē, galvenokārt masas skaitļa $144 \leq A \leq 194$ apgabalā, kas ietver gan stipri deformētos kodolus, gan kodolus deformācijas fāzu pārejas apgabalos pie $A \sim 150$ un $A \sim 190$. Iegūtie rezultāti tika publicēti pāri par 150 žurnālu rakstos, 2 monogrāfijās, pāri par 50 materiālos rakstu krājumos, 12 preprintos, kā arī pāri par 300 konferenču ziņojumos.

NUCLEI STRUCTURE STUDIES IN LATVIA (1961.-2017.)

Tamāra Krasta, Ļubova Simonova
Institute of Solid State Physics of the Latvian University

In 1958, in the Physics Institute of the Latvian Academy of Sciences, the Reactor laboratory was created. The aim of laboratory headed by Peteris Prokofjevs was to build nuclear research reactor in Latvia and to plan its future use. In September, 1961, when Salaspils reactor was put into operation, the laboratory was divided into several separate units. Peteris Prokofjevs became a head of Nuclear Reaction laboratory whose field of research was fundamental nuclear structure studies. The beta-spectrograph created for experimental measurements was at the time one of the best research instruments of such a kind in the world. The staff of Nuclear Reaction laboratory - a group of highly qualified nuclear physicists, established and ensured wide international collaboration with other nuclear research centers (Dubna, Rossendorf, Munich, Grenoble, Brookhaven, Livermore, Rež, etc.). In 80-ies, in order to perform new experiments in Salaspils, the set-up for fast neutron inelastic scattering ($n,n'\gamma$) reaction measurements was built. International collaboration was continued successfully also after the shut-up of Salaspils research reactor. Experiments were performed in other nuclear research centers, while analysis and theoretical interpretation of measurement results were carried out in Latvia. In total, the laboratory participated in structure studies of more than 80 nuclei, belonging mostly to the $144 \leq A \leq 194$ mass number region, including strongly deformed nuclei, as well as nuclei of the shape phase transition regions at $A \sim 150$, and $A \sim 190$. Research results have been published in more than 150 journal articles, 2 monographs, more than 50 papers in various scientific material collections, 12 preprints, as well as reported in more than 300 conference presentations.

KODOLENERĢIJA UN RADIĀCIJA, MĪTI UN ĪSTENĪBA

Visvaldis Grāveris

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Saskaņā ar SAEA datubāzes PRIS datiem šī gada sākumā pasaulē darbojas 448 enerģētiskie kodolreaktori, no tiem apmēram 1/3 ES un kopējā reaktoru lietošanas pieredze sasniegusi 17500 reaktoru-gadus. Tiek būvēti jauni – 59 reaktors un tikai 4 ES, bet 2/3 Āzijas valstīs, visvairāk Ķīnā.

Tai pašā laikā ES vadošā valsts Vācija pēc Fukušimas avārijas apņēmusies slēgt visus reaktorus.

- Vai tiešām Fukušimā notika apokaliptiska radiācijas avārija?
- Uz kādiem kļūdainiem pieņēmumiem balstās masveidīgā un tumsonīgā radiācijas biedēšanas politika?
- Kādēļ līdz šim radiācijas aizsardzībā par pamatu ņemtā LNT (Lineārā Bez Sliekšņa) teorija vairs neatbilst mūsdienu zināšanām un praksei par radiācijas iedarbību?

Pienācis laiks, nosakot jaunus radiācijas aizsardzības normatīvus, no līdzšinējās ALARA (Tik Zema Cik Racionāli Sasniedzams) pieejas pāriet uz mūsdienu radiācijas medicīnas un radiobioloģijas zināšanām balstītu AHARS (Tik Augstu Cik Relatīvi vēl Droši) principu. Šāda pieeja novērstu daudzus nevajadzīgus nāves gadījumus, kā arī novērstu milzīgus ekonomiskos zaudējumus.

NUCLEAR ENERGY AND RADIATION, MYTHS AND REALTY

Visvaldis Graveris

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

According to IAEA PRIS data beginning this year in the world operate 448 power reactors, 1/3 among them in EU. Experience of power reactors reach 17500 reactor-years. Now there are build 59 new reactor, 2/3 of them in Asian countries, but only 4 in EU.

Concurrently leading country of EU Germany after Fukushima accident pledged to close all nuclear power reactors.

- Are you sure that Fukushima accident was apocalyptic radiation disaster?
- What faulty presumptions the massive and obscure radiation harassing policy is based?
- Why LNT (Linear No Threshold) theory still used for setting radiation limits don't comply with the modern knowledge of radiation impact?

It is time to change radiation limits leaving ALARA (As Low As Reasonably Achievable) approach and switch to the AHARS (As High As Relatively Save) limits based on knowledge derived from the modern nuclear medicine and radiobiology. This will avoid a lot of unnecessary deaths and huge economical losses as well.

21. februāris

STENDA REFERĀTI

FOTOELEKTRISKAIS SIGNĀLS IEROSINOT LOKALIZĒTUS STĀVOKĻUS TĪROS III UN IV VEIDA SILICIJA DIOKSĪDA STIKLOS

Anatolijs Truhins

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Lokalizētie stāvokļi stiklos ir fundamentāla parādība, silīcija dioksīda stiklos tos atklāja pētotot tajos ierosinātu rekombinatīvo luminiscenci. Uzskata, ka rekombinatīvās luminiscences ierosmē tiek radīti lokalizēti stāvokļi, kas saistīti ar lādiņu telpisku atdalīšanu un lokalizāciju - elektrona saķeršanu uz tā saucamā I veida skābekļa deficīta centra jeb ODC(I) un autolokalizēta cauruma izveidošanos. Rekombinatīva luminiscence rodas tunela vai virs barjeras procesos. Uzskats, ka notiek lādiņu atdalīšanās, paredz ierosmes laikā foto elektrisku signālu. Veiktajos eksperimentos paraugu ierosināšanai izmantoja trīs eksimera lāzerus KrF (248 nm), ArF (193 nm) un F₂ (157 nm). un foto elektriskā signāla detektēšanu veica ar VA-J-52 elektrometru, kura jutība ir $\sim 10^{-15}$ A. Tika novērota lādiņu telpiskās atdalīšanas radīta foto elektriskā polarizācija (Dembera efekts), kura rada telpiski limitētu strāvu. $\sim 10^{-13}$ A līmenī (pie nepārtrauktas ierosmes signāls ir līdz nullei krītošs impulss). Pētījumā izmantotie paraugi bija tīri kvarca stikli III (liela OH grupu koncentrācija sintēzes tehnoloģijas dēļ, KY-1) un IV tipa (nesatur OH grupas, KC4B) ka arī IV tipa kvarca stikli ar Al. Al efektīvi saķer caurumus pie istabas temperatūras. Tādejādi eksperimentos ir iegūts apstiprinājums, ka lokalizētu stāvokļu radīšanas laikā, notiek lādiņu telpiska atdalīšana.

PHOTOELECTRIC RESPONSE FROM LOCALIZED STATES OF PURE SILICA TYPES III AND IV

Anatoly Trukhin

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Localized states of glass are fundamental property. Localized states of silica glasses were discovered through recombination luminescence after excitation. It was assumed that excitation of localized states leads to charge separation with electron trapping on so called oxygen deficient center type I or briefly ODC(I) and self-trapped hole. Recombination in tunneling of over barrier process provides luminescence. Assumption of charge separation foresees existence of electric response under excitation. Experiments of photoelectric response detection were performed. Photoelectric polarization due to charge separation in space (Dember field) was detected by electrometer VA-J-52 with sensitivity $\sim 10^{-15}$ A. The samples of investigation were purest silica glass of type III (high OH containing KY-1) and type IV (OH free KC4B). Comparison was made with Al containing silica type IV, efficiently trapping holes at 293 K. For excitation three excimer lasers KrF (248 nm), ArF (193 nm) and F₂ (157 nm) were used. Photoelectric responses with effect of space charge limited current (a pulse of response falling to zero for continuous excitation) is on the level of $\sim 10^{-13}$ A. Its detecting is supporting assumption of charge separation when localized states are excited.

ZnO NANOPULVERU UN KERAMIKU EKSITONU LUMINISCENCE

Larisa Grigorjeva, Aleksejs Zolotarjovs, Donats Millers, Jurgis Grūbe
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Nanostrukturētu ZnO iegūšanas metodes strauji attīstās pēdējo gadu laikā, piemēram tiek sintezēti nanopulveri ar dažādu morfoloģiju, kā arī plānās kārtiņas.

Izmantojot nanopulverus kā izejas materiālus tiek izgatavotas keramikas, tanī skaitā arī optiskās keramikas [1].

Viens no praktiskajiem pielietojumiem ir ZnO ātrie keramiskie scintillātori jonizējošā starojuma detektēšanai. Šo scintillatoru darbības princips saistīts ar ZnO eksitonu luminiscenci, kura nav pilnībā nodzēsta pie 300K.

Veikti eksitonu luminiscences pētījumi neaktivētiem un ar Ga, In aktivētiem ZnO nanopulveriem un keramikām. Noteikti un salīdzināti ExD^0 luminiscences dzīves laiki atkarībā no aktivatora. Parādīts, ka īsākie dzīves laiki ir novērojami ZnO:In keramikā (~19 ps pie 300K).

EXCITONIC LUMINESCENCE OF ZnO NANOPOWDERS AND CERAMICS

Larisa Grigorjeva, Aleksejs Zolotarjovs, Donats Millers, Jurgis Grube
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The synthesis of ZnO nanostructures, nanoparticles with different morphology as well as thin films are being intensively developed in last years. Various ZnO nanopowders, were used as a raw material for ceramic sintering, including optical ceramic [1].

One of the practical applications of ZnO is fast ceramic scintillators for ionizing radiation detection. The scintillation mechanism is based on ZnO excitonic luminescence that is not completely quenched at 300K.

Excitonic luminescence was studied in undoped ZnO nanopowders and ceramics as well as doped with Ga and In. The ExD^0 luminescence decay times were estimated and are compared depending on dopants. It is shown that the faster decay time is observed in ZnO:In ceramic (~19 ps at 300K).

[1]. P.A. Rodnyi, K.A. Chernenko, E.I. Gorokhova et al. Novel scintillation material – ZnO transparent ceramics. IEEE Trans. Nucl. Sci. 59, 2152 (2012).

The authors gratefully acknowledge the financial support for this work from research grant ERA.NET RUS _ST2017-051.

FOSFORISCĒJOŠU PĀRKLĀJUMU IEGŪŠANA AR PLAZMAS ELEKTROLĪTISKĀS OKSIDĀCIJAS METODI

Krišjānis Auziņš, Krišjānis Šmits, Aleksejs Zolotarjovs, Ivita Bite, Katrīna Laganovska
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Plazmas elektrolītiskās oksidācijas (PEO) procesā iegūtiem metāla pārklājumiem piemīt palielināta cietība, noturība pret koroziju un nodilumu salīdzinot ar neapstrādātu metāla virsmu. Relatīvi neilgā laikā iespējams iegūt vairākus mikrometrus biezu oksīda slāni, kura kristālisko struktūru, morfoloģiju un sastāvu iespējams modificēt mainot procesa parametrus. Pēdējos gados PEO metodes pētījumos ir iegūti luminiscējoši pārklājumi, kuriem ir plašs potenciālo pielietojumu klāsts, tomēr šo pārklājumu industriāliem pielietojumiem ir nepieciešama procesa pilnveidošana un optimizācija.

Šajā pētījumā veikta PEO procesa parametru optimizācija ar mērķi uzlabot iegūto oksīda pārklājumu luminiscences īpašības un pēcspīdēšanas ilgumu. Tika pētīta elektrolīta sastāvā esošo vielu koncentrāciju un PEO procesa ilguma ietekme uz iegūto pārklājumu luminiscences īpašībām. Pārklājumu luminiscences īpašību raksturošanai un savstarpējai salīdzināšanai tika veikti fotoluminiscences un termostimulētās luminiscences (TSL) mērījumi, kā arī apskatīta luminiscence pie zemām temperatūrām (10K). Papildus tam tika veikti SEM un XRD mērījumi, lai pārliecinātos par alumīnija α fāzes klātbūtni iegūtajos pārklājumos.

PRODUCTION OF PHOSPHORESCENT COATINGS USING PLASMA ELECTROLYTIC OXIDATION METHOD

Krisjanis Auzins, Krisjanis Smits, Aleksejs Zolotarjovs, Ivita Bite, Katrina Laganovska
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Oxide coatings on metal surfaces obtained using plasma electrolytic oxidation (PEO) process have increased hardness as well as outstanding resistance to corrosion and wear when compared to an unprocessed metal surface. In a relatively short time it is possible to produce tens of micrometres thick oxide layer as well as to modify its crystalline structure, morphology and composition by changing PEO process parameters. During the recent years, a selection of luminescent PEO coatings have been developed; although various technological improvements and optimization of the process is necessary for industrial usability.

In this research the optimization of PEO process parameters was performed to improve luminescent properties and afterglow duration of the acquired phosphorescent oxide coatings. The effects of concentrations of main additives in electrolyte and duration of PEO process on luminescent properties of the acquired coatings were studied. Measurements of photoluminescence and thermally stimulated luminescence (TSL) were made for characterization and comparison of luminescent properties of coatings and to gain additional data the luminescence at low temperatures (10K) was examined. Additionally, SEM and XRD measurements were performed to verify the presence of α alumina phase (corundum) in the acquired coatings.

The financial support of ERAF project Nr.1.1.1.1/16/A/182 realised at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.

EIROPIJA JONU LUMINISCENCE HAFNIJA DIOKSĪDA NANOKRISTĀLOS AR NIOBIJU

Katrīna Laganovska, Krišjānis Šmits, Ivita Bite, Aleksejs Zolotarjovs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Ar retzemju elementiem aktivēts HfO_2 ir piemērots materiāls jaunas paaudzes mikro- un opto- elektronikas iekārtām, tomēr vielā esošie defekti ierobežo un apgrūtina to plašu praktisku pielietojumu. Neseni pētījumi liecina par ievērojamu defektu skaita samazināšanos un luminescences intensitātes uzlabošanos metāla oksīdu materiālos ar lādiņu kompensējoša elementa (Nb^{5+}) piejaukumiem.

Darba gaitā LU CFI sintezēti vairāki $\text{HfO}_2:\text{Eu}^{3+},\text{Nb}^{5+}$ paraugi: 5mol% Eu^{3+} ; 10mol% Eu^{3+} ; 5mol% Eu^{3+} un 5mol% Nb^{5+} . Katras koncentrācijas paraugi tika izkarsēti 800°C, 1000°C un 1200°C grādu temperatūrās.

Fāzu noteikšanai paraugiem uzņemtas rentgendifraktogrammas un secināts, ka fāzes svārstās no kubiskas uz monoklīnu atkarībā no karsēšanas temperatūras un piejaukumu koncentrācijas. Apstarojot paraugus ar 266nm lāzera starojumu, tika nomērīts paraugu fotoluminescences spektrs. Uzņemts termostimulētās luminescences spektrs 10K līdz 300K robežās un konstatēta ievērojama defektu (skābekļa vakanču) skaita samazināšanās paraugos ar niobija piejaukumu. Salīdzinātas ${}^5\text{D}_0\text{-}{}^7\text{F}_2$ un ${}^5\text{D}_0\text{-}{}^7\text{F}_1$ pāreju intensitātes un veikti secinājumi par izmaiņām kristāla lokālajā simetrijās.

Apkopojot rezultātus tika izdarīti secinājumi par $\text{HfO}_2:\text{Eu}^{3+}, \text{Nb}^{5+}$ optiskajām īpašībām un izmaiņām defektu klātbūtnē un struktūrā.

NIOBIUM ENHANCED EUROPIUM ION LUMINESCENCE IN HAFNIA NANOCRYSTALS

Katrīna Laganovska, Krisjanis Smits, Ivita Bite, Aleksejs Zolotarjovs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

HfO_2 doped with rare earth (RE) elements is a promising material for applications in micro- and opto- electronic devices, however defects present in the material limit and complicate practical use of the material. Recent studies show a significant defect decrease and an increase in luminescence intensity in RE doped metal oxide materials with a charge compensating element (Nb^{5+}) added.

In this work multiple samples of $\text{HfO}_2:\text{Eu}^{3+},\text{Nb}^{5+}$ were synthesized: 5mol% Eu^{3+} ; 10mol% Eu^{3+} ; 5mol% Eu^{3+} and 5mol% Nb^{5+} . Samples were annealed at 800°C, 1000°C and 1200°C temperatures.

To determine the phase of the samples, X-ray diffractograms were taken. It was concluded that the structure of samples can be monoclinic or cubic depending on dopant concentrations and annealing temperatures. Samples were excited with a 266nm laser and their photoluminescence spectra were recorded. Thermostimulated luminescence was observed in temperatures from 10K to 300K and samples containing niobium showed a significant decrease of defects (oxygen vacancies). ${}^5\text{D}_0\text{-}{}^7\text{F}_2$ and ${}^5\text{D}_0\text{-}{}^7\text{F}_1$ transition intensities were compared and conclusions about changes in the local symmetry were drawn.

Based on the experimental results, changes in $\text{HfO}_2:\text{Eu}^{3+}, \text{Nb}^{5+}$ sample optical properties, defect concentration and structure are discussed.

The financial support of ISSP UL Scientific Research Projects for Students and Young Researchers project **SJZ/2016/15** is greatly acknowledged.

ELEKTRONU MIKROSKOPIJAS IETEKME UZ AUGŠUP-PĀRVEIDOJOŠO NANODAĻIŅU LUMINISCENCES ĪPAŠĪBĀM

Aleksejs Zolotarjovs¹, Krišjānis Šmits¹, Guna Kriekē¹, Ivita Bite¹, Daniel Jaque²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Fluorescence Imaging Group, Universidad Autónoma de Madrid, Spain*

Pēdējo gadu laikā ātri attīstās uz luminiscences efekta balstītās in-vivo skrīninga un mērījumu metodes, jo paredzamas plašas pielietojumu iespējas. Kā vienu no materiālu grupām var atzīmēt augšup-pārveidotās luminiscence nanodaļiņas (UCNP, no angl. Up-converting nanoparticles). Šīm daļiņām novērojama pietiekami liela kvantu efektivitātei, ierosmes un luminiscences viļņa garumu pielāgošanas iespēja un jūtība pret ārējiem apstākļiem (piem., temperatūru). Diemžēl, vairākās tehniskās un tehnoloģiskās problēmas patreiz ierobežo šāda tipa materiālu lietošanu reālā medicīniskā izmeklēšanā. Viena no problēmām ir daļiņu aglomerācija bioloģiskās sistēmās, kas ir ļoti grūti kontrolējama un ietekmē mērījumu rezultātus. Lai izpētīt daļiņu aglomerācijas efektu ir jāveic kompleks pētījums: uznesot UCNP uz TEM režģiem un mērot luminiscenci no precīzi definētam vietām. Tomēr, šāda pētījuma veiksmīgai rezultātu interpretācijai ir nepieciešams no sākuma izpētīt papildus ietekmējošos faktorus kā piemēram UCNP reakcija ar režģa materiālu, intensīvā elektronu kūļa ietekme uz luminiscenci u.c., kas arī tiek darīts šī darba gaitā. Pētījums tiek veikts izmantojot ar retām zemēm leģētas NaYF₄, kā arī oksīdu daļiņas.

THE IMPACT OF ELECTRON MICROSCOPY ON THE LUMINESCENCE OF UP-CONVERTING NANOPARTICLES

Aleksejs Zolotarjovs¹, Krisjanis Smits¹, Guna Kriekē¹, Ivita Bite¹, Daniel Jaque²

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

²*Fluorescence Imaging Group, Universidad Autónoma de Madrid, Spain*

In recent years the luminescence based in-vivo screening and sensorics methods are rapidly developing due to their wide possible application range. One of the widely studied groups of materials is up-converting nanoparticles (UCNPs), which exhibit great quantum efficiency, tuneable emission and luminescence wavelengths as well as sensitivity to environment (e.g. temperature). Unfortunately, many technical and technological problems limit UCNP use in real medical applications. One of the problems is particle agglomeration in biological medium, which is hardly controllable and affects the measurement results. To study the effect of the agglomeration a complex study should be performed: inserting UCNPs on TEM grids followed by the luminescence measurements from precisely defined points. However, to successfully interpret the results of such study it is important to know any additional impacting factors: UCNP reaction with TEM grid, intense electron beam irradiation and others, and that is the aim of the present study.

The study is performed using NaYF₄ nanoparticles doped with rare earth atoms as well as oxides.

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2017/12 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.

AR NEITRONIEM, ELEKTRONIEM APSTAROTU UN TERMOĶĪMISKI REDUCĒTU $Y_3Al_5O_{12}$ UN $Gd_3Ga_5O_{12}$ MONOKRISTĀLU TERMOSTIMULĒTĀS LUMINISCENCES MĒRĪJUMI

Anatoli I. Popovs¹, Edgars Elsts¹, Evgeni Shablonin², Evgeni Vasil'chenko², A. Ch.Lushchik², Vladimir Kuzovkov, Meldra Ķemere², Laima Trinkler¹, Juan Enrique Munoz Santiuste³

¹ *Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

² *Institute of Physics, University of Tartu*

³ *Departamento de Física, Escuela Politécnica Superior, Universidad Carlos III de Madrid*

Ar ātrajiem neitroniem, kuru enerģijas blīvums 2.1×10^{17} vai 2.18×10^{19} n/cm² vai ar elektroniem, kuru enerģija ir 1.8 MeV apstarotiem, vai termokīmiski reducētiem $Y_3Al_5O_{12}$ un $Gd_3Ga_5O_{12}$ monokristāliem tika veikti uzkrātās enerģijas termostimulētās luminiscences mērījumi temperatūru diapazonā no 300 līdz 720 K, kuri tiks salīdzināti ar iepriekš publicētiem datiem.

Tika konstatēta un analizēta skaidri izteikta starojuma dozas ietekme. Tai skaitā, $Y_3Al_5O_{12}$ paraugos, kas tika pakļauti 2.18×10^{19} n/cm² starojumam, tika novēroti četri TSL maksimumi, bet paraugā, kas pakļauts 2.16×10^{17} starojumam, tika konstatēti tikai trīs TSL maksimumi. Tika veikta $Y_3Al_5O_{12}$ izspīdināšanas maksimumu kinētiskā analīze. Katram TSL maksimumam raksturīga atbilstoša aktivācijas enerģija, kuras abiem kristāliem ir 0,8-1,3 eV. Iegūtās vērtības tika salīdzinātas ar aktivācijas enerģijām, kas atbilst F-tipa centru izkarsēšanai. Turklāt, mēs esam arī veikuši fotoluminiscences īpašību salīdzinošu analīzi neitronu apstarotu paraugu sērijai un neapstarotam $Y_3Al_5O_{12}$ monokristālam. Visbeidzot, tika pārbaudīta un raksturota lāzera inducētā $F \rightarrow F^+$ krāsu centra fotokonversija.

THERMOSTIMULATED LUMINESCENCE MEASUREMENTS OF NEUTRON, ELECTRON AND THERMOCHEMICALLY-REDUCED $Y_3Al_5O_{12}$ AND $Gd_3Ga_5O_{12}$ SINGLE CRYSTALS

Anatoli I. Popov¹, Edgars Elsts¹, Evgeni Shablonin², Evgeni Vasil'chenko², A. Ch.Lushchik², Vladimir Kuzovkov, Meldra Ķemere², Laima Trinkler¹, and Juan Enrique Munoz Santiuste³

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

² *Institute of Physics, University of Tartu*

³ *Departamento de Física, Escuela Politécnica Superior, Universidad Carlos III de Madrid*

The results of the thermostimulated luminescence measurements, performed between 300 and 720 K of the stored energy in $Y_3Al_5O_{12}$ and $Gd_3Ga_5O_{12}$ single crystals, irradiated by fast neutrons with fluencies of 2.1×10^{17} or 2.18×10^{19} n/cm² or 1.8 MeV electrons, or thermochemically reduced will be reported and compared with previously published data.

A clear pronounced dose effect was found and analyzed. In particular, four TSL peaks were observed in $Y_3Al_5O_{12}$ samples subjected 2.18×10^{19} n/cm², while in sample subjected 2.16×10^{17} , only three TSL peaks were detected. A comprehensive kinetic analysis of the glow peaks in $Y_3Al_5O_{12}$ is performed. As usual, each TSL peak is characterized by the appropriate activation energies, which both crystals are 0.8-1.3 eV. The obtained values are compared with the appropriate activation energies for F-type center annealing. Furthermore, we have also performed a comparative analysis of the photoluminescence properties of a series of neutron-irradiated and non-irradiated $Y_3Al_5O_{12}$ single crystals. Finally, a laser-induced $F \rightarrow F^+$ color center photoconversion was examined and characterized as well.

SINTĒTISKĀ ALEKSANDRĪTA OPTISKĀS ĪPAŠĪBAS

Vera Skvortsova¹, Nina Mironova –Ulmane¹, Laima Trinklere¹, Vladimir Merkulov²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Cietvielu un pusvadītāju fizikas institūts BNZA, Minska, Baltkrievija*

Aleksandrīts ir hrizoberila kristālu paveids ar šādu ķīmisko sastāvu: $\text{BeAl}_2\text{O}_4:\text{Cr}^{3+}$. Šis materiāls ir no dārgakmeņu saimes ar augstu ekonomisko un tehnoloģisko potenciālu. Šajā darbā mēs apskatīsim optiskās absorbcijas un luminiscences mērījumu rezultātus sintētisko aleksandrīta paraugiem.

Plašas joslas, kuras novērotas aleksandrīta kristālu absorbcijas spektros, ir saistītas ar pāreju no pamatstāvokļa $^4\text{A}_{2g}$ uz ierosinātajiem stāvokļiem $^4\text{T}_{2g}$ (josla A, centrēta pie 575 nm) un $^4\text{T}_{1g}$ (josla B, centrēta pie 420 nm). Šīs joslas attiecinā uz Cr^{3+} joniem, kas var atrasties divu veidu mezglos ar atšķirīgu simetriju. Trešā josla, kuru parasti sauc par C, atrodas UV rajonā (250 nm) un ir saistīta vai nu ar lādiņa pārnese pāreju vai pāreju uz $3d^3$ konfigurācijas augstākajiem līmeņiem, piemēram, $^4\text{T}_{1g}$ līmeņiem. Bez tam, tiek novērotas R līnijas, kas saistītas ar Cr^{3+} jona aizliegto $^4\text{A}_2 \rightarrow ^2\text{E}$ pāreju, un svārstību līnijas. Aleksandrīta kristālos tika novērotas luminiscences joslas ($\lambda_{\text{ex}} = 325$ nm) ar maksimumiem pie 676, 680, 689 un 695 nm. Joslas 676 un 680 nm atbilst Cr^{3+} jona R_2 un R_1 līnijām Al_2 vietā. Joslas 689 un 695 nm atbilst Cr^{3+} jona S_2 un S_1 līnijām Al_1 vietā.

OPTICAL PROPERTIES OF SYNTHETIC ALEXANDRITE

Vera Skvortsova¹, Nina Mironova-Ulmane¹, Laima Trinklere¹, Vladimir Merkulov²

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

²*Institute of Solid State and Semiconductor Physics NASB, Minsk, Belarus*

Alexandrite is a variety of chrysoberyl crystal that contains chromium in its structure and presents the following chemical composition: $\text{BeAl}_2\text{O}_4:\text{Cr}^{3+}$. It belongs to families of gems of high economical and technological interest. In this paper, we present results of optical absorption and luminescence measurements for synthetic alexandrite samples.

The wide bands observed in absorption spectra of alexandrite crystals are associated with the transition from ground state $^4\text{A}_{2g}$ to excited states $^4\text{T}_{2g}$ (band A, centered at 575 nm) and $^4\text{T}_{1g}$ (band B, centered at 420 nm). These bands are attributed to Cr^{3+} ions, which may be present in the two sites of distinct symmetries. A third band is generally called C and is located in the UV region (250 nm), it has been related either to a charge transfer transition or to a transition terminating in one of the highest levels of the $3d^3$ configuration, such as the $^4\text{T}_{1g}$ levels. In addition, there are observed R-lines assigned to the forbidden $^4\text{A}_2 \rightarrow ^2\text{E}$ transition of Cr^{3+} ions and vibronic lines. We found that the alexandrite crystals showed the luminescence spectra ($\lambda_{\text{ex}}=325$ nm), with Cr^{3+} peaks at 676, 680, 689 and 695 nm. Bands 676 and 680 nm belong to the R_2 and R_1 lines of Cr^{3+} ions in Al_2 site. Bands 689 and 695 nm belong to the S_2 and S_1 lines of Cr^{3+} ions in Al_1 site.

ZnO₂ PLĀNO KĀRTIŅU UZKLĀŠANA AR REAKTĪVU MAGNETRONO IZPUTINĀŠANU PIE KRIOGĒNAS TEMPERATŪRAS

Jevgēnijs Gabrusenoks, Mārtiņš Zubkins, Kaspars Vinis, Halil Arslan, Roberts Kalendarevs,
Juris Purāns
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Cinka peroksīds (ZnO₂) ir pusvadītājs ar platu aizliegto zonu, kas pēdējo desmit gadu laikā ir piesaistījis lielu zinātnieku interesi. Zinātnieki galvenokārt koncentrējas uz ZnO₂ nanodaļiņām, pateicoties to daudzsološajām īpašībām un dažādām tehnoloģijām, kas izstrādātas nanodaļiņu sintēzei. Atšķirībā no ZnO₂ nanodaļiņām, ZnO₂ plāno kārtiņu izgatavošanas iespējas un to īpašības ir maz izpētītas.

Rentgenstariem amorfas (nanokristāliskas) ZnO₂ kārtiņas uz stikla, Ti un Si pamatnēm tika izgatavotas ar reaktīvu līdzstrāvas magnetrono izputināšanas metodi pie kriogēnas temperatūras (- 150 °C). Lai iegūtu kriogēnu pamatnes temperatūru, vakuuma iekārta tika aprīkota ar šķidra slāpekļa dzesējamu parauga turētāju.

ZnO₂ fāzes veidošanos apstiprina Ramana un FTIR spektri, kuros novērojamas ZnO₂ svārstību modas. Svārstību joslas ir platas, kas liecina par amorfu vai nanokristālisku struktūru. Šo faktu apstiprina XRD mērījumi, jo netika novēroti ZnO₂ struktūras difrakcijas maksimumi.

Šajā darbā tiek parādīts, ka, samazinot pamatnes temperatūru līdz kriogēnai temperatūrai, ir iespējams izgatavot ZnO₂ kārtiņas.

CRYOGENIC DEPOSITION OF ZnO₂ THIN FILMS BY REACTIVE MAGNETRON SPUTTERING

Jevgēnijs Gabrusenoks, Martins Zubkins, Kaspars Vilnis, Halil Arslan, Robert Kalendarev,
Juris Purans¹
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Zinc peroxide (ZnO₂) is a wide band gap semiconductor which has gained the interest of scientists in the last decade. The scientists mainly focus on the ZnO₂ nanoparticles due to the promising properties and various techniques developed for the nanoparticle synthesis. In contrast to the ZnO₂ nanoparticles, only few studies deal with the ZnO₂ thin films.

X-rays amorphous (nanocrystalline) ZnO₂ films on glass, Ti and Si substrates were deposited by reactive DC magnetron sputtering at cryogenic temperature (- 150 ° C). To obtain the cryogenic substrate temperature, the vacuum system was equipped with a liquid nitrogen cooled sample holder.

The ZnO₂ vibration modes in the Raman and FTIR spectra confirm the formation of the ZnO₂ phase. The vibration bands are wide, indicating an amorphous or nanocrystalline structure. This fact is supported by the XRD measurements, because no diffraction maximums of the ZnO₂ structure were detected.

In this study, it is shown that by reducing the temperature of the substrate to the cryogenic temperature, it is possible to deposit ZnO₂ film.

IRĪDIJA JONU VALENCES STĀVOKLIS CINKA-IRĪDIJA OKSĪDA PLĀNAJĀS KĀRTIŅĀS

Halil Arslan, Vera Skvorcova, Mārtiņš Zubkins, Roberts Kalendarevs, Juris Purāns
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Lai gan caurspīdīgajiem vadošajiem oksīdiem (TCO) ir ievērojama nozīme pašreizējā un nākotnes zinātnē un tehnoloģijās, caurspīdīgās elektronikas ražošana ir ierobežota, jo ir grūtības izgatavot *p*-tipa TCO. Lai atrisinātu šo problēmu, ZnM_2O_4 (*M*: Rh, Co, Ir) kārtiņas ar špineļa struktūru nākotnē var tikt izmantotas kā *p*-TCO materiāls. Šajā pētījumā tiek parādīti cinka- irīdija oksīda plāno kārtiņu ar dažādu Ir koncentrāciju (7, 16,1, 29,4, 53,5, 67,4 at.%) absorbcijas un XANES spektru izpētes rezultāti. Kārtiņas tika izgatavotas ar reaktīvu DC magnetrono kop-izputināšanu (pamatnes = stikls, Ti, Si un poliimīda plēve). Irīdija joniem (*5d* pārejas metālu joni) var būt atšķirīgi valences stāvokļi dažādos savienojumos. Rodas ļoti sarežģīta situācija, ja joniem vienā un tajā pašā materiālā ir dažādas valences, turklāt šie joni aizņem gan tetraedriskās, gan oktaedriskās pozīcijas. Jonu valences stāvokli un pozīciju būtiski ietekmē kārtiņu augšanas apstākļi. Zn K-malas (9659ev) un Ir L_3 -malas (11215ev) XAS mērījumi tika veikti caurlaidības režīmā SOLEIL sinhrotronā ar eksperimentālo līniju Samba. XAS rezultāti atklāj, ka Ir koncentrācijas izmaiņa kārtiņās izraisa Ir valences stāvokļa daudzveidību, citiem vārdiem sakot, Ir jonu oksidācijas stāvokli ar dažādām vērtībām (3+, 4+, 5+). No otras puses, tika konstatēts, ka cinka-irīdija oksīda kārtiņu absorbcijas spektri satur plašas absorbcijas joslas redzamajā un tuvajā infrasarkanajā spektra daļā. Plāno kārtiņu caurlaidība samazinās, palielinoties Ir koncentrācijai. Tas norāda uz tiešu saikni starp valences stāvokļa maiņu (*d* orbitāla hibridizāciju vai novirzīšanu) un plāno kārtiņu optiskajām īpašībām.

IRIDIUM IONS VALENCE STATE IN ZINC-IRIDIUM OXIDE THIN FILMS

Halil Arslan, Vera Skvorcova, Martins Zubkins, Roberts Kalendarevs, Juris Purans
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

In spite of transparent conductive oxides (TCO) have an appreciable space in the current/future science and technology, there has been a limitation in the fabrication of transparent electronics since it is difficult to obtain *p*-type TCO. In order to close this gap in *p*-type TCOs, ZnM_2O_4 (*M*: Rh, Co, Ir) with spinel structure can be shown as an appropriate candidate. In this study we present the results of the absorption and the XANES spectra investigation of zinc-iridium oxide thin films with different Ir concentration (7, 16.1, 29.4, 53.5, 67.4 at.%) which is deposited by reactive DC magnetron co-sputtering (substrates = glass, Ti, Si, and polyimide tape). The iridium ions (*5d* transition metal ions) are known to be present in different valences in many compounds. A very complex situation can occur where a certain ion in more than one valence state is present and in addition these ions occupy both tetrahedral and octahedral sites (Ligand field). The valence and site occupation of these ions is essentially determined by the growth conditions. The Zn K-edge (9659ev) and Ir L_3 -edge (11215ev) XAS measurements were done at the SOLEIL synchrotron bending-magnet beamline Samba. The results of XAS reveal changing the Ir concentration in the film causes the diversity in the valence state in other words the oxidation state (3+, 4+, 5+) of the Ir ions. On the other hand it was found that the absorption spectra of zinc-iridium oxide thin films contain a broad band within the visible region and in near infrared region. The transmittance of the thin film decreases as the Ir concentration is increased (Metallic shift). That indicates the direct relation between the valence state shift (hybridization or shifting of *d* orbital) and the optical properties of the thin film.

LUMINESCENCES PROCESI $\text{Ba}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}:\text{Er}^{3+}$ UN TO ATKARĪBA NO TEMPERATŪRAS UN Er^{3+} KONCENTRĀCIJAS

Elīna Pavlovska, Jurgis Grūbe, Guna Krieķe
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Luminiscences procesu pētīšana dažādos materiālos aizvien ir aktuāla, ļaujot izprast dažādu materiālu spektroskopiskās īpašības un to praktisko pielietojumu. Šajā darbā tiek apskatīts $\text{Ba}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}:\text{Er}^{3+}$ spektroskopiskās īpašības un to atkarības no temperatūras (8-300K) un aktivatoru jonu, Er^{3+} , koncentrācijas (1 un 10mol%). Līdz šim šis materiāls zinātniskajā literatūrā ir maz apskatīts.

Sintezētajiem pulverveida paraugiem tika izmērīti luminiscences un augšup-pārveidotās luminiscences spektri dažādās temperatūrās, ierosinot ar starojumu redzamajā un infrasarkanajā diapazonā. Vietas jūtīgā spektroskopija ļauj noteikt, ka Er^{3+} atrodas dažādās pozīcijās $\text{Ba}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}$ kristāliskajā struktūrā. Mainoties parauga temperatūrai, tiek novērota izmaiņas luminiscences joslu platumā un intensitātē. Dominējošajām Er^{3+} luminiscences joslām tiek uzņemtas luminiscences dzišanas kinētikas un to atkarība no parauga temperatūras.

Balstoties uz iegūtajiem eksperimentālajiem datiem, darbā tiks spriests par luminiscences procesiem $\text{Ba}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}:\text{Er}^{3+}$ un kā tos ietekmē materiāla temperatūra un Er^{3+} koncentrācija.

LUMINESCENCE OF $\text{Ba}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}:\text{Er}^{3+}$ AND ITS DEPENDENCE ON TEMPERATURE AND Er^{3+} CONCENTRATION

Elina Pavlovska, Jurgis Grube, Guna Krieke
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Study of luminescence processes in various materials are still of great importance allowing to understand spectroscopic properties and its practical applications. In this work spectroscopic properties of $\text{Ba}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}:\text{Er}^{3+}$, its dependence from temperature (8-300K) and activator ion Er^{3+} concentration (1 and 10mol%) were measured. This material is yet little described in scientific literature.

Luminescence and up-conversion luminescence spectra of powder samples excited in visible and infrared spectral region were measured in various temperatures. Site sensitive spectroscopy reveals different Er^{3+} arrangements in crystalline structure. Temperature dependence of phonon induced luminescence bands broadening and changes in intensity were observed. Furthermore, luminescence decay kinetics of the dominant Er^{3+} spectral bands and its dependence from temperature were measured.

Based on acquired experimental data, the impact of Er^{3+} concentration and temperature on the luminescence process in the $\text{Ba}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}:\text{Er}^{3+}$ will be discussed in this work.

BISMUTU SATUROŠU GAISMAS AVOTU GĀZES TEMPERATŪRAS UN EMISIJAS SPEKTRU ANALĪZE

Annija Frīdmane¹, Madara Ziņģe¹, Zanda Gavere^{1,2}

¹*Latvijas Universitātes Atomfizikas un spektroskopijas institūts*

²*Latvijas Lauksaimniecības Universitātes Informācijas Tehnoloģiju fakultāte*

Absorbcijas spektroskopijā viens no svarīgākajiem elementiem ir gaismas avots. Ir pierādīts, ka šādiem mērījumiem vispiemērotākās ir augstas frekvences bezelektrodu lampas (HFEDLs), jo tās emitē šauru, augstas intensitātes līnijaspektru.

Šī darba mērķis ir izpētīt spektra īpašības un gāzes temperatūru atkarībā no ierosmes ģeneratora sprieguma bismuta saturošām augstas frekvences bezelektrodu lampām.

Pētāmā plazma – bismuta saturoši gaismas avoti ar nedaudz atšķirīgiem pildījumiem: (1) BiI₃+Ar un (2) Bi+SbI₃+Ar. Emisijas spektrs satur gan atoma spektrālīnijas, gan arī molekulu, kā OH un BiI, spektrālīnijas. Lai aprēķinātu temperatūru tika izmantota OH rotācijas josla pie 306nm. Kaut arī gaismas avotu temperatūra apmēram ir vienāda (800-1000K), spektrālīniju intensitāšu uzvedība manāmi atšķiras, piemēram, Bi novēroto spektrālīniju intensitāte ir augstāka lampā, kurā ir pievienots Sb.

GAS TEMPERATURE AND EMISSION SPECTRA ANALYSIS OF BISMUTH CONTAINING LIGHT SOURCES

Annija Fridmane¹, Madara Zinge¹, Zanda Gavere^{1,2}

¹*Institute of Atomic Physics and Spectroscopy, University of Latvia*

²*Faculty of Information Technologies, Latvia University of Agriculture*

In absorption spectroscopy one of the most important elements is light source. High-frequency electrodeless light sources (HFEDLs) are proven to be very convenient for such measurements since they emit narrow line spectra of high intensity.

The aim of this work is to study the changes of spectral characteristics and gas temperature of bismuth containing HFEDLs in dependence on excitation generator voltage.

Plasma under study was Bi-containing light sources with slightly different fillings: (1) BiI₃+Ar and (2) Bi+SbI₃+Ar. Emission spectra contain not only spectral lines of atomic species, but molecular bands as well, for instance OH and BiI. Rotational band of OH at 306 nm was used to estimate the gas temperature. Although the gas temperature range for both light sources is practically the same (800-1000 K), the behavior of spectral line intensities is significantly different, for instance, the intensities of Bi atomic lines for HFEDL filled with admixture of Sb are much higher.

AR MANGĀNU AKTIVĒTA TRIKALCIJA FOSFĀTA LUMINISCENCES UN ELEKTRONU PARAMAGNĒTISKĀS REZONANSES PĒTĪJUMI

Andris Antuzevičs¹, Uldis Rogulis¹, Anatolijs I. Popovs¹, Aleksej Zarkov², Lauryna Sinusaite², Aivaras Kareiva²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Institute of Chemistry, Vilnius University*

Trikalcija fosfāts (TCP) ir plaši izmantots materiāls tādās medicīnas nozarēs kā, piemēram, zobārstniecībā, ķirurģijā un ortopēdijā. Šajā pētījumā kā optiskas un paramagnētiskas zondes tiek izmantoti mangāna joni, lai raksturotu dažādo TCP fāžu struktūru un fotoluminiscences īpašības.

Kalcija hidroksiapatīta (CHAp), β -TCP un α -TCP paraugi ar Mn koncentrācijām 0,2-1,0 mol% tika sintezēti ar nogulsnešanas metodi. CHAp, β -TCP un α -TCP fāzes tika iegūtas, karsējot izžāvētās nogulsnes attiecīgi 600, 1000 un 1250 °C. Kristālisko struktūru noteikšanai izmantota rentgenstaru difrakcijas (XRD) analīze.

Šajā referātā tiks apspriesti fotoluminiscences un elektronu paramagnētiskās rezonanses (EPR) spektru rezultāti.

LUMINESCENCE AND ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE INVESTIGATION OF MANGANESE DOPED TRICALCIUM PHOSPHATE

Andris Antuzevičs¹, Uldis Rogulis¹, Anatoli I. Popov¹, Aleksej Zarkov², Lauryna Sinusaite², Aivaras Kareiva²

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

²*Institute of Chemistry, Vilnius University*

Tricalcium phosphate (TCP) is a widely used material in clinical applications such as dentistry, surgery and orthopedics. In our investigation we have used manganese ions as optical and paramagnetic probes to study the structure and photoluminescence properties of various phases of TCP.

Mn-doped calcium hydroxyapatite (CHAp), β -TCP and α -TCP with Mn concentrations from 0.2 to 1.0 mol% were synthesized by the wet precipitation method. CHAp, β -TCP and α -TCP were obtained by annealing the dried precipitates at 600, 1000 and 1250 °C, respectively. Phase analysis and crystal structure determination was performed by X-ray diffraction (XRD) analysis.

The results of photoluminescence and electron paramagnetic resonance (EPR) spectra will be discussed in this report.

The State Education Development Agency of the Republic of Latvia is gratefully acknowledged for a Latvian state research scholarship to A. Z.

DAŽĀDU ĶĪMISKO METOŽU IETEKME UZ HfO₂ NANODAĻIŅU MORFOLOĢISKAJĀM ĪPAŠĪBĀM

Ivita Bite, Krišjānis Šmits
Latvijas Universitātes Cietvielu Fizikas Institūts

Zinātniskajā literatūrā ir pieejama plaša informācija par dažādām ķīmisko sintēžu metodēm HfO₂ nanodaļiņu iegūšanai, kuru morfoloģiskās īpašības ir analizētas vienas ķīmiskās sintēzes ietvaros. Savukārt, nav atrodama informācija par pētījumiem, kuros apskatīta dažādu ķīmisko sintēžu metožu ietekme uz HfO₂ nanodaļiņu morfoloģiskajām īpašībām.

Darba gaitā sintezēti neaktivēti HfO₂ nanodaļiņu paraugi, izmantojot dažādas ķīmisko sintēžu metodes: pašaizdegšanās, izgulsnēšanas, sola-gela, hidrotermālā un kausēto sāļu metodi.

Iegūto paraugu morfoloģisko īpašību raksturošanai tika izmantotas divas dažādas metodes: pulvera rentgendifraktometrija (XRD) un transmisijas elektronu mikroskopija (TEM). XRD difraktogrammās ir redzams, ka visos gadījumos iegūto neaktivēto HfO₂ nanodaļiņu paraugu kristāliskās struktūras ir monoklīnas. Tomēr, TEM rezultāti uzrāda, ka dažos HfO₂ paraugos, monoklīnajai fāzei, ir arī amorfās fāzes piejaukumi, kā arī XRD un TEM rezultāti uzrāda savstarpēji atšķirīgus graudu izmērus iegūtajiem paraugiem.

Apkopojot sākotnējos rezultātus, tika veikti secinājumi par izvēlēto ķīmisko sintēžu metožu ietekmi uz neaktivētiem HfO₂ nanodaļiņu paraugu morfoloģiskajām īpašībām.

THE EFFECT OF VARIOUS CHEMICAL SYNTHESIS METHODS ON THE MORPHOLOGICAL PROPERTIES OF HfO₂ NANOPARTICLES

Ivita Bite, Krisjanis Smits
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

A broad range of information about chemical synthesis methods of HfO₂ nanoparticles is available in the scientific literature, but there is no information available about studies in such field as the influence of chemical synthesis methods on the morphological properties of HfO₂ nanoparticles.

In this study, the samples of non-doped HfO₂ nanoparticles were synthesized according to different chemical synthesis methods: auto-igniting combustion synthesis, precipitation, sol-gel, hydrothermal and molten salt method.

The morphological properties of the obtained samples were characterized by two different methods: powder X-ray diffractometry (XRD) and transmission electron microscopy (TEM). The XRD pattern shows that crystalline structures are monoclinic in all cases of the obtained non-doped HfO₂ nanoparticles. However, TEM results indicate that in some HfO₂ samples monoclinic crystallites are mixed with amorphous phases, as well as XRD and TEM results shows different grain sizes.

The influence on the morphological properties of non-doped HfO₂ nanoparticles by using various chemical synthesis methods is further discussed.

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2017/11 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is gratefully acknowledged.

ZnFe₂O₄/TiO₂ KOMPOZĪTU MIKROVIĻŅU SINTĒZE UN FOTOKATALITĪSKĀ AKTIVITĀTE

Pāvēls Rodionovs, Jānis Grabis, Aija Krūmiņa
Rīgas Tehniskās universitātes Neorganiskās ķīmijas institūts

TiO₂ ir plaši pazīstams fotokatalizators ar augstu efektivitāti. Tomēr tas ir aktīvs tikai UV starojumā. Lai uzlabotu TiO₂ fotokatalītiskās īpašības redzamas gaismas starojuma spektrā, to var modificēt ar citu pusvadītāju.

Šajā darbā pagatavoti ZnFe₂O₄/TiO₂ nanokompozīti ar ZnFe₂O₄ masas daļu 1% un 2%. ZnFe₂O₄ nanodaļiņas tika sintezētas un uzklātas uz TiO₂, izmantojot mikroviļņu sintēzi, ar mērķi uzlabot fotonu absorbciju redzamas gaismas reģionā. ZnFe₂O₄ daļiņu izmērs ir 5÷6 nm un īpatnējais virsmas laukums 51,7 m²/g. Iegūto paraugu fotokatalītiskās īpašības izpētītas, sadalot metilēnzilā ūdens šķīdumu redzamā gaismā. Iegūtie rezultāti uzrāda, ka modificējot TiO₂ ar ZnFe₂O₄ nanodaļiņām, ir iespējams būtiski uzlabot fotokatalītiskās īpašības. Augstāka fotokatalītiskā efektivitāte piemīt paraugam ar ZnFe₂O₄ masas daļu 1%.

MICROWAVE-ASSISTED HYDROTHERMAL SYNTHESIS OF ZnFe₂O₄/TiO₂ COMPOSITE AND PHOTOCATALYTIC PROPERTIES

Pavels Rodionovs, Janis Grabis, Aija Krumina
Institute of Inorganic Chemistry, Riga Technical University

TiO₂ is well recognised as photocatalyst with high performance. However it is efficient only under UV radiation. In order to enhance TiO₂ photocatalytic properties under visible light it can be modified with other semiconductor.

In this work ZnFe₂O₄/TiO₂ nanocomposites with ZnFe₂O₄ mass loading of 1% and 2% were produced. Obtained ZnFe₂O₄ nanoparticles were coupled with TiO₂ via microwave-assisted hydrothermal method in order to improve photon absorption in a range of visible light. ZnFe₂O₄ nanoparticles have size of 5÷6 nm and specific surface area up to 51,7 m²/g. Photocatalytic activity of prepared samples was investigated by degradation of methylene blue under visible light source. The results showed that doping TiO₂ with ZnFe₂O₄ nanoparticles significantly increases photocatalytic activity. The highest photocatalyst performance was observed when amount of ZnFe₂O₄ was 1%.

AR Au, Pt, Pd un Ag MODIFICĒTU TiO₂ NANOŠĶIEDRU SINTĒZE UN TO FOTOKATALĪTISKO ĪPAŠĪBU PĒTĪJUMI REDZMAJĀ GAISMĀ, LIETOJOT LED GAISMAS AVOTU

Reinis Drunka, Jānis Grabis, Dzidra Jankoviča, Aija Krūmiņa

Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultātes Neorganiskās ķīmijas institūts

Lietojot mikroviļņu sintēzes metodi 245 °C temperatūrā un 27 bar spiedienā, iegūtas TiO₂ nanošķiedras ar diametru no 10nm un īpatnējo virsmu 158.5 m²/g. TiO₂ nanošķiedras modificētas ar Au, Pt, Pd un Ag nanodaļiņām, tās uznesot uz fotokatalizatora virsmas lietojot ķīmiskās izgulsnēšanas metodi. Pēc modificēšanas fotokatalizatoru īpatnējā virsma samazinājās līdz 73.1 – 74.7 m²/g.

Fotokatalizatoru aktivitāti noteica spektrofotometriski, sadalot metilēnzilā (MB) šķīdumu redzamās gaismas ietekmē. Kā redzamās gaismas avotu lietoja augstas gaismas intensitātes LED (100 W; 10 000 lux).

TiO₂ nanošķiedras, kas modificētas ar 1% Au uzrāda augstāko fotokatalītisko aktivitāti un sadala 97.5% MB 60 minūtēs. Tikai par 1.5% sliktāku rezultātu uzrāda TiO₂ nanošķiedras, kas modificētas ar 1% Pd. Paraugi, kas modificēti ar 1% Pt un 1% Ag sadala attiecīgi 86.2% and 70.4% MB.

Modificētās TiO₂ nanošķiedras iespējams pielietot kaitīgo organisko vielu noārdīšanai un vides problēmu risināšanai, kā arī ūdeņraža iegūšanai, sadalot ūdeni gaismas un fotokatalizatora ietekmē.

PREPARATION OF Au, Pt, Pd AND Ag DOPED TiO₂ NANOFIBERS AND THEIR PHOTOCATALYTIC PROPERTIES UNDER LED VISIBLE LIGHT ILLUMINATION

Reinis Drunka, Janis Grabis, Dzidra jankovica and Aija Krumina

Institute of Inorganic Chemistry, Riga Technical University Faculty of Materials Science and Applied Chemistry

Microwave-assisted synthesis at 245 °C temperature and 27 bar pressure permitted to obtain TiO₂ nanofibers and nanowires with a diameter of 10nm and a specific surface area up to 158.5 m²/g. Nanofibers were modified with Au, Pt, Pd and Ag nanoparticles by using chemical deposition method. After modification with precious metal nanoparticles, specific surface area of photocatalysts decreased and were in range 73.1 – 74.7 m²/g.

Photocatalytic activity was determined by degradation of the methylene blue solution under visible light irradiation. High intensity LED lamp (100 W; 10 000 lux) was used as light source.

TiO₂ nanofiber doped with 1% Au sample reached MB degradation degree of 97.5% in 60 minutes. Only about 1.5% lower photocatalytic activity demonstrated TiO₂ sample doped with 1% Pd. When doped with 1% Pt and 1% Ag TiO₂ nanofiber samples reached degradation rate of MB 86.2% and 70.4%.

Doped TiO₂ nanofibers were appropriate for degradation of harmful organic compounds as well as for hydrogen production by water splitting.

ENERĢIJAS LĪMEŅU NOTEIKŠANA PURĪNU SATUROŠIEM ORGANISKIEM SAVIENOJUMIEM ZILAJĀM ORGANISKAJĀM GAISMAS DIODĒM

Raitis Grzibovskis¹, Aivars Vembris¹, Armands Sebris², Zigfrīds Kapilinskis², Māris Turks²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un Lietišķās Ķīmijas fakultāte*

Organiskās gaismu emitējošās diodes (OGED) jau tiek pielietotas mobilo telefonu un TV ekrānos. Līdz šim pieejamās diodes tiek veidotas izmantojot dārgo termisko iztvaicēšanu vakuumā. OGED ražošanas izmaksas varētu samazināt, izmantojot slapjās metodes, piemēram, rotējošā diska metodi.

Šajā darbā mēs esam pētījuši vairākus zilo gaismu emitējošus purīna atvasinājumus, kurus varētu pielietot OGED veidošanā. Šo savienojumu priekšrocība ir to spēja veidot amorfas kārtiņas no šķīdumiem. Visi paraugi tika veidoti ar rotējošā diska metodi no hloroforma šķīduma, par pamatni izmantojot ar ITO pārklātu stiklu. Savienojumu jonizācijas enerģija tika noteikta izmantojot fotoemisijas kvantu iznākuma metodi. Enerģijas sprauga starp jonizācijas enerģiju un elektronu afinitāti tika noteikta no fotovadāmības mērījumiem. Elektronu afinitāte tika aprēķināta kā starpība starp jonizācijas enerģiju un fotovadāmības sliekšņa vērtību.

Prezentācijā tiks apspriestas enerģijas līmeņu vērtību izmaiņas atkarībā no elektronu akceptorās grupas novietojuma molekulā, no pievienotās aizvietotājgrupas, kā arī no telpiskās grupas izmēra.

ENERGY LEVEL DETERMINATION OF PURINE CONTAINING ORGANIC COMPOUNDS FOR BLUE ORGANIC LIGHT EMITTING DIODES

Raitis Grzibovskis¹, Aivars Vembris¹, Armands Sebris², Zigfrīds Kapilinskis², Maris Turks²

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

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

The organic light emitting diodes (OLED) have found their applications in mobile and TV screens. Till now commercially available diodes are made by expensive thermal evaporation in a vacuum. The costs of OLED fabrication could be decreased by applying low-cost wet casting methods, for example, spin-coating.

In this work, we have studied a group of blue light emitting purine derivatives which could potentially be used in OLEDs. The advantage of these compounds is their ability to form amorphous thin films from solutions. All the thin films were prepared by the spin-coating method from chloroform solution on ITO glass. Ionization energy was determined using photoelectron yield spectroscopy. The gap between ionization energy and electron affinity was determined using photoconductivity measurements. Electron affinity then was calculated as a difference between ionization energy and photoconductivity threshold value.

The energy level value changes depending on the position of electron acceptor group, the type of the attached substitute group, and the size of the bulky group will be discussed.

PEROVSKĪTA $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ SAULES ELEMENTS AR UZLABOTIEM LĀDIŅU TRANSPORTA SLĀŅIEM

Anastasija Ivanova¹, Kristina Lebedeva¹, Andrey Tokmakov², Modris Roze³, Igors Kaulačs¹

¹*Fizikālās Enerģētikas institūts*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

³*Rīgas Tehniskā universitāte*

Pētīta lādiņu transporta slāņu dopēšanas un modificēšanas ietekme uz perovskīta bāzes saules elementa ITO/PEDOT:PSS/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ /PCBM/ C_{60} /Ag galvenajiem fotoelektriskajiem parametriem.

Perovskīta slānis tika uzneests uz caurumu transporta slāņa PEDOT:PSS, izmantojot divpakāpju interdifūzijas metodi [1] no $\text{PbI}_2+\text{PbCl}_2$ šķīduma DMF+DMSO šķīdinātāju maisījumā, un to tālāk pārvēršot perovskītā ar $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$ šķīdumu izopropilspirtā. PEDOT:PSS slānim tika piejaukts 5% DMSO, lai uzlabotu tā vadāmību, kā arī tas tika vēl tālāk uzlabots, aizvietojot ar V_2O_5 /PEDOT:PSS dubultslāni, lai palielinātu elektronu bloķēšanas iespējas. Arī elektronu transporta slānis no šķīstošā fullerēna PCBM tika uzlabots, to dopējot ar DMOAP [1], lai palielinātu slāņa vadāmību, kontaktu ar perovskītu un mitruma necaurlaidību. Kā šūnas augšējo elektrodu izmantojām vakuumā uzsublimētu 100 nm biezu Ag slāni.

Visi fotoelektriskie parametri tika pētīti 10^{-6} mbar vakuumā *in situ*, neizņemot paraugu no vakuumkameras pēc elektroda uzsublimēšanas.

PEROVSKITE $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ SOLAR CELL WITH IMPROVED CHARGE TRANSPORT LAYERS

Anastasija Ivanova¹, Kristina Lebedeva¹, Andrey Tokmakov², Modris Roze³, Igors Kaulačs¹

¹*Institute of Physical Energetics*

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

³*Riga Technical University*

The influence of charge transport layer doping and modification on perovskite base solar cell ITO/PEDOT:PSS/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ /PCBM/ C_{60} /Ag main electric parameters has been investigated.

Perovskite layer was deposited on hole transport layer PEDOT:PSS using two step interdiffusion method [1] from $\text{PbI}_2+\text{PbCl}_2$ (with molar ration 3,4) solution in mixture of DMF and DMSO and converted into perovskite by $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$ solution in IPA.

The PEDOT:PSS layer was doped by 5 wt% DMSO to increase its conductivity and further it was improved by replacing it by V_2O_5 /PEDOT:PSS double layer to increase electron blocking. Also electron transport layer PCBM was improved by doping it with DMOAP [1] to increase its conductivity, contact with perovskite and moisture impenetrability. As top electrode 100 nm thick Ag layer was deposited by thermal evaporation in vacuum 10^{-6} mbar, where all photoelectric measurements were made *in situ*.

1. A.Ivanova, A.Tokmakov, K.Lebedeva, M.Roze, I.Kaulačs, *Latv. J. Phys. Tech. Sci.* **2017**, 54(4), 58-68

The financial support of IMIS2 and “LATENERGI” projects is greatly acknowledged.

ROTĀCIJAS PĀRKLĀŠANAS METODES ĀTRUMA IETEKME UZ KVANTU PRETESTĪBAS ĶĪMISKĀ SENSORA ĪPAŠĪBĀM

Santa Stepīna, Gita Šakale, Māris Knite
Rīgas Tehniskās universitātes Tehniskās fizikas institūts

Kvantu pretestības ķīmiskais sensors ir kompozītmateriāls, kas sastāv no polimēra matricas un elektrovadošām nanodaļiņām. Šādam kompozītmateriālam izmainās elektriskā pretestība, ja tas tiek ievietots tvaiku atmosfērā, šī pretestības izmaiņa notiek pateicoties kvantu tunelēšanās efektam starp nanodaļiņām. Kā matricas materiāls šajā darbā tiek izmantots etilēna vinilacetāta kopolimērs (EVA; Sigma Aldrich) ar vinilacetāta (VA) saturu 40%, bet kā elektrovadošā pildviela grafitizētas oglekļa nanodaļiņas (CB; PRINTEX XE-2) ar vidējo primārās daļiņas izmēru 30nm. Daļiņu īpatnējā virsma: 950m²/g un DBP (dibutilfatlāta) absorbcija: 380ml/100g. Iepriekšējos pētījumos noskaidrots, ka uzklāšanas metode un izmantotie substrāta/elektroda materiāli ietekmē kvantu pretestības ķīmiskā sensora reaģētspēju (sensorefektu), detektējot dažādus gaistošo organisko vielu tvaikus. Šajā darbā tiks apskatīts kā rotācijas ātrums (paraugu izgatavošanas procesā, kur izmanto uzklāšanu ar rotācijas palīdzību) ietekmē gaistošo organisko vielu tvaiku sensorefektu un kāds ir optimālais ātrums, lai iegūtu vislielāko pretestības izmaiņu.

SPIN COATING ROTATION SPEED INFLUENCE ON QUANTUM CHEMO-RESISTIVE SENSOR PROPERTIES

Santa Stepīna, Gita Sakale, Māris Knite
Institute of Technical Physics, Riga Technical University

Quantum chemo-resistive sensor is composite that contains polymer matrix and conductive nano fillers. Sensing mechanism is based on resistance change via quantum tunnelling effect between nanoparticles when sensor is exposed to volatile organic compound vapours. As matrix material in this work is used ethylene vinyl acetate copolymer (EVA; Sigma Aldrich) with vinyl acetate (VA) content 40% and electro conductive filler was chosen carbon nanoparticles (CB; PRINTEX XE-2) with average size 30nm. Specific surface area of particles was 950 m²/g and DBP (dibutyl phthalate) adsorption was 380 ml per 100 g.

In previous researches it was concluded that application method, used substrate and electrode materials influenced the quantum chemo-resistive sensor sensing effect when various volatile organic compound vapours were detected. In this work is going to be researched how spin coating rotation speed influence quantum chemo-resistive sensor sensing effect in various volatile organic compound vapours as well as what is optimal rotation speed for highest electrical resistance change.

This work was supported by National research programme IMIS2.

ELEKTRISKĀ LAUKA INDUCĒTA KAPACITĀTES IZMAIŅA MĒRŠŪNAI, KAS PILDĪTA AR SILIKONA EĻĻAS/OGLEKĻA KVĒPU SUSPENSIJU

Kaspars Ozols, Sabīne Sčegoļeva, Māris Knite

Rīgas Tehniskā universitāte, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, Tehniskās fizikas institūts

Iepriekš veikto mūsu pētījumu rezultāti rāda, ka līdzstrāvas (DC) elektriskā lauka pielikšana silikona eļļas/oglekļa kvēpu (SO/CB) suspensijai izraisa suspensijas elektriskās vadītspējas palielināšanos par vairāk nekā sešām kārtām. Sākotnējie eksperimenti tika modificēti tā, lai varētu pētīt elektriskā lauka ietekmi uz SO/CB suspensijas kapacitātvajām īpašībām. Šajos eksperimentos tika noskaidrots, ka DC elektriskā lauka pieslēgšana mēršūnai, kas pildīta ar suspensiju, kas satur 0.2 wt% CB, palielina mēršūnas kapacitāti līdz trim kārtām. Ievērojami mazāks kapacitātes izmaiņas lielums, salīdzinot ar vadāmības izmaiņas lielumu, kas tika novērots pie tās pašas elektriskā lauka intensitātes, var tikt skaidrots ar lineārāku ("lēnāku") kapacitātes pieauguma sakarību starp tām CB daļiņām, kuras tuvojas elektriskā lauka ietekmē.

Paredzams, ka iegūtie rezultāti tiks izmantoti polimēru/nanodaļiņu kompozītu ar anizotropām īpašībām modelēšanā un izstrādē.

CAPACITANCE CHANGE OF SILICONE OIL/CARBON BLACK SUSPENSION FILLED MEASUREMENT CELL INDUCED BY ELECTRIC FIELD

Kaspars Ozols, Sabine Scegoļeva, Maris Knite

*Institute of Technical Physics, Faculty of Materials science and Applied Chemistry, Riga
Technical University*

Results of our previous studies show that application of direct current (DC) electric field to silicone oil/carbon black (SO/CB) suspension leads to electrical conductance increase of the suspension by over six orders of magnitude. The initial experiments were modified to study capacitive properties of the DC field processed SO/CB suspension. It was found that application of the DC electric field to a measurement cell, filled with the suspension containing 0.2 wt% of the CB, increases the capacitance of the cell by up to three orders of magnitude. Significantly smaller capacitance change rate comparing to the conductance change rate, which was observed at the same electric field strength, can be explained by more linear ("slower") capacitance increase relation among approaching particles.

The obtained results are intended for use in modelling and elaboration of polymer/nanoparticle composites with anisotropic properties.

This research was supported by the Latvian National Research Program in Materials Science, IMIS².

OGLEKĻA KVĒPU UN ETILĒNA-OKTĒNA KOPOLIMĒRA KOMPOZĪTMATERIĀLS KĀ PAŠREGULĒJOŠAIS SILDELEMENTS

Astrīda Bērziņa¹, Velta Tupureina², Māris Knite¹

¹*Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultātes Tehniskās fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultātes Polimērmateriālu institūts*

Pašregulējošie sildelementu materiāli ir noderīgi jomās, kurās temperatūru regulējošās elektronikas izmantošana ir grūti realizējama. Šajā darbā aplūkotas oglekļa kvēpu (CB) un etilēna oktēna kopolimēra (EOK) kompozīta elektro-termiskās īpašības, lai pielietotu materiālu kā pašregulējošu sildelementu.

Izgatavoti un pētīti EOK-CB kompozīta paraugi ar 10 – 30 masas daļām CB uz 100 masas daļām EOK. Paraugiem tika veikti elektriskās pretestības mērījumi atkarībā no temperatūras, kā arī temperatūras mērījumi atkarībā no pieliktā strāvas stipruma un sprieguma.

Kompozītmateriālam novērots pozitīvais temperatūras pretestības koeficients, kas izpaužas eksponenciālā pretestības kāpumā, palielinot temperatūru. Paraugu līdzsvara punkta temperatūra variējama atkarībā no kompozīta pildījuma pakāpes un pievadītās jaudas.

CARBON BLACK AND ETHYLENE-OCTENE COPOLYMER COMPOSITE AS SELF-REGULATING HEATING MATERIAL

Astrida Berzina¹, Velta Tupureina², Maris Knite¹

¹*Institute of Technical Physics, Faculty of Materials Science and Applied Chemistry, Riga Technical University*

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

Self-regulating heating materials are a type of smart materials, which are useful for applications where temperature controlling electronics are difficult to implement. In this work, the electro-thermal properties of carbon black (CB) and ethylene-octene copolymer (EOC) composites are investigated for use as self-regulating heating material.

EOC-CB composites with different mass parts of CB ranging from 10 to 30 phr were investigated. The sample electrical resistance was measured as a function from temperature and the sample temperature was measured as a function from strength of electric current and voltage.

The composite material exhibits positive temperature coefficient of resistivity, which means that the electrical resistance increases exponentially with the increase of temperature. The equilibrium temperature of composite samples is tunable with filler content and power supplied.

The financial support of Latvian National Research Program IMIS² and RTU Doctoral Research Scholarship is greatly acknowledged.

DAUDZSLĀŅU ONC SAKĀRTOŠANĀS PVAc POLIMĒRĀ LĪDZSTRĀVAS ELEKTRISKĀ LAUKA IETEMĒ

Linards Lapčinskis, Santa Stepiņa, Artis Linarts, Māris Knite
Rīgas Tehniskās universitātes Tehniskās fizikas institūts

Ir zināms, ka iedarbojoties ar pietiekami spēcīgu elektrisko lauku uz elektrovadošām oglekļa nanodaļiņām ir iespējams panākt to sakārtošanos pa elektriskā lauka līnijām. Šajā darbā ir apskatīta daudzslāņu oglekļa nanocaurulīšu (DONC) sakārtošanās spēja polivinilacetāta (PVAc) polimēra šķīdumā acetona, kā arī pievienojot šī polimēra šķīdumam dažādus polietilēnglikola (PEG) daudzumus: 2 wt%, 5 wt%, 10 wt% un 20 wt%. DONC kustība un sakārtošanās polimēru šķīdumos tiek panākta ar līdzsprieguma elektrisko lauku un šīs sakārtošanās laikā tiek paralēli veikti parauga elektriskās pretestības mērījumi. Pretestības izmaiņa sakārtošanās laikā ļauj secināt par paraugā notiekošajiem procesiem – DONC sakārtošanos, šķīdinātāja iztvaikošanu un disperģēto DONC tieksmi aglomerēties.

Iegūtajiem paraugiem ir noteikts vadītspējas anizotropijas koeficients $A = R_{\parallel}/R_{\perp}$, kur R_{\parallel} ir elektriskās pretestības vērtības paralēli un R_{\perp} ir vērtības perpendikulāri sakārtošanās procesā izmantotā elektriskā lauka virzienam. Ir novērojamas atšķirības A vērtībā atkarībā no mērījuma vietas iegūtajā paraugā. Maksimālā izmērītā koeficienta A vērtība ir 1.1×10^3 .

MULTIWALLED CNT ALIGNMENT UNDER DC ELECTRICAL FIELD IN PVAc POLYMER

Linards Lapčinskis, Santa Stepiņa, Artis Linarts, Māris Knite
Institute of Technical Physics, Riga Technical University

It is known that by applying sufficiently high electrical field it is possible to achieve movement and alignment of carbon nanoparticles in direction of applied electrical field.

Alignment of multiwalled carbon nanotubes (MWCNT) in polyvinylacetate (PVAc) solution in acetone and as well as with addition of different amounts – 2 wt%, 5wt%, 10 wt% and 20 wt% of polyethylene glycol (PEG) has been addressed in this work. Movement and alignment of MWCNT in polymer solutions is achieved using DC electrical field and electrical resistance measurements of the sample are conducted simultaneously as alignment takes place. Change of resistance during the alignment allows to make conclusions about processes taking place in the sample – alignment of MWCNT, evaporation of solvent and tendency of dispersed MWCNT to create agglomerations.

Anisotropy coefficient $A = R_{\parallel}/R_{\perp}$, where R_{\parallel} is the electrical resistance parallel and R_{\perp} is the resistance value perpendicular to direction of electrical field used in alignment process, have been estimated for prepared samples. Discrepancies in A value can be observed depending on the place of measurement in prepared sample. Maximal measured value of A coefficient is 1.1×10^3 .

The financial support of project “National Research program IMIS2” is greatly acknowledged.

SUPERKONDENSATORIEM PIEMĒROTU PVA HIDROGĒLA ELEKTROLĪTU IZSTRĀDE

Linards Lapčinskis¹, Imants Cīrulis¹, Pēteris Lesničenoks², Māris Knite¹

¹*Rīgas Tehniskās universitātes Tehniskās fizikas institūts*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Superkondensatori ir ierīces enerģijas uzkrāšanai. Tie spēj izlādēties daudz straujāk kā akumulatori, nodrošinot lielāku jaudu, tomēr superkondensatoros uzkrātais enerģija ir mazāka. Pēdējā laikā popularitāti ir iemantojuši superkondensatori, kuros šķidrā elektrolīta vietā tiek izmantoti polimēru elektrolīti, jo šāda veida superkondensatoriem nav nepieciešams īpašs iepakojums.

Šajā darbā hidrogēlu elektrolīti ir izgatavoti no polivinilspirta (PVS) un dažādiem jonu avotiem izmantojot “sasaldēšanas-atlaidināšanas” metodi ar mērķi palielināt uzlādes sprieguma diapazonu. Kā jonu avoti elektrolītu izgatavošanā ir izmantota koncentrēta H_3PO_4 , 1M Na_2SO_4 un 1M $BaCl_2$. Izgatavoto hidrogēlu elektroķīmiskās īpašības ir noteiktas izmantojot ciklisko voltampēriometriju (CV), hronopotenciometriju un elektroķīmisko impedances spektroskopiju (EIS).

CV iegūtie rezultāti liecina, ka visplašākais darba sprieguma apgabals piemīt hidrogēla elektrolītam PVS/ Na_2SO_4 ; tas ir no -2.0 V līdz +2.0 V. Analizējot EIS iegūtos datus ir noteikta hidrogēla elektrolītu jonu vadāmība un lādiņa pārnese pretestībā. Izveidoto paraugu mehāniskās īpašības ir novērtētas tos testējot spiedes režīmā.

DESIGN OF PVA HYDROGEL ELECTROLYTES SUITABLE FOR SUPERCAPACITORS

Linards Lapčinskis¹, Imants Cīrulis¹, Pēteris Lesničenoks², Māris Knite¹

¹*Institute of Technical Physics, Riga Technical University*

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

Supercapacitors are devices for energy storage. They are capable to discharge much faster than batteries providing greater power, however the amount of energy stored in supercapacitors is smaller. Recently supercapacitors using polymer electrolytes instead of liquid electrolytes have gained popularity because this type of supercapacitors doesn't require special packaging.

To increase charging voltage of electrolyte the “freeze-thaw” method has been used in this work to prepare hydrogel electrolytes consisting of poly(vinyl alcohol) (PVA) and various ion sources. Concentrated H_3PO_4 , 1M Na_2SO_4 and 1M $BaCl_2$ are used as ion sources in preparation of electrolytes. Electrochemical properties of prepared hydrogels are determined using cyclic voltammetry (CV), chronopotentiometry and electrochemical impedance spectroscopy (EIS).

Results obtained from CV show that the widest operational voltage window has hydrogel electrolyte PVA/ Na_2SO_4 ; it's from -2.0 V to +2.0 V. Ion conductivity and charge transfer resistance of hydrogel electrolyte has been determined by analysing data obtained from EIS. Mechanical properties of prepared samples are evaluated by compression testing.

The financial support of ERAF project 1.1.1.1/16/A/013 is greatly acknowledged.

REDUCĒTA GRAFĒNA – NITROCELULOZES KĀRTIŅU IZVEIDE, IZMANTOJOT ŠĶĪDINĀTĀJA IZTVAIKOŠANAS METODI

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

Viens no reducēta dažu-slāņu grafēna (rFLG) nanodaļiņu pielietojumiem ir rFLG un polimēru kompozītmateriālu izveide. Ir novērots, ka šādiem sintezētiem kompozītiem ir uzlabotas mehāniskās kā arī elektriskās īpašības, kas ļautu tos pielietot elektroniskās ierīcēs, kuras pakļautas mehāniskām iedarbībām.

Darbā izveidota metode rFLG un nitrocelulozes (NC) kompozīta kārtiņu ieguvei, kas ietver sevī procedūras: suspensijas/tintes izveide (ar N,N-Dimetilformamīdu un acetonu); uzklāšana uz alumīnija folijas; rFLG-NC kārtiņas atdalīšana no folijas.

Izveidotajām rFLG-NC kārtiņām piemīt īpatnējā pretestība ar kārtu $\approx 1 \Omega \cdot \text{cm}$, kā arī novērots, ka veiksmīga kompozīta izveide iespējama ar rFLG:NC masu attiecību vismaz 9:1. Pētīta arī īpatnējās pretestības atkarība no NC masas daļas kompozītā, un pēc voltampēra raksturlīknēm konstatēts, ka materiāla īpatnējā kapacitāte ir tuva nullei. Kompozīta pretestības atkarībā no temperatūras novērota histerētiska uzvedība.

PREPARATION OF REDUCED GRAPHENE – NITROCELLULOSE FILM USING SOLVENT EVAPORATION DEPOSITION METHOD

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

One of the applications of reduced few-layer graphene (rFLG) nanoparticles is creation of rFLG and polymer composite materials. An improvement of mechanical and electrical properties has been reported in these composites thus showing an application of them in electronical devices which are exposed to mechanical stress.

In this work a method for synthesizing rFLG and nitrocellulose (NC) composite film has been developed. This method involves procedures: creation of suspension/ink (using N,N-Dimethylformamide and acetone); applying the ink on aluminum foil; separation of rFLG-NC film and aluminum.

Resistivity of the composite has been measured to be on the order of $\approx 1 \Omega \cdot \text{cm}$ and it has been observed that a successful synthesis of composite is possible with the mass ratio of rFLG:NC of at least 9:1. In this work resistivity dependence on NC weight percentage has also been studied and from the volt ampere characteristics it has been concluded that the self-capacitance of composite is near to zero. Furthermore, the resistance dependence on temperature has shown a hysteretic behavior.

The financial support of H2020 project CO2EXIDE project is greatly acknowledged.

NANOSTRUKTURĒTA Fe_2O_3 , TiO_2 UN REDUCĒTA GRAFĒNA OKSĪDA KOMPOZĪTS KĀ PERSPEKTĪVS ANODMATERIĀLS LITIJA JONU BATERIJĀ.

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

Izpētīti divu metālu oksīdu, Fe_2O_3 un TiO_2 , ar raksturīgiem daļiņu izmēriem attiecīgi 50 nm un 21 nm, trīs kompozītmateriālu kombinācijas ar reducētu grafēna oksīdu. Izstrādāta elektroforētiska kārtiņu iegūšanas metode un elektroforētiski iegūtas $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{rGO}$; $\text{TiO}_2/\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{rGO}$; TiO_2/rGO kārtiņas. Raksturīgais kārtiņu biezums 2-6 μm . Materiāliem veikta elektroķīmisko īpašību izpēte, iegūti gravimetriskās lādiņietilpības rezultāti, izpētītas gravimetriskās lādiņietilpības izmaiņas pēc vairākiem uzlādes izlādes cikliem. Elektroda kompozītmateriāliem veikta struktūras analīze izmantojot SEM, AFM, Ramana spektroskopiju.

Šajā darbā iegūtais kompozītmateriāls uzrādīja labākus rezultātus pielietojumam litiju jonu baterijās salīdzinot ar iepriekš sintezētajiem materiāliem, kas saturēja Fe_2O_3 daļiņas ar raksturīgo daļiņu izmēru ap 150 nm. Iegūtie rezultāti liecina, ka iegūtais materiāls potenciāli izmantojams Li^+ jonu baterijās kā elektrodmateriāls.

Pateicība

Par finansiālu atbalstu Eiropas sociālajam fondam un projektam Nr.666/2014 „Kontrolējamas porainības kompozītmateriālu sintēze un pētījumi plāno slāņu un to sistēmu iegūšanai enerģijas uzkrāšanas un pārveidošanas pielietojumiem

NANOSTRUCTURED Fe_2O_3 AND TiO_2 COMPOSITE AS PERSPECTIVE ANODE IN LITHIUM ION BATTERY

Anna Dorondo, Kaspars Kaprans, Janis Mateuss, Gunars Bajars, Janis Kleperis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Two metal oxides, $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ and rutile phase TiO_2 with a particle diameter 50 nm and 21 nm respectively, were mixed with graphene oxide. Electrophoretic thin film deposition procedure from water suspension under potentiostatic mode was performed and the following composite thin films on a stainless steel substrate were obtained: $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3/\text{rGO}$, TiO_2/rGO , $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3/\text{TiO}_2/\text{rGO}$. Subsequently reduction of graphene oxide were performed. Thickness of acquired thin films were in the range of 2-6 μm . Electrochemical properties of all samples were studied by chronopotentiometry, cyclic voltammetry and electrochemical impedance spectroscopy. Values of gravimetric capacity as well as rate capability after charge/discharge cycles were figured out. Structure and morphology investigations for each sample were performed by SEM, AFM, XRD and Raman spectroscopy.

Our synthesized composite material $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3/\text{TiO}_2/\text{rGO}$ showed excellent electrochemical properties for application as lithium-ion battery anode material compared with a $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3/\text{rGO}$ and TiO_2/rGO and as well as previously synthesized material containing $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ with a main particle diameter of about 150 nm.

Acknowledgements

Authors acknowledge the Latvian Council of Science Cooperation Project No. 666/2014 for financial support.

MAGNIJA-JONU UN NĀTRIJA-JONU AKUMULATORI

Edgars Aīšpurs², Ansis Ēcis², Pēteris Lesničenoks¹, Jānis Kleperis¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Āgenskalna Valsts Ģimnāzija*

Na-jonu (NJ) un Mg-jonu (MJ) akumulatori paliek arvien populārāki izpētei šo elementu lielas izplatības zemes garozā un pieejamības dēļ. Magnijam atšķirībā no Litija piemīt 2 lādiņi nevis viens, savukārt Nātrijam elektronegativitāte (0.93) ir mazāka nekā Litijam (0.98), kas padara akumulatoru jaudīgāku un veido iemeslu pētīšanai.

Mūsu darbā lai iegūtu jaunu anodu – ežveidīgās struktūras MnO_4 , 1.7g MnSO_4 izšķīdināja 15ml ūdenī un 2ml 95% sērskābē, pievienojot 2.72g zilos graudiņus izšķīdinātus 20ml ūdenī, beigu šķīdumu izkarsēja 110°C 6 h, tad izfiltrēja un izžāvēja, un ieguva mangāna IV oksīdu, kuru izmantoja MJ akumulatorā. Akumulators MgO_4 /elektrolīts ar membrānu/Mg salikts Swagelock tipa šūnā un testēts ar potenciostat, lai noteiktu izlādes/uzlādes parametrus akumulatoram.

MAGNESIUM-ION AND SODIUM-ION RECHARGEABLE BATTERIES

Edgars Aīspurs², Ansis Ecis², Janis Kleperis¹, Peteris Lesnicenoks¹

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

²*Agenskalna State Gymnasium*

Na-ion (NI) and Mg-ion (MI) rechargeable batteries become more popular to be improved because metal elements of these batteries are quite much in earth crust so it's available to be used in big quantity. Magnesium has 2 charges while Lithium only one. Electronegativity of sodium (0.93) is less than Lithium (0.98), so batteries powered by sodium ions should be much powerful then Lithium ones.

In our work to get a new anode - the needle-like structure of MnO_4 , the 1.7g MnSO_4 was dissolved in 15 ml of water and 2 ml of 95% sulfuric acid, adding 2.72g of potassium permanganate which was dissolved in 20 ml of water and then the final solution was heated in 110°C for 6 hours and then it was filtered out and dried. The final product was manganese IV oxide, which was used in Swagelock type MI cell as anode for electrochemical measurements and charge-discharge cycling.

The financial support of National Research Program LATENERGI is greatly acknowledged.

POLIBENZIMIDAZOLA KOMPOZĪTMATERIĀLA SPEKTRĀLIE PĒTĪJUMI UV-REDZAMAJĀ RAJONĀ

Jūlija Hodakovska¹, Baode Zhang², Staņislavs Ložkins^{1,3}, Jānis Kleperis¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Freiburgas Universitātes Fizikas institūts*

³*Rīgas Tehniskās Universitātes MLKF Polimērmateriālu institūts*

Jauno materiālu veidošana ļauj attīstīties jau esošām un atrisināt jauno tehnoloģiju pielietošanu, uzlabojot nepieciešamas īpašības un samazinot nelabvēlīgus raksturlielumus. Uz polimēriem bāzētie kompozītmateriāli ir viens no materiālu attīstības virzieniem. Polimēru priekšrocība ir to izplatība – organiskie savienojumi ir sastopami, piemēram, jebkurā no dzīvajām būtnēm un augiem – kā arī iespēja no vieniem savienojumiem izveidot citus. Tos var modificēt dažādos veidos: gan ķīmiski mainot pašu savienojumu, gan arī veidojot kompozītmateriālus no vairākiem savienojumiem materiāla izgatavošanas laikā.

Mūsu darbā tiek analizēta oglekļa nanocauruļu ietekme uz polybenzimidazolu, kas ir viens no termiski un ķīmiski stabilākiem nemodificētiem polimēriem. To galvenais trūkums ir mehāniskas īpašības – virsmas stiprība, tādēļ tiek meklētas piedevas un veidoti kompozīti. Spektrālie mērījumi UV-redzamajā daļā ļauj analizēt elektroniskos spektrus polimēram un spriest par saitēm, kas veidojas starp piemaisījumiem – oglekļa nanocaurēm un polimēra ķēdēm.

RESEARCH OF THE SPECTRAL PROPERTIES OF POLYBENZIMIDAZOLE COMPOSITE IN UV-VIS REGION

Julija Hodakovska¹, Baode Zhang², Staņislavs Ložkins^{1,3}, Janis Kleperis¹

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

²*Institute of Physics, Freiburg University*

³*Institute of Polymermaterials, Riga Technical University*

New materials play major role in introducing and developing of new technologies by improving some properties and decreasing unwanted ones. Composites based on polymers are widely studied, because polymers are easily obtained, e.g. organic compounds could be found if every living being, and there are many known methods to make them produce other organic compounds. Apart from chemical reactions, there is also a possibility to produce composites from several compounds.

In our work, we analysed carbon nanowire influence on polybenzimidazole, that is one of the best polymers from thermal and chemical point of view, but it has problems with surface strength. Sample Spectral measurements in the UV-visible region allow to analyse the electron spectra of the polymer and estimate the links formed between the additives - carbon nanotubes – and polymer chains.

Authors thanks technical assistance of Raitis Gržibovskis for solid film spectra. The financial support of Baltic-German University Liaison Office project No 2017/8 supported by the German Academic Exchange Service (DAAD) with funds from the Foreign Office of the Federal Republic Germany is greatly acknowledged.

AR SLĀPEKLI DOPĒTA OGLEKĻA MATERIĀLA IEGŪŠANA UN IZMANTOŠANA DEGVIELAS ŠŪNĀS

Ance Plavniece^{1,2}, Gaļina Dobeļe¹, Aleksandrs Volperts¹, Aivars Žūriņš¹,
Ivars Krusenbergs³

¹ *Latvijas Valsts Koksnes Ķīmijas Institūts*

² *Rīgas Tehniskā universitāte, materiālu un lietišķās ķīmijas fakultāte*

³ *Tartu universitāte, Ķīmijas Institūts*

Patlaban pieaugot enerģijas patēriņam, efektīva un lēta elektroķīmiskā enerģija kļūst aktuālu problēmu, jo īpaši kurināmo šūnu. Bez platīna grupas metālu sakābekļa reducēšanās katalizatoru izmantošana ir viens no svarīgākajiem uzdevumiem kurināmo elementu izstrādes jomā.

Nanoporainie oglekļa materiāli varētu būt izmantoti šādam mērķim, tāpēc, ka tie ir videi draudzīgi, salīdzinoši lēti, ar augstu elektroķīmisku aktivitāti un zemu elektropretēstību. Ir zināms, ka N₂ atomi oglekļa materiāla struktūrā ir heteroatomi, kas lielā mērā nosaka aktivēto oglekļa elektroķīmiskās īpašības.

Darbā izmantotas nanoporainās ogles no koksnes, celulozes un celulozes iegūšanas procesa atlikumiem. Lai iegūtu ar slāpekli dopētu oglekļa materiālu, izmantojām reakciju ar dicyāndiamīdu 700 un 800 °C temperatūrā. Iegūtā ar slāpekli dopētā oglekļa materiālu porainā struktūra, kā arī skābekļa reducēšanās spēja, tika salīdzināta atkarībā no iegūšanas apstākļiem un izejvielām. Balstoties uz rezultātiem, atbilstoši izvirzītajam mērķim, tika noteikts oglekļa materiāls, kuru var izmantot degvielu šūnās elektrodiem.

NITROGEN DOPED CARBON MATERIALS FOR FUEL CELLS

Ance Plavniece^{1,2}, Gaļina Dobeļe¹, Aleksandrs Volperts¹, Aivars Zhurinsh¹,
Ivars Krusenbergs³

¹ *Latvian State Institute of Wood Chemistry*

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

³ *Institute of Chemistry, University of Tartu*

As energy consumption increases, efficient and cheap electrochemical energy sources, such as fuel cells, are becoming more important. Implementation of oxygen reduction catalysts without application of platinum group metals are one of the most important tasks in the field of fuel cell development.

Nano porous carbon materials are environmentally friendly, relatively inexpensive, with high electrochemical activity and low electrical resistance. It is known that in carbon material structure N₂ atoms are heteroatoms form, which determine the activated carbon electrochemical properties.

In order to synthesize nitrogen doped carbons the following materials were obtained and doped with dicyandiamide at 700 and 800°: wood char, cellulose char, as well as activated carbons based on wood, cellulose, black liquid and sludge.

The synthesized N-doped carbon materials porous structures as well as their performance as electrodes were assessed taking in account preparation conditions and raw materials. The results gave an insight for the selection of the optimal N-modified activated carbon for the application as fuel cell cathode.

The study was supported by M-ERA.NET project “Wood-based Carbon Catalysts for Lowtemperature Fuel Cells (WoBaCat)” and Latvian State program VPP Nr.6 ResProd project Nr.3.

RED-OX MEDIATORA SINTĒZE UN PIRMIE EKSPERIMENTI IZDALĪTO GĀZU MASU NOTEIKŠANĀ ELEKTROLĪZES PROCESĀ.

Mārtiņš Vanags, Jānis Kleperis, Artis Volkovs, Vladimirs Ņemcevs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Šī darba galvenais mērķis un uzdevums ir izveidot elektrolīzē izdalīto produktu masas noteikšanas iekārtu, balstītu uz red-ox mediatoru. Mūsdienās red-ox mediatori tiek izmantoti ūdens elektrolīzes un fotoelektrolīzes šūnās, lai atdalītu anoda telpu no katoda telpas tādējādi atdalot skābekļa un ūdeņraža gāzes procesa laikā. Ideja par red-ox mediatora izmantošanu produktu masas noteikšanā ir unikāla un šajā darbā tiek atspoguļoti pirmie rezultāti mediatora sintēzē, šūnas būvē un vājstrāvas mērījumos.

Par mediatora materiālu tika izvēlēts NiOOH/Ni(OH)₂ elektrodu pāris. Darba gaitā sintezēti NiOOH/Ni(OH)₂ elektrodu pāri. Elektrodi analizēti ar XRD un SEM. XRD rezultāti liecina par tīra NiOOH un Ni(OH)₂ pārklājumu, kas dod iespēju to tālāk integrēt divkameru elektrolīzes šūnā, kurā anoda telpā tika ievietots NiOOH elektrods un katoda telpā Ni(OH)₂ elektrods. Abi elektrodi tika saslēgti ķēdē caur elektrometru ar mērķi nomērīt mazas strāvas.

Mazākās strāvas, kas iespējams noteikt red-ox mediatora ķēdē, un kas liecina par masas noteikšanas precizitāti, ir pikoampēru robežās. Šādas strāvas atļauj detektēt ūdens elektrolīzē gāzu izdalīšanos ar precizitāti 10^{-18} g/s.

SYNTHESIS OF RED-OX MEDIATOR AND FIRST EXPERIMENTS IN DETERMINING THE MASS OF GASES EMITTED DURING ELECTROLYSIS

Martins Vanags, Janis Kleperis, Artis Volkovs, Vladimirs Nemcevs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The main purpose and task of this work is to create device based on a red-ox mediator for electrolysis product mass-detection. Nowadays, red-ox mediators are used in water electrolysis and photoelectrolysis cells to separate the anode section from the cathode section, thereby parting the oxygen and hydrogen gas processes. The idea of using a red-ox mediator in product weight determination is unique and this paper reflects the first results in mediator synthesis, split cell design and low-current measurements.

A NiOH /Ni(OH)₂ electrode pair was selected as the mediator material. During the experimental setup NiOH /Ni(OH)₂ electrodes were synthesized. Electrodes were analyzed by XRD and SEM. The XRD results show pure NiOH and Ni(OH)₂ coating, which allows its further integration into a two-section electrolytic cell, where a NiOOH electrode will be placed in the anode section and Ni(OH)₂ electrode in the cathode section. The two electrodes will be connected in a circuit through an electrometer to measure small currents.

The lowest currents that can be detected in the red-ox mediator pair, which indicate the accuracy of the mass determination, are within the range of picoamps. Such currents allow the detection of gases in water for electrolysis with an accuracy of 10^{-18} g / s.

The authors gratefully acknowledge financial support from the Institute of Solid State Physics, University of Latvia, for the project of young researchers.

SAULEI SEKOJOŠO UN STACIONĀRO PV PANEĻU EFEKTIVITĀTE LATVIJĀ

Ieva Bebrīša¹, Mārtiņš Vanags², Jānis Kleperis²
¹Rīgas 64. vidusskola

²Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Latvijas teritorija nav perspektīva enerģijas iegūšanai no fosilajiem kurināmiem, jo valstī tie nav praktiski iegūstami. Šī iemesla dēļ liela nozīme ir enerģijas iegūšanai no atjaunojamajiem avotiem. Viens no neizmējamiem enerģijas veidiem ir saules enerģija siltuma un gaismas starojuma veidā. Latvijas sabiedrībā maz izplatīta ir ideja par saules enerģijas pielietošanas iespējām elektrības iegūšanai. Taču Latvijas teritorija vidēji gadā saņem vairāk saules enerģijas kā Vācija, un izteikti vairāk kā Dānija, Somija, Zviedrija, lai gan šīs valstis ir uzstādījušas daudz vairāk paneļus saules elektrības iegūšanai. 3-4 mēneši Latvijā ir ar īsām dienām, un sevišķi maz saulaino dienu ir novembrī un decembrī. Ja enerģijas uzkrāšanai izmanto tikai akumulatorus, tad grūti izveidot lētu un efektīvu sistēmu vasaras liekās enerģijas uzkrāšanai. Tieši Latvijas platuma grādi ir piemērotāki saules paneļu pielietojumiem kā dienvidu zemes, piemēram, Spānija, Turcija. Mūsu darbā parādīts, ka ar vienkāršiem palīglīdzekļiem iespējams izveidot mērsistēmu saules paneļu ģenerētās jaudas noteikšanai dažādos stāvokļos un gada dienās. Tas ļoti ieteicams skolām, veidojot laboratorijas darbus par saules enerģijas savākšanas iespējām un praktiskiem pielietojumiem māsasaimniecībās.

THE EFFECTIVENESS OF SOLAR TRACKING AND STATIONARY PV PANELS IN LATVIA

Ieva Bebrīša¹, Martins Vanags², Janis Kleperis²
¹Riga Secondary School No. 64

²Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The territory of Latvia is not a prospect of obtaining energy from fossil fuels because they are not practically available in the country. For this reason, energy from renewable sources is important. One of the most inexhaustible forms of energy is solar energy. The idea of the use of solar energy for obtaining electricity in Latvia is not widely known in the society. The territory of Latvia on average per year receives even more solar energy than Germany, and much more than Denmark, Finland and Sweden. 3-4 months in Latvia are with short days, and a particularly the number of sunny days is very low in November and December. If only batteries are used to store solar energy, it's hard to create a cheap and effective system for storing excessive summer energy. On the other hand, knowing that the efficiency of solar panels is less in hot days, and the higher the cold, just the Latvian latitudes are more suitable for solar panel applications than the southern terrain such as Spain, Turkey. This study shows that with simple aids, it is possible to create a measuring system for determining the generated power of solar panels in different positions and specific days of the year. It is highly recommended for schools to develop laboratory work on solar energy storage and practical applications in households.

The technical assistance of engineers from the ISSP UL Vladimirs Nemcevs and Paulis Gurdziels are greatly acknowledged.

ELEKTROHROMĀS PLĀNO KĀRTIŅU SISTĒMAS WO₃/IrO_x PĒTĪJUMI

Jānis Mencis Jun¹, Jānis Kleperis²

¹Rīgas Franču Licejs

²Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Elektrohromisms tiek definēts plāno kārtiņu sistēmai kā caurejošās gaismas intensitātes, atstarotās un absorbētās gaismas izmaiņa elektriskā lauka ietekmē, katjoniem un elektroniem iespiežoties materiālā un ekstrahējot no tā. Visvairāk zināmais elektrochromo sistēmu pielietojums ir “vedie” logi, kuriem mainās gaismas caurlaidība, pieliekot mainīgu spriegumu. Viedajos logos realizējas gan ekonomiskie, gan vides aspekti, attiecīgi siltuma enerģijas ietaupīšana un aizsardzība pret gaismas piesārņojumu. Izšķir katodiskos (WO₃, MoO₃ u.c.) un anodiskos (NiO_x, IrO_x u.c.) elektrochromos materiālus, kuri krāsojas/atkrāsojas pie pretējas polaritātes. No šādu materiālu pāriem tiek veidotas elektrochromās sistēmas.

Mūsu darbā aplūkota elektrochromā sistēma WO₃/IrO_x. Volframa trioksīda un irīdija oksīda plānās kārtiņas iegūtas ar magnetrona plazmas izlādes izputināšanu attiecīgi no volframa un irīdija metāliskiem mērķiem Ar/O₂ atmosfērā. Ar SEM, EDAX un XRD metodēm pētīta iegūto kārtiņu morfoloģija, sastāvs un struktūra, bet ar potenciostatu trīs elektrodu šūnā – elektroķīmiskās īpašības. Pirmajai saliktajai sistēmai mērīta gaismas caurlaidība atkarībā no pieliktā sprieguma vērtības.

RESEARCH OF THIN FILM ELECTROCHROMIC SYSTEM WO₃/IrO_x

Janis Mencis Jun¹, Janis Kleperis²

¹Riga French Lycée

²Institute of Solid State Physics, University of Latvia

An electrochromics is defined as optical modulation of light transmittance, reflectance and absorbance in thin film systems with electric field assisted insertion and extraction of cations and electrons. More known application is in “smart” windows which can change transmittance under different voltage appealing both in economic and environmental missions: for saving energy and/or avoiding excess lightening. It distinguishes between cathodic (WO₃, MoO₃ etc.) and anodic (NiO_x, IrO_x, etc.) electrochromic materials that colour/bleach at opposite voltage polarity. Electrochromic systems are created from pairs of both cathodic and anodic materials. Our work deals with the electrochromic thin film system WO₃/IrO_x. Thin films of tungsten trioxide and iridium oxide are obtained by magnetron plasma sputtering, respectively, from metallic tungsten and iridium targets in the atmosphere of the Ar/O₂. The morphology, composition and structure of the obtained films are been studied with SEM, EDAX and XRD methods, but the electrochemical properties are investigated with the potentiostat in three electrode cell. The light transmittance depending on the applied voltage value is measured for the first electrochromic system.

The technical assistance of researchers from the ISSP UL: Roberts Kalendarjovs, Peteris Lesnicenoks and Karlis Kundzins are greatly acknowledged.

ADSORBCIJA NO ATMOSFERAS UN SAISTĪTIE PROCESI KARBONIZĒTĀ STIKLA ŠĶIEDRAS AUDUMĀ PĒC KARSĒŠANAS

Mihails Vdovičenko, Jānis Balodis, Ēvalds Pentjušs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Pētīšanas objekts-dabiski karbonizēts NaAlSi stikla šķiedras audums ar tronas ($\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot \text{NaHCO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) kristālu čaulu uz šķiedras virsmas. Šādi pētījumi rada interesi lai saprastu čaulas veidošanos. Otra motivācija ir kristālu mazie izmēri (divās dimensijās zem $1 \mu\text{m}$) ar lielu virsmas/tilpuma attiecību, kas atvieglo pašu kristālu virsmas procesu pētīšanu. Auduma paraugi tika sildīti līdz $150\text{-}180^\circ\text{C}$ ar soli 5°C un vienu stundu ilgi. Noteikta masas atjaunošanās dažādās atmosfērās kā laika funkcija viena gada garumā. Novēroti divi tronas sabrukšanas veidi ar sākumu pie 57°C un $73,5^\circ\text{C}$. Visos gadījumos masas atjaunošanās pēc karsēšanas bija eksponenciāla un saistīta ar vismaz 15 minūtes ilgu CO_2 un H_2O fizikālo adsorbciju. Vēlāk, abu tronas sabrukšanas veidu masas atjaunošanās bija neeksponenciāla un dažāda. Izmantojot abu eksponentu laika atkarību masas adsorbcijas konstantes A_1 un A_2 un laika konstantes t_1 un t_2 (noteiktas regresijas metodi), analizēta CO_2 un H_2O adsorbcija un diskutēta tronas sagraušana atkarība no paraugu izkarsēšanas temperatūras.

ADSORPTION FROM ATMOSPHERE AND ASSOCIATED PROCESSES IN CARBONISED GLASS FABRIC AFTER HEATING

Mihails Vdovicenko, Janis Balodis, Evalds Pentjuss
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The object of study was naturally carbonized NaAlSi glass fabric having a shell of trona ($\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot \text{NaHCO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) crystals on its filaments that has an interest to understand the formation of carbonate shell. Another motivation is the small sizes (below a μm in two directions) of crystals that have increased attitude of surface to volume and facilitates the investigation of surface phenomena itself. The fabric samples were heated (up to $150\text{-}180^\circ\text{C}$ with step of 5°C during a hour) and measured its mass restoring in different atmospheres as a function of time up to about a year. There are observed the two kinds of trona decomposition with beginning at 57°C , and about $73,5^\circ\text{C}$, having different exponential mass increases caused by physical adsorption of CO_2 and H_2O during about 15 min after heating, and non exponential rules of mass adsorption for both mentioned kinds of decomposition later. In terms of parameters of exponents (adsorption intensity constants $A_1(A_2)$ and (time constants $t_1(t_2)$, determined by regression technique) analysed adsorption of $\text{CO}_2(\text{H}_2\text{O})$ and discussed the decomposition of trona in dependence of preheating temperature.

We are grateful to State program of Latvia IMIS2 for the financial support

IZKARSĒŠANAS ATMOSFĒRAS IETEKME UZ ANODISKU TiO₂ PĀRKLĀJUMU FOTOKATALĪTISKĀM ĪPAŠĪBĀM

Ainārs Knoks, Jānis Kleperis, Līga Grīnberga
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

TiO₂ ir plaši pētīts materiāls fotokatalītiskiem pielietojumiem. Neskatoties uz tā potenciālu dažādiem jau praksē esošiem pielietojumiem, joprojām plaši tiek pētītas iespējas tā izmantošanai enerģētikā. Ir zināms, ka fotokatalītiskiem pielietojumiem anatāza fāze ir aktīvāka par rutila fāzi, neskatoties uz platāku aizliegtu zonu. Sintēzes parametri tieši ietekmē iegūstamā materiāla fāzi. Ņemot vērā, ka anodiski iegūstamais TiO₂ ir amorfs, ir svarīgi izvēlēties ne tikai pareizu kristalizācijas temperatūru, bet arī atmosfēru.

Šajā darbā anodiski tika sintezēti TiO₂ un karsēti dažādās atmosfērās (gaiss, N₂, Ar/H₂), tika skatīta aizliegtās zonas platuma izmaiņa atkarībā no karsēšanas atmosfēras un korelēti ar fotoaktivitātes rādītājiem. Balstoties uz eksperimentāliem rezultātiem, tiek izdarīti secinājumi par karsēšanas atmosfēras ietekmi uz struktūru, kas pētīta ar XRD un Ramana spektroskopijas metodēm, kā arī fotokatalītiskām īpašībām.

HEAT TREATMENT INFLUENCE ON PHOTOCATALYTIC PROPERTIES OF ANODIC TITANIA

Ainars Knoks, Janis Kleperis, Liga Grinberga
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

TiO₂ is highly researched material for usage in photocatalysis. Despite its potential for a variety of applications already in practice, there are still many obstacles to the prospect of its use in the energy sector. It is well known that anatase phase is preferable compared to rutile for photocatalytic purposes. The synthesis parameters have a direct influence on TiO₂ structure and properties. Anodic titania in inorganic electrolyte is amorphous. Considering that it is crucial to find proper parameters (annealing temperature and atmosphere) to synthesize desired TiO₂ phase.

In this work anodic titania was synthesized and various atmospheres were applied (air, N₂, Ar/H₂) in crystallization procedure. Structure, morphology and photocatalytic activity was investigated with XRD, Raman spectroscopy, SEM and photo-electrochemical methods. Influence of crystallization atmosphere on structure and photocatalytic properties are discussed.

The financial support of National Research Program IMIS2 is greatly acknowledged.

KOBALTA FERĪTA IZMANTOŠAMA MĀKSLĪGĀS FOTOSINTĒZES PROCESA NODROŠINĀŠANAI.

Arvis Maiželis¹, Ainārs Knoks², Jānis Kleperis²

¹*Agenskalna Valsts ģimnāzija*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Mākslīgā fotosintēze ir ķīmisks process, kas līdzīgi kā fotosintēzes procesā, izmantojot Saules enerģiju un katalizatorus, daļa ūdeni sastāvdaļās par H₂ un O₂. Mākslīgajā fotosintēzē ir iespējams pārvērst saules enerģiju ūdeņradī, kas tiktu izmantots kā enerģijas nesējs elektroenerģijas iegūšanai. Darba gaitā tika sintezēti kobalta ferīta (CoFe₂O₄) paraugi ķīmiski un ar izsmidzināšanas pirolīzes metodi, izmantojot 0,1M dzelzs nitrātu (Fe(NO₃)₃·9H₂O) un 0,2 M kobalta nitrātu (Co(NO₃)₂·6H₂O) šķīdumus.

Paraugu struktūras noteikšanai tika izmantota rentgenstaru difrakcijas XRD un Ramana spektroskopijas metodes. Morfoloģija tika pētīta skenējošā elektronu mikroskopā un fotoaktivitātes novērtējums veikts, lietojot mērījumos noteiktās fotostrāvas. Apkopojot iegūtos mērījumu rezultātus, tika izdarīti secinājumi par kobalta ferīta iegūšanas metožu ietekmi uz strukturālajā īpašībām un fotoaktivitāti, līdz ar to par CoFe₂O₄ izmantošanas iespējām mākslīgās fotosintēzes veikšanai.

INVESTIGATION OF COBALT FERRITE AS ANODE MATERIAL FOR ARTIFICIAL PHOTOSYNTHESIS

Arvis Maiželis¹, Ainārs Knoks², Jānis Kleperis²

¹*Agenskalna State Gymnasium*

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

In the worlds of high energy demand, it is necessary to find environmentally friendly ways for energy generation. There is a process in nature, photosynthesis. In the synthetic photosynthesis water is split into H₂ and O₂ using Solar energy. Further this H₂ could be used as energy carrier to be stored and used as electricity when necessary. In this work cobalt ferrite was synthesized through methods of chemical and spray-pyrolysis using 0,1M iron nitrate (Fe(NO₃)₃·9H₂O) and 0,2 M cobalt nitrate (Co(NO₃)₂·6H₂O) solutions.

Sample structure was investigated through XRD and Raman spectroscopy, as well as morphology with SEM and photocatalytic activity though photochemical measurements. Influence of synthesis method on photocatalytic activity was investigated. Conclusions based on the experimental results are discussed in this work.

The financial support of National Research Program LATENERGI is greatly acknowledged.

KVALITĀTES KONTROLE TRITIJA AKTIVITĀTES MĒRĪJUMOS AR LSC METODI

Daina Riekstiņa¹, Jānis Rudzītis²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Latvijas Universitātes Ķīmiskās fizikas institūts*

Mērījumu rezultātu kvalitāte var ietekmēt pareizu spriedumu pieņemšanu zinātnē, ražošanā, apkārtējās vides un pārtikas drošības kontrolē. Tritija ($H-3$, $E_{\beta} = 18.6$ keV, $T_{1/2} = 12.32$ gadi) aktivitātes noteikšana ar augstu ticamības līmeni ir svarīga gan radiācijas drošības kontrolei, gan augsto tehnoloģiju attīstībai (JET kodolsintēzes reaktorā).

Darbā apskatītas kodolreakcijas, kurās rodas tritījs, tritīja koncentrācijas noteikšana ar šķidrās scintilācijas metodi (LSC), izmantojot spektrometru Packard TriCarb 2100 un scintilācijas kokteili OptiPhase “HiSafe3”, kā arī mērījumu kvalitātes nodrošināšanas jautājumi. Lai iegūtie rezultāti būtu ticami, kas svarīgi gan pašiem pētniekiem, gan iespējamiem pētījumu pasūtītājiem, ir svarīgi nodrošināt kvalitātes prasību ievērošanu atbilstoši laboratorijas kompetences standartam LVS EN ISO/EIC 17025:2005L. Galvenās standarta prasības mūsu mērījumos ietver: kalibrētu etalonu izmantošanu, iekārtu kalibrēšanu, ilgstošu iekārtu stabilitātes kontroli, rezultātu atkārtojamību, nenoteiktību novērtēšanu un piedalīšanos starptautiskos salīdzinošajos mērījumos. Piedalīšanās “IARMA Proficiency Test” salīdzinošajos mērījumos parādīja mūsu analītisko rezultātu kvalitāti un ļāva identificēt dažas potenciālās problēmas.

QUALITY CONTROL OF TRITIUM ACTIVITY MEASUREMENTS USING LSC METHOD

Daina Riekstiņa¹, Janis Rudzitis²

¹*Institute of Solid State Physics of the Latvian University*

²*Institute of Chemical Physics of the Latvian University*

Quality of measurement results is of utmost importance for making right decisions in science, industry, environment and food safety control. Tritium ($H-3$, $E_{\beta} = 18.6$ keV, $T_{1/2} = 12.32$ years) activity determination with a high confidence level is necessary both for radiation safety purposes, and for development of high technologies (in JET nuclear synthesis reactors).

Discussed topics are: nuclear reactions producing tritium, measurement of tritium activity with the liquid scintillation method (LSC) using spectrometer Packard TriCarb 2100 and scintillation cocktail OptiPhase “HiSafe3”, as well as measurement quality assurance. Confidence of obtained results is important both for researchers themselves as well as for possible customers. In order to ensure such confidence, one must implement quality assurance system requirements according to the laboratory competence standard LVS EN ISO/EIC 17025:2005L. The main standard requirements in our measurements include: use of calibrated measurement standards, calibration of measurement instruments, repeatability (stability) checks, reproducibility of results, uncertainty assessment and participation in intercomparison measurements. Participation in the “IARMA Proficiency Test” intercomparison measurements demonstrated quality of our analytical results and allowed to identify some potential problems.

TRITIJA IZDALĪŠANA PAAUGTINĀTĀ TEMPERATŪRĀ NO ITER VEIDA SIENAS DIVERTORA MATERIĀLIEM

Līga Avotina¹, Mihails Haļitovs¹, Elīna Pajuste¹, Juris Jansons¹, Bronislavs Leščinskis¹,
Gunta Ķizāne¹, JET sadarbības partneri²

¹*Latvijas Universitātes Ķīmiskās fizikas institūts*

²*EUROfusion Konsorcijs, JET, Kalamas zinātnes centrs*

Oglekļa šķiedras kompozītmateriālus (carbon fiber composite – CFC) izmanto Apvienotā Eiropas tora (Joint European Torus – JET) ITER veida sienā (ITER like wall – ILW) kā divertora materiālus un plānots izmantot stellaratoros. Lai novērtētu procesus, kas varētu notikt vakuuma zuduma gadījumā, veikta situācijas modelēšana, karsējot JET divertora materiālu līdz 1000°C.

Pētīti ILW 2010.-2012. gada kampaņas divertora augstas plūsmas sedzošā (High Flux Gap Closure – HFGC) CFC ķieģeļa paraugi. Kampaņas D-D reakcijas kopējais plazmas laiks 19 stundas. Paraugi karsēti ar argonu atšķaidīta gaisa plūsmā, 200 mL/min. Veikta termogravimetriskā (TG) un diferenciāli termiskā analīze (DTA) savienojumā ar FT-IR spektrometru. Karsēšanas produkti analizēti ar FT-IR spektrometriju un šķidrās scintilācijas metodi.

TG/DTA rezultāti norāda uz diviem galvenajiem procesiem, uz eksotermisku masas samazinājumu līdz 1,0%, ap 300°C, un endotermisku procesu virs 900°C. Karsēšanas atlikuma FT-IR spektrs ir līdzīgs JET neizmantota CFC spektram. Termiskās analīzes laikā izdalījies 1,1 kBq/g tritija ($1,5 \times 10^9$ T atomi/g), kas ir atbilst tritija daudzumam, kas noteikts iepriekš ar pilnās oksidēšanas metodi.

TRITIUM RELEASE AT ELEVATED TEMPERATURE FROM ITER LIKE WALL DIVERTOR MATERIALS

Līga Avotina¹, Mihails Halitovs¹, Elina Pajuste¹, Juris Jansons¹, Bronislavs Lescisnkis¹,
Gunta Kizane¹, JET Contributors²

¹*University of Latvia, Institute of Chemical Physics*

²*EUROfusion Consortium, JET, Culham Science Centre*

Carbon fiber composites are used in Joint European torus (JET) in ITER like wall (ILW) as divertor materials and are proposed as divertor materials in stellarators. To estimate the processes that could take place in case of loss of vacuum accident, the modelling is performed by heating the JET divertor material up to 1000° C.

In this research samples from CFC from high flux gap closure (HFGC) tile from a campaign, total plasma time 19 h, D-D plasma, is analyzed. Heating is performed in air flow diluted with Ar, 200 mL/min. Thermogravimetric (TG) analysis together with differential thermal analysis (DTA) is performed. The gaseous products analyzed with FT-IR spectrometry and liquid scintillation method.

In TG/DTA curves two main processes can be distinguished. Exothermic process with mass loss up to 1.0%, around 300°C, and endothermic mass decrease, above 900°C. The heating residue is with similar FT-IR spectrum as plasma non-exposed CFC. During the thermal analysis 1.1 kBq/g ($1,5 \times 10^9$ T atoms/g) tritium were desorbed, that corresponds to amount of tritium previously determined with a method of full oxidation.

This work was carried out within the framework of the EUROfusion Consortium and has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under grant agreement number 633053. The views and opinions expressed herein do not necessarily reflect those of the European Commission or of the ITER Organization.

IZMAIŅAS RIEPU MATERIĀLĀ PAĀTRINĀTU ELEKTRONU STAROJUMA IETEKMĒ

Anna Lankovska^{1,2}, Līga Avotiņa², Valentīna Kinerte², Larisa Baumanē^{2,3}, Gunta Ķizāne²

¹*Latvijas Universitātes Ķīmijas fakultāte*

²*Latvijas Universitātes Ķīmiskās fizikas institūts*

³*Latvijas Organiskās sintēzes institūts*

Automobiļu rūpniecība attīstās, salīdzinot 2010. un 2016. gadu saražoto automašīnu skaits gadā ir palielinājies par 17 miljoniem, palielinot arī nolietoto riepu skaitu [1,2]. Piroļīzi ir perspektīvs risinājums riepu pārstrādei un, izmantojot paātrinātu elektronu starojumu, pirolīzi varētu uzlabot. Visplašāk, tieši, ir pētīta riepu materiāla, apstarošana ar gamma starojumu. Tomēr, attīstāms virziens ir arī riepu materiāla destrukcija ar paātrinātu elektronu starojumu. Lai novērtētu elektronu starojuma ietekmi uz riepu materiālu, nepieciešams novērtēt izmaiņas tā ķīmiskajās saitēs un brīvajos radikāļos. Riepu materiāla apstarošana ar paātrinātiem elektroniem, izmantojot 5 MeV ELU-4 lineāro elektronu paātrinātāju dozās 20-1000 kGy. Nestarotie un starotie paraugi analizēti ar Furjē transformācijas infrasarkanā spektrometriju (FT-IR), pavājinātās pilnīgās atstarošanas (ATR) režīmā un elektronu paramagnētiskās rezonanses (EPR) metodi. Uzņemtajos FT-IR spektros apgabalā no 500—1700 cm⁻¹ ir atrodamas šādas ķīmiskās saites C-H; CH=CH₂; -CH=; C-C; C-S. Elektronu starojuma rezultātā mainās signālu intensitāte C-S saitei un EPR spektros reģistrēto brīvo radikāļu koncentrācija.

APPLICATION OF ELECTRON IRRADIATION FOR CHANGES OF TYRE MATERIAL

Anna Lankovska^{1,2}, Līga Avotina², Valentina Kinerte², Larisa Baumanē^{2,3}, Gunta Kizane²

¹*Faculty of Chemistry, University of Latvia*

²*Institute of Chemical Physics, University of Latvia*

³*Latvian Institute of Organic Synthesis*

The rapid growth of the automotive industry, comparing the number of produced cars in 2010 and 2016 it has grown by 17 million per year, increases also the number of tyres [1,2]. A perspective solution for waste car tyres recycling is pyrolysis and using ionizing radiation we could improve pyrolysis. The most widely studied are the tyre material irradiation with gamma radiation. However, also the development direction is the destruction of tyre materials with accelerated electrons radiation. To evaluate accelerated electrons radiation influence on tyre materials, it is necessary to analyze changes in chemical bonds and free radicals.

Tyre material irradiation with accelerated electrons in doses 20-1000 kGy using 5 MeV linear electron accelerator ELU-4. Non-irradiated and irradiated samples are analyzed by using means of Fourier transformation infrared spectrometry attenuated total reflection (FT-IR-ATR) and electron paramagnetic resonance (EPR) methods. In FT-IR spectra in the area from 500-1700 cm⁻¹ are found the following chemical bonds C-H; CH = CH₂; -CH =; C-C and C-S. Electron irradiation causes changes in the intensity of the C-S bonds as well as in EPR spectra registered free radical concentration.

References:

[1] Worldwide automobile production from 2000 to 2016 (in million vehicles)

<https://www.statista.com/statistics/262747/worldwide-automobile-production-since-2000/>

[2] Musidin A.; *Microwave Devulcanization of Ground Tyre Rubber (GTR)*, Terrassa, 2015

Acknowledgment: The work is performed in the frames of the University of Latvia financed project No. Y9-B044-ZF-N-300, "Nano, Quantum Technologies, and Innovative Materials for Economics"

RADIĀCIJAS DEFEKTU DZILUMA PROFILI AR MeV-GeV ENERĢIJAS JONIEM APSTAROTOS MgO MONOKRISTĀLOS

Rolands Grants, Ilze Manika, Roberts Zabels, Jānis Maniks
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

MgO ir perspektīvs materiāls izmantošanai augstas enerģijas ierīcēs un ar radiāciju saistītās tehnoloģijās, pateicoties tā termiskajai un radiācijas izturībai. Pētīti defektu veidošanās procesi ar MeV- GeV enerģijas U, Au, Bi, Xe and Ni joniem apstarotos MgO kristālos un apstarošanas ietekme uz mehāniskajām īpašībām. Izmantotas nanoindentešanas, dislokāciju kustīguma, dislokāciju selektīvās kodināšanas, optiskās spektroskopijas un ASM metodes. Dislokāciju kustīguma un cietības pētījumu rezultāti uz profila virsmām apliecina elektronisko ierosinājumu un elastīgo sadursmju mehānismu ieguldījumu dislokāciju u.c. defektu agregātu veidošanā un mehānisko īpašību modifikācijā. Elastīgo sadursmju mehānisms dod nozīmīgu ieguldījumu jonu trajektorijas beigu daļā un kļūst dominējošs augstu fluencu apstākļos. Pētīta jonu enerģijas un fluences ietekme un salīdzināta defektu veidošanās efektivitāte dažādiem joniem. Pielietojumu nozīmē rezultāti apliecina MgO spēju izturēt augstas apstarošanas dozas, saglabājot mikroplastiskumu indentēšanas procesā un uzrādot līdz 50% paaugstinātu cietību.

THE DEPTH BEHAVIOR OF DAMAGE IN MgO SINGLE CRYSTALS IRRADIATED WITH MeV-GeV IONS

Rolands Grants, Ilze Manika, Roberts Zabels, Janis Maniks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

MgO is a promising material for application in high-energy and nuclear technologies due to its high thermal and radiation resistance. The effect of irradiation with MeV and GeV energy ions (U, Au, Bi, Xe and Ni) on structure and mechanical properties of MgO single crystals was studied. The methods of nanoindentation, dislocation mobility, selective chemical etching of dislocations, optical absorption spectroscopy and AFM were used for damage characterization. Irradiation leads to an increase of hardness associated with formation of ion-induced dislocations and other extended defects. The depth profiles of indentation hardness and dislocation mobility confirm joint contribution of electronic excitation and elastic collision mechanisms in structural damage of MgO and in change its properties. The nuclear stopping mechanism manifests in the tail part of the ion range and becomes dominant at high-fluence irradiation. The effects of ion energy and fluence were studied and the efficiency of damage as a function of average absorbed energy for different ions was compared. The results show, that MgO survives severe irradiation, maintains microplasticity at indentation and exhibits improved hardness.

The financial support of the national project IMIS2 is greatly acknowledged.

MAGNĒTISKĀ LAUKA IETEKME UZ SiC BLANKETA MIKROSTRUKTŪRAS STABILITĀTI KARSTĀ Pb-Li PLŪSMĀ

Faina Muktepāvela¹, Eriks Platacis², Andrejs Šiško², Carlota Soto³, Jon Echeberria³,
Jose M. Esnaola³, Carmen García-Rosales³, Tereza Hernández⁴, Marta Malo⁴.

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Latvijas Universitātes Fizikas institūts*

³*Ceit-IK4 and TECNUN San Sebastiana*

⁴*CIEMAT, National Fusion Laboratory*

Magnētiskā lauka MHD efekti ievērojami palielina blanketa Eurofer tērauda koroziju Pb-Li karstā plūsmā. To galvenokārt apliecina mikrostruktūras destrukcija uz tērauda virsmas. Šobrīd tiek izstrādāta divu dzesēšanas svina-litija blanketa koncepcija, kur plūsmas kanāla ieliktņi (PKI) spēlē galveno lomu, jo tiem ir jānodrošina nepieciešamā siltuma un elektriskā izolācija. Šajā darbā tiek pētīta SiC sendviča PKI materiāla (porains SiC kodols, aptverts ar blīvu 200-400 μm CVD-SiC slāni), izmantošana. Korozijas testi nekustīgā Pb-Li pie 700 °C un plūstošā ar $v=10$ cm/s pie 550°C, ar un bez 1.8-2T magnētiskā lauka tika veikti LU FI modernizētā Pb-Li- standā. Rezultāti uzrādīja, ka atšķirībā no Eurofer tērauda, magnētiskā lauka ietekme uz CVD SiC pārklājuma mikrostruktūru (degradācija, erozija uc) netika novērota. Virsma saglabājas blīva un makro defektus nesaturoša.

Var secināt, ka porains SiC ar CVD-SiC pārklājumu nodrošina stabilu aizsardzību pret koroziju karstā Pb-Li.

MAGNETIC FIELD INFLUENCE ON SiC BLANKET MICROSTRUCTURE STABILITY IN THE HOT Pb-Li FLOW

Faina Muktepāvela¹, Erik Platacis², Andrey Šiško², Carlota Soto³, Jon Echeberria³,
Jose M. Esnaola³, Carmen García-Rosales³, Tereza Hernández⁴, Marta Malo⁴.

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

²*Institute of Physics University of Latvia*

³*Ceit-IK4 and TECNUN (University of Navarra)*

⁴*CIEMAT, National Fusion Laboratory*

The magnetic field due to MHD effects significantly increases the corrosion of Eurofer steel in the hot flow of Pb-Li eutectic. This is revealed firstly in the destruction of the steel microstructure. Now the concept of Dual Coolant Lead Lithium (DCLL) blanket is being developed, where Flow Channel Inserts (FCIs) are key elements, since should provide the thermal and electrical insulations. In this work, the use of a SiC-sandwich material for FCIs (porous SiC core covered by a dense 200-400 μm CVD-SiC layer) is studied. Corrosion tests under static Pb-Li at 700°C and under flowing at $v=10$ cm/s and 550°C, with and without a 1.8-2T magnetic field, were performed in the special lead-lithium setup at the IP University of Latvia. Results showed that, compared with Eurofer steel, no remarkable effect of a magnetic field (degradation, erosion, etc) has been observed on the CVD SiC microstructure. The surface of coating remained fully dense, free of macro defects. We can conclude that porous SiC covered with CVD SiC offers a reliable protection against corrosion in hot Pb-Li.

The financial support of Euratom programme 2014-2018, gr.No633053 is greatly acknowledged.

LIELI AR ELEKTRISKO LAUKU IZRAISĪTI PĀRVIETOJUMI (1-x)(0.8Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃-0.2BaTiO₃)-xCaTiO₃ CIETAJOS ŠĶĪDUMOS

Līga Bikse, Maija Antonova, Laura Eglīte, Ēriks Birks
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Lieli ar elektrisko lauku inducēti pārvietojumi ir konstatēti (1-x) NBT-xBT cietajos šķīdumos morfotropās fāzu robežas rajonā ($x \approx 0.06$), ar sastāva modificēšanu panākot to depolarizācijas temperatūras samazināšanos līdz istabas temperatūrai un zemāk. Tomēr morfotropās fāzu robežas izvēli šādam mērķim nevar uzskatīt par pamatotu. Šajā pētījumā kā alternatīvs sākuma sastāvs ir izvēlēts 0.8NBT-0.2BT cietais šķīdums, kuram piemīt liela tetragonalitāte pie istabas temperatūras. Iespēja samazināt depolarizācijas temperatūru tiek pētīta (1-x)(0.8Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃-0.2BaTiO₃)-xCaTiO₃ cieto šķīdumu rindā. Ir konstatēts, ka CaTiO₃ koncentrācijas palielināšana rada ievērojamu depolarizācijas temperatūras samazināšanos, savukārt ar lauku inducētā polarizācija, kas raksturo iespējamo lauka izraisīto pārvietojumu, saglabājas augsta. Sastāvam ar $x = 0.10$ pie istabas temperatūras tiek novērotas dubultās histerēzes cilpas, kas norāda uz depolarizācijas temperatūras nobīdi zem istabas temperatūras. Sastāvam ar $x=0.075$ konstatēts augsts ar lauku inducēts pārvietojums – 0.4% pie $E=50$ kV/cm, kas ir lielāks salīdzinājumā ar sastāviem morfotropās fāzes robežas rajonā.

LARGE FIELD INDUCED DISPLACEMENTS IN (1-x)(0.8Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃-0.2BaTiO₃)-xCaTiO₃ SOLID SOLUTIONS

Līga Bikse, Maija Antonova, Laura Eglite, Ēriks Birks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Large electric field induced displacements are found in (1-x)NBT-xBT solid solutions in region of morphotropic phase boundary ($x \approx 0.06$), if they are in appropriate way modified to suppress depolarisation temperature in the range of room temperature and below. Although choice of morphotropic phase boundary for such purpose does not look motivated. 0.8NBT-0.2BT composition, which inherits large tetragonality at room temperature, is chosen in this study as alternative starting composition. Possibility to reduce depolarisation temperature is studied in solid solutions (1-x)(0.8Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃-0.2BaTiO₃)-xCaTiO₃. Remarkable reducing of depolarisation temperature in result of increasing of CaTiO₃ concentration is found, while field induced polarisation, which characterise possible field induced displacement, is maintained high. Double hysteresis loops at room temperature are observed for composition with $x=0.10$, indicating shift of depolarisation temperature below room temperature. Direct measurements of field induced displacement in composition $x=0.075$ reveal high displacement value 0.4% at $E=50$ kV/cm exceeding displacements of compositions in the region of morphotropic phase boundary.

AR KOBALTU LEĢĒTAS (Ba,Pb)TiO₃ KERAMIKAS DIELEKTRISKĀS UN ELASTISKĀS ĪPAŠĪBAS

Kārlis Bormanis¹, Anna Kalvane¹, Anver Idrisovich Burkhanov², Roman Viktorovich Dikov²

¹Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

²Volgogradas Tehniskā universitāte

Leģējot perovskīta struktūras BaTiO₃ saimes keramiku ar pārejas metālu elementu joniem iespējams izmainīt šo materiālu dielektriskās un elastiskās īpašības [1]. Pētījumu mērķis ir izziņāt elastisko un dielektrisko īpašību izmaiņas Ba_{0.95}Pb_{0.05}TiO₃ cietajos šķīdumos, leģējot tos ar kobaltu.

Sintezēti cietie šķīdumi (1-x)Ba_{0.95}Pb_{0.05}TiO₃+xCo₂O₃ (x=0, 0.1, 0.3, 0.5, 1.0, 2.0 sv.%) un, pielietojot keramikas apdedzināšanas tehnoloģiju, izgatavoti paraugi. Izmērīta dielektriskā caurlaidība un zudumi atkarībā no temperatūras, mērlauka intensitātes un frekvences; veikti elastisko īpašību pētījumi; analizēta Co leģēšanas ietekme uz fizikālo parametru izmaiņām. Iegūta nelineāra longitudinālo akustisko viļņu izplatīšanās ātruma atkarība no materiāla temperatūras un Co koncentrācijas (Fig.1).

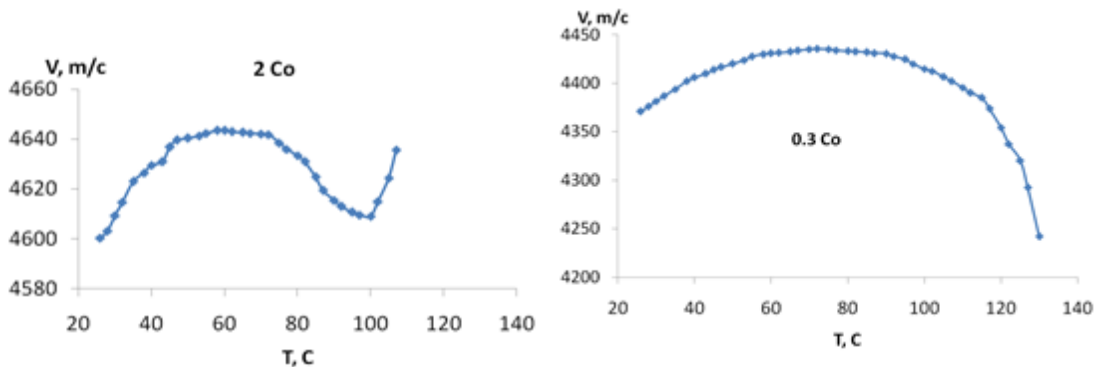


Fig.1. Longitudinālo viļņu izplatīšanās ātrums (1-x)Ba_{0.95}Pb_{0.05}TiO₃+xCo₂O₃ (x=0.3, 2.0 sv.%) keramikā atkarībā no temperatūras. Longitudinal wave velocity $v(T)$ for (1-x)Ba_{0.95}Pb_{0.05}TiO₃+xCo₂O₃ (x = 0.3 and 2.0) as a function of temperature.

DIELECTRIC RESPONSE AND ELASTIC PROPERTIES OF COBALT DOPED (Ba,Pb)TiO₃ CERAMICS

Kārlis Bormanis¹, Anna Kalvane¹, Anver Idrisovich Burkhanov², Roman Viktorovich Dikov²

¹Institute of Solid State Physics, University of Latvia

²Volgograd Technical University

It is known that the elastic and dielectric properties of the BaTiO₃—based ceramics can be influenced by doping with the transition—metal ions [1].

A study of Co—doping effect on the elastic properties and dielectric response of Ba_{0.95}Pb_{0.05}TiO₃ solid solution within the range of 300-500 K is reported.

The studied ceramic solid solution samples of (1-x)Ba_{0.95}Pb_{0.05}TiO₃+xCo₂O₃ (x=0, 0.1, 0.3, 0.5, 1.0, 2.0 wt%) was obtained from high-purity oxides by conventional solid phase 2-stage synthesis and consecutive baking under atmospheric conditions.

Modifying by admixture of Co is found to change substantially the thermal anomalies of elastic and dielectric properties and shift the ferroelectric phase transition temperature. The diverse curves of longitudinal acoustic wave velocity $v(T)$ was obtained for different Co concentrations (Fig.1).

[1] H.J. Hagemann, H. Ihring. Valence change and phase stability of 3d- doped BaTiO₃ annealed in oxygen and hydrogen. Phys. Rev. B 20, 3871–3878 (1979).

**AR 3d ELEMENTIEM DOPĒTAS PLZT 8/65/35 KERAMIKAS
POLARIZĀCIJAS UN STRUKTŪRAS IZMAIŅAS STIPROS
ELEKTRISKAJOS LAUKOS**

Lelde Lāce, Anatolijs Popovs, Māris Kundziņš,
Māris Līviņš, Maija Antonova, Vilnis Dimza
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Polarizāciju segnetoelektriskajos materiālos var raksturot ar dielektrisko caurlaidību (ϵ) vājos elektriskajos laukos, kur $E \leq 3\text{V/cm}$, vai ar polarizācijas histerēzes cilpām $P(E)$ stipros elektriskajos laukos, kur E diapazons ir 1-30 kV/cm un vairāk. iepriekšējos darbos mēs esam vairāk pētījuši ϵ temperatūras un frekvences atkarības PLZT 8/65/35(La8) sastāvos ar 3d elementu Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu (La8+3d) piedevām.

Šajā darbā tika izmantota šo pašu sastāvu keramika, lai pētītu $P(E)$ temperatūras atkarības (-60 - +150 °C), mainot: 1) E amplitūdu, 2) E periodu ((0,02 sec. (50 Hz), 15 sec., 1, 4, 16 min.)), 3) piedevu koncentrācijas: 0,01; 0,1; 0,3; 1,0 un 3,0 svara %.

Konstatēta būtiska karstās presēšanas parametru izmaiņu ietekme uz $P(E)$ uzvedību. Atrastas korelācijas starp $P(E)$ izmaiņām un iespējamām izmaiņām/nobīdēm fāzu diagrammā $x/y/z$ (kur $x=\text{La}$, $y=\text{Zr}$, $z=\text{Ti}$).

Tiek analizēta defektu un Jana-Tellera efekta loma $P(E)$ izmaiņās.

**POLARIZATION AND STRUCTURAL CHANGES IN STRONG ELECTRIC
FIELDS IN PLZT 8/65/35 CERAMIC DOPED WITH 3d ELEMENTS**

Lelde Lāce, Anatolijs I.Popov, Māris Kundziņš,
Māris Līviņš, Maija Antonova, Vilnis Dimza
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Polarization in ferroelectric materials can be characterized by dielectric permittivity (ϵ) in weak electric fields, where $E \leq 3\text{V/cm}$, or by polarization hysteresis loops $P(E)$ in strong electric fields, where the E range is 1-30 kV/cm and more. In our previous work, we have studied ϵ temperature and frequency dependences mostly of PLZT 8/65/35 (La8) with additives of Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu (La8 + 3d). here we continue the studies of ceramics with the same compositions.

The temperature dependencies of $P(E)$ were studied (-60 - +150 °C) by changing: 1) E -amplitude, 2) E -period ((0.02 sec (50 Hz), 15 secs, 1, 4, 16 min)), 3) dopant concentrations: 0.01; 0.1; 0.3; 1.0 and 3.0 weight %.

The significant influence of changes of hot-pressing parameters on $P(E)$ was found.

The correlations between $P(E)$ and the possible changes/shifts in the phase diagram $x/y/z$ (where $x = \text{La}$, $y = \text{Zr}$, $z = \text{Ti}$) are demonstrated.

The role of defects and the Jahn-Teller effect in $P(E)$ changes is analysed.

DIVDIMENSIJU WS₂ (0001) NANOLAPU FOTOKATALĪTISKO IPAŠĪBU AB INITIO APRĒĶINI

Sergejs Piskunovs¹, Dmitrijs Bočarovs¹, Mara Putnina¹, Jurijs Žukovskis¹,
Roberts Evarestovs²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Sanktpēterburgas Valsts Universitāte, Sanktpēterburga, Krievija*

Pārejas metālu dihalogēnīdi pieder pie divdimensiju (2D) slāņveida materiāliem. Šo materiālu struktūra ir līdzīga grafīta struktūrai un raksturojas ar stiprām ķīmiskajām saitēm starp atomiem slāņos un ar vāju mijiedarbību starp slāņiem. Ja slāņveida materiāla biezumu samazināt līdz vienam vai dažiem atomu slāņiem, tā elektroniskās īpašības var stipri izmainīties. Īpaša interese ir saistīta ar šo materiāla augsto katalītisko aktivitāti. Mūsu darbā tika veikti *ab initio* aprēķini WS₂ savienojuma 2H fāzei, pielietojot hibrīdu blīvuma funkcionāla teorijas formālismu (izmantojot HSE06 hamiltoniānu). Mēs konstatējām, ka WS₂ (0001) nanolapas bez defektiem un piemaisījumiem ar biezumu no 1 līdz 10 monoslāņiem ir labi piemērotas fotokatalītiskajiem pielietojumiem, jo šī materiāla aizliegta zona $\Delta\varepsilon_{\text{gap}}$ atbilst redzamās gaismas diapazonam starp sarkano un violeto ($2.7 \text{ eV} > \Delta\varepsilon_{\text{gap}} > 1.5 \text{ eV}$). Visiem WS₂ nanolapām valences zonas augšēja un vadīšanas zonas apakšēja pozīcijas (ε_{VB} and ε_{CB}) atbilst vajadzīgam oksidēšanas un reducēšanas potenciālu novietojumam ar 1,23 eV starpību, jeb $\varepsilon_{\text{VB}} < \varepsilon_{\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}} < \varepsilon_{\text{H}^+/\text{H}_2} < \varepsilon_{\text{CB}}$. Augstākā saules enerģijas pārveides efektivitāte (15-18%) parasti ir sasniedzama pie $\Delta\varepsilon_{\text{gap}} = 2,0\text{-}2,2 \text{ eV}$ (dzeltēni-zaļā redzamā spektra daļa), un atbilst 2 ML biezai (stehiometriskai) WS₂ (0001) nanolapai.

AB INITIO CALCULATIONS ON PHOTOCATALYTIC PROPERTIES OF TWO-DIMENSIONAL WS₂ (0001) NANOSHEETS

Sergei Piskunov¹, Dmitry Bocharov¹, Mara Putnina¹, Yuri Zhukovskii¹, Robert A. Evarestov²

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

²*St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia*

Two-dimensional (2D) layered materials include transition metal dichalcogenides. The structure of these materials is similar to that of graphite and characterized by strong in-plane chemical bonds and weak coupling between layers. When the thickness of layered material is reduced to single or only few atomic layers, their electronic properties are strongly affected. Of particular interest is their high catalytic activity. In our study *ab initio* calculations have been performed by us for WS₂ compound in 2H phase within the formalism of hybrid Density Functional Theory (using HSE06 Hamiltonian). We have found that WS₂ (0001) nanosheets with thickness between 1 and 10 monolayers to be remarkably suitable for photocatalytic applications in the absence of defects and dopants, since their band gaps $\Delta\varepsilon_{\text{gap}}$ correspond to the range of visible light between the red and violet region ($2.7 \text{ eV} > \Delta\varepsilon_{\text{gap}} > 1.5 \text{ eV}$). For all the WS₂ nanosheets considered, the top of the valence band and the bottom of the conduction band (ε_{VB} and ε_{CB}) are properly aligned relative to the oxidation and reduction potentials separated by 1.23 eV, respectively, *i.e.*, $\varepsilon_{\text{VB}} < \varepsilon_{\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}} < \varepsilon_{\text{H}^+/\text{H}_2} < \varepsilon_{\text{CB}}$. The highest solar energy conversion efficiency (15-18%) usually achieved for $\Delta\varepsilon_{\text{gap}} = 2.0\text{-}2.2 \text{ eV}$ (yellow-green range of visible spectrum) has been found for the 2 ML thick (stoichiometric) WS₂ (0001) nanosheet.

This study has been supported by the EC ERA.Net RUS Plus project No. 237 WATERSPLIT.

Y₂O₃ AGREGATIZĀCIJAS PĒTĪJUMI 2D DZELZS REŽĢĪ: KINĒTISKĀ MONTE KARLO MODELĒŠANA

Dāvis Zavickis, Guntars Zvejnieks
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Ar oksīdu nanodaļiņām stiprinātajiem (ODS) tēraudiem novērojamas tādas teicamas īpašības kā termālā noturība, radiācijas defektu radītās dislokāciju mobilitātes un hēlija implantācijas radīto efektu mazināšana. ODS tēraudi ir daudzsoļi materiāli ar potenciālu pielietojumu IV paaudzes kodolreaktoros un kodolsintēzes reaktoros.

Darba gaitā izveidots kinētiskais Monte Karlo modelis (KMC), kas apraksta Y₂O₃ agregatizāciju vienkāršotā 2D dzelzs režģa gadījumā sub-perkolācijas apgabalā. No KMC modelēšanas datiem iegūta fāzu diagramma, kas ļauj izdalīt trīs klasteru augšanas apgabalus, kā arī iegūts Gibbsa-Tomsona novērtējumu, kas nosaka šķīdības robežu. Iegūtās kinētikas salīdzinātas ar Lifšica-Sļozova-Vāgnera (LSW) modeli daļiņu Ostvalda agregatizācijas aprakstam. Tika noteikts, ka Y₂O₃ agregatizācija, kas atbilst eksperimentāliem novērtējumiem, notiek jaunā kinētikas režīmā pirms tiek sasniegti LSW paredzētais augšanas režīms.

YTTRIUM OXIDE AGGREGATION IN 2D IRON LATTICE: KINETIC MONTE CARLO SIMULATIONS

Davis Zavickis, Guntars Zvejnieks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

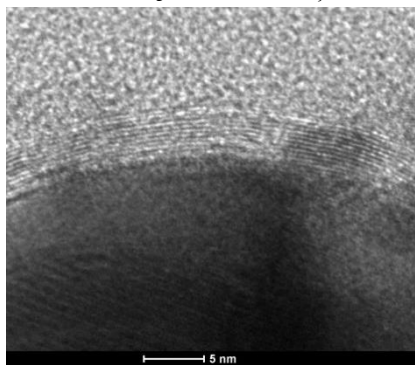
Oxide dispersion strengthened (ODS) steel alloys have shown to be one of the most promising materials for such nuclear applications as Generation IV systems and fusion reactors, due to their high thermal, irradiation creep strength and excellent swelling resistance.

In this work kinetic Monte Carlo (KMC) model is created for Y₂O₃ aggregation in simplified 2D iron lattice in sub percolation threshold region. KMC simulation data provide phase diagram which allows one to separate three cluster growth regions as well as to obtain Gibbs-Thomson solubility boundary estimate. Acquired cluster growth kinetics is compared with Lifshitz-Slyozow-Wagner (LSW) theory for particle Ostwald ripening. It was determined that Y₂O₃ aggregation which agrees with experimental data occurs in a new kinetics regime before reaching actually the LSW predicted growth limit.

HETEROGĒNO KODOLA-APVALKA NANODAĻIŅU SINTĒZE AR LĀZERA ABLĀCIJAS METODI ŠĶIDRUMĀ

Polina Čumičova, Jeļena Butikova, Boriss Poļakovs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Heterogēnās kodola-apvalka nanodaļiņas ir jauns inovatīvs un perspektīvs materiālu veids. To izmantošanas iespējas ir plašas, ieskaitot pielietojumus triboloģijā un ūdens elektrolīzē. Darbā tiek apskatīta kodola-apvalka nanodaļiņu iegūšana ar impulsa lāzera ablācijas metodi šķidrumā.



Ar Nd:YAG lāzera 2. harmonikas palīdzību tika iegūtas Mo/MoS₂, Zr/ZrS₂ un W/WS₂ kodola-apvalka nanodaļiņas. Tika iegūti daļiņu Ramana spektri. To struktūra un morfoloģija tika izpētīta ar SEM un TEM palīdzību. Tika atklāts, ka disulfīda apvalks veidojas ap metālisko kodolu tikai tad, ja nanodaļiņu diametrs ir lielāks par 100 nm. Tiek apskatītas lāzera ablācijas metodes iespējas heterogēno nanodaļiņu sintezē un pētījumu tālākas perspektīvas.

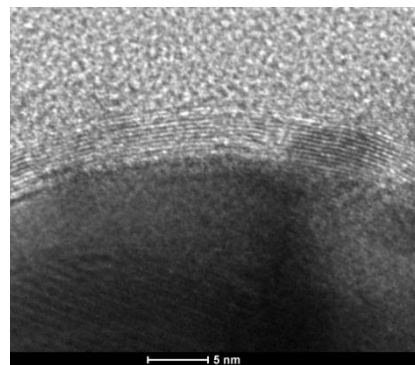
Att.1. Mo/MoS₂ kodola-apvalka nanodaļiņa ar 11 disulfīda slāņiem

SYNTHESIS OF HETEROGENEOUS CORE-SHELL NANOPARTICLES WITH LASER ABLATION METHOD IN LIQUID

Polina Čumičova, Jeļena Butikova, Boriss Poļakovs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Heterogeneous core-shell nanoparticles is a new innovative and promising material technology. The possibilities of their use are extensive, including applications in tribology and water electrolysis. In this work, the core-shell nanoparticles have been synthesised using pulsed laser ablation in liquid.

Using the 2nd harmonics of the Nd:YAG laser, Mo/MoS₂, Zr/ZrS₂ and W/WS₂ core-shell nanoparticles have been obtained. Raman spectra of the nanoparticles have been recorded. Their structure and morphology have been studied using SEM and TEM microscopy. Disulphide shell is formed around the metal core only in the case if the diameter of the nanoparticle is larger than 100 nm.



The possibilities and the further perspectives of using the laser ablation method for the synthesis of heterogeneous core-shell nanoparticles have been described.

Fig.1. Mo/MoS₂ core-shell nanoparticle with 11 disulphide layers

LED APGAISMOJUMS AR PIELĀGOJAMU KRĀSU TEMPERATŪRU, SĀKOTNĒJIE PSIHOFIZIKĀLIE DATI

Sergejs Fomins, Māris Ozoliņš
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

33. LU CFI konferencē esam prezentējuši LED gaismas avota ar maināmo krāsu temperatūru skici. Mūsu idejas pamatā ir dabīgai gaismas līdzīga LED avota izveide ar dinamisko uzvedību, pieskaņotu ģeogrāfiskam izvietojumam. Jaunajā prototipā izmantojam gaismas diodes ar platākiem spektrāliem profiliem. Pie šādas sistēmas labumiem pieskaitāms kvazinepārtraukts spektrālais aizpildījums redzamas gaismas diapazonā. Katra pamat diode šādā sistēmā sniedz lielu ieguldījumu (liels relatīvais starojuma laukums) izveidotā baltā krāsā, kas labvēlīgi palielina iespējamo korelēto krāsu temperatūru diapazonu, bez stipriem gaismas daudzuma kritumiem. Tas savukārt, atvieglo gaismas avota vadības nodrošināšanu un tā sākotnējo kalibrāciju. Eksperimentā piedalījās 5 dalībnieki ar normālu trihromatisko redzi. Uzdevums ir pieskaņot gaismas avota krāsu un intensitāti kas krīt uz a) balta parauga un b) mondrīān tipa daudzkrāsainas ainas, vairākos dienas gaismas apstākļos. Lai atvieglot eksperimentālā uzstādījuma konstantu nodrošinājumu, dabiskās gaismas spektri tika atkārtoti izmantojot filtrētu A tipa gaismas avotu (kvēlspuldze) un filtrēto ksenona gāzes gaismas avotu.

LED LIGHTING WITH ADJUSTABLE COLOR TEMPERATURE, INITIAL PSYCHO-PHYSICAL DATA

Sergejs Fomins, Māris Ozoliņš
Institute of Solid State Physics University of Latvia

At the 33rd UL ISSP conference we have presented a sketch of LED light source with dynamically adjustable color temperature. Our idea is to develop a natural like LED source with dynamic behavior, aligned with the geographic location. In the new prototype we use LEDs with wider spectral emission profiles. The benefits of such a system include the quasi-continuous spectrum in the visible light range. Each basic diode in this system brings a large contribution (high relative radiation area) to produce a white light, which increases the range of possible correlated color temperatures without any significant drop in light intensity. This, in turn, facilitates easier light source control and initial calibration. The experiment was attended by 5 participants with normal trichromatic vision. The task was to match the color and intensity of the light source illuminated on (a) a white specimen and (b) a Mondrian-type multicolored pattern under several daylight mimicking conditions. In order to facilitate the constant experimental settings, the natural light spectra were produced by a filtered F type light source (filament lamp) and a filtered xenon light source.

OPTISKĀS FĀZES NOTEIKŠANA, IZMANTOJOT GAISMAS INTENSITĀTES MĒRĪJUMUS UN BEZKONTAKTA PROFILOMETRIJU

Varis Karitāns^{1,2}, Edgars Nitišs¹, Andrejs Tokmakovs¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Latvijas Universitātes Optometrijas un Redzes zinātnes nodaļa*

Optikā pastāv fāzes problēma, proti, iegūstot attēlu, tiek zaudēta informācija par fāzi, kas līdzās intensitātei satur būtisku informāciju par objektu. Laika gaitā izmantotas dažādas metodes (hologrāfija, ptihogrāfija, dažādas skaitliskas metodes u.c.) zaudētās fāzes informācijas iegūšanai.

Mērāmie objekti izgatavoti fotorezista AZ40XT-11D slānī, izmantojot tiešā ieraksta litogrāfiju. AZ fotorezists vispirms tika atšķaidīts, izmantojot PGMEA, un pēc tam tā slānī tika izgatavotas dažādas struktūras. Pēc attīstīšanas struktūras tika izpludinātas, izmantojot termālās sašķidrināšanas metodi. Izgatavotās binārās maskas izmērs bija 324 μm x 324 μm (18 px x 18 px). Maskas izgatavota, strukturējot fotorezistu MP SPR 700 un uzklājot tam 100 nm biezu hroma slāni.

Izgatavoto objektu fāze tika mērīta, izmantojot gan gaismas intensitātes mērījumus, gan virsmas profila mērījumus. Profila mērījumi tika iegūti, izmantojot bezkontakta profilometru Zygo NewView 7000. Viļņu frontes izplatīšanās no modulatora līdz binārajai maskai simulēta, izmantojot rīku Light Pipes.

Iegūtie rezultāti liecina, ka pastāv mērena/laba korelācija starp intensitātes mērījumu un bezkontakta profilometrijas metodi.

Pētījums izstrādāts, izmantojot projektu 1.1.1.2/VIAA/1/16/199 un IMIS2 atbalstu

OPTICAL PHASE RETRIEVAL USING LIGHT INTENSITY MEASUREMENTS AND NON-CONTACT PROFILOMETRY

Varis Karitans^{1,2}, Edgars Nitiss¹, Andrejs Tokmakovs¹

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

²*Department of Optometry and Vision Science, University of Latvia*

In optics, one often encounters the phase problem that besides intensity contains an essential information about the object. Use of various methods (holography, ptychography, different numerical methods and others) for retrieval of the lost information about the phase has been reported.

The test objects were designed in a photoresist AZ40XT-11D layer using the direct write lithography. First, the photoresist was diluted with PGMEA and next various patterns were designed. After development, the structures were softened using the thermal reflow method. The size of the designed binary mask was 324 μm x 324 μm (18 px x 18 px). The mask was designed by structuring a photoresist MP SPR 700 and sputtering 100 nm chrome layer on it.

The phase of the designed objects was retrieved using both light intensity measurements and surface profile measurements. The profile measurements were acquired using a non-contact profiler Zygo NewView 7000. The wavefront propagation between the modulator and binary mask was simulated using the tool Light Pipes.

The results show that moderate/good correlation exists between the method of light intensity measurements and the non-contact profilometry.

The financial support of project 1.1.1.2/VIAA/1/16/199 and IMIS2 is greatly acknowledged.

LU CFI CAURLAIDES, PIEKĻUVES UN SIGNALIZĀCIJAS SISTĒMAS ATTĪSTĪBA

Irina Gvardina, Alberts Kristiņš, Jānis Melderis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Pašreizējai CFI caurlaides, piekļuves un signalizācijas sistēmai pamati likti 2009. gadā, kad tika apvienotas divas neatkarīgas piekļuves sistēmas - *sētas vārti + sētas durvis* un *caurlaide*. 2010. g. beigās sistēmai pievienoja gaitēju durvis sētas galā. Nākamajā gadā sistēmai pievienoja autostāvvietu. 2012. gadā Dalasas atslēgas tika nomainītas pret apdrukātām *Proxy* kartēm ar darbinieku fotogrāfijām. 2013.g. beigās sistēmai pievienoja tīrtelpas. 2014. – 2015. g. sistēmai pievienotas vēl vairākas telpas. No 2016. gada iebraukšana autostāvvietā ir iespējama gan ar *Proxy* kartēm, gan ar IS brelokiem. Aktivizējoties zinātniskajam darbam tīrtelpās, radās nepieciešamība ieviest stingrāku kontroli piekļuvei un darba laikam, kā arī papildus izveidot attālinātas administrēšanas programmu, tāpēc 2017.g. ir izstrādātas un ieviestas nepieciešamās sistēmas izmaiņas un papildinājumi. Šogad ir paredzēts papildināt sistēmu ar informatīvo tablo tīrtelpās un pievienot sistēmai kontrolējamo piekļuvi 5. stāva izremontētajām telpām.

Tādā veidā sistēma kļuva daudzfunkcionāla un ar plašām iespējām. Tā spēj nodrošināt caurlaides darbu, piekļuvi un signalizāciju telpām, vadīt barjeras, vārtus un citas ierīces, spēj nolasīt informāciju no dažāda veida rūpnieciskiem devējiem (dūmu un gāzu detektoriem, temperatūras un mitruma sensoriem, spiediena un kustību devējiem utt.)

DEVELOPMENT OF ISSP ENTRANCE CHECK-POINTS, ACCESS AND SIGNALING SYSTEM

Irina Gvardina, Alberts Kristiņš, Jānis Melderis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The basics of the current ISSP entrance check-points, access and signaling system were started in 2009 when two independent access systems were combined - *back door gateway + back door* and *entrance check-points* throughput. At the end of the 2010 the corridor doors were added to the system at the back door ends of the floors. In 2011 the parking lot was added to the system. In 2012 Dallas Keys were replaced with printed *Proxy Cards* with staff photos. At the end of the 2013 clean rooms were added to the system. In 2014 - 2015 more rooms were added to the system. From 2016 access to the parking lot is possible with both *Proxy Cards* and IR access keys. There was a need for more stringent control over access and working hours, as well as the creation of a remote administration program due to increase scientific research activities in the clean rooms, so the necessary changes and additions are implemented in 2017. It is planned to supplement the system with the information screen in the clean rooms and add controllable access to the 5th floor renovated rooms to the system in 2018.

In this way, the system became multifunctional with a wide range of options. It is capable of providing throughput, access and signaling to rooms, control of barriers, gates and other devices, it is able to read information from various types of industrial sensors (smoke and gas detectors, temperature and humidity sensors, pressure and motion sensors, etc.).

22. februāris

TEORIJA UN MODELĒŠANA

POLĀRU YAIO₃ (001) VIRSMU *AB INITIO* APRĒĶINI

Roberts Eglītis, Anatolijs .I. Popovs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Mēs prezentējam mūsu *ab initio* aprēķinu rezultātus priekš polārām YAIO₃ (001) virsmām, kuri ir iegūti izmantojot B3LYP apmaiņas-korelācijas funkcionāli kurš ir iestrādāts CRYSTAL datoru programmā. Atomu relaksāciju augšējiem trim slāņiem mēs veicām abiem iespējamajiem YO un AlO₂-šķēlumiem priekš polārām YAIO₃ (001) virsmām izmantojot (001) slāņus, kuri satur attiecīgi 22 un 23 atomus, kā arī 9 kārtas. Mēs analizējam Al-O ķīmiskās saites kovalences izmaiņu pie AlO₂-šķeltas YAIO₃ (001) virsmas attiecībā pret YAIO₃ tilpumu. Ir aprēķinātas YO un AlO₂-šķelto YAIO₃ polāro (001) virsmu enerģijas un tās ir salīdzinātas ar ABO₃ perovskītu (001) virsmu enerģijām [1-7]. Mūsu B3LYP aprēķinātās enerģētiskās zonas priekš YO un AlO₂-šķeltām YAIO₃ (001) virsmām ir salīdzinātas ar YAIO₃ tilpuma enerģētiskās zonas platumu.

AB INITIO CALCULATIONS OF POLAR YAIO₃ (001) SURFACES

Roberts Eglitis, Anatoli .I. Popov
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The results of *ab initio* calculations of polar YAIO₃ (001) surfaces by means of a hybrid B3LYP exchange-correlation functional as it is implemented in the CRYSTAL computer code are presented. Both polar YO and AlO₂-terminations of the cubic YAIO₃ (001) surface were considered. We performed relaxation of atoms on the upper three layers of both YO and AlO₂-terminated YAIO₃ (001) surfaces using slabs containing 22 and 23 atoms and 9 layers, respectively. The Al-O chemical bond covalency change near the AlO₂-terminated YAIO₃ (001) surface relative to the YAIO₃ bulk is discussed. YO and AlO₂-terminated YAIO₃ (001) polar surface energies are calculated and compared with ABO₃ perovskite (001) surface energies [1-7]. Our B3LYP calculated electronic band gaps of the YO and AlO₂-terminated YAIO₃ (001) surfaces are compared with the YAIO₃ bulk band gap.

References:

1. R.I. Eglitis and A.I. Popov, Nucl. Instr. & Meth. B 2018, submitted.
2. R.I. Eglitis and A.I. Popov, Journal of Saudi Chemical Society, 2018, accepted. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jscs.2017.05.011>
3. R.I. Eglitis, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 356004 (2007).
4. R.I. Eglitis and David Vanderbilt, Phys. Rev. B **76**, 155439 (2007).
5. R.I. Eglitis, Int. J. Mod. Phys. B **28**, 1430009 (2014).
6. R.I. Eglitis, Ferroelectrics **483**, 53-67 (2015).
7. R.I. Eglitis, Ferroelectrics **483**, 75-85 (2015).

Y-Ti-O PIEMAIŠĪJUMU MODELĒŠANA *fcc*-Fe REŽĢĪ LAI IZSKAIDROTU ODS DAĻIŅU VEIDOŠANOS

Aleksejs Gopejenko¹, Yuri F Zhukovskii¹, Yuri A Mastrikov¹, Pavel V. Vladimirov²,
Eugene A Kotomin¹, Anton Möslang²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Karlsruhe Institut für Technologie, Institut für Angewandte Materialien, Karlsruhe, Germany*

Tēraudu materiāli ar samazināto aktivācijas spēju pastiprināti ar Y_2O_3 piemaisījumiem ļauj palielināt materiāla darbības temperatūru un radiācijas noturību kas ir būtisks konstrukcijas materiāliem kurus plāno izmantot nākotnes kodolsintēzes reaktoros. Gan oksīdu daļiņu izmērs un telpiskais sadalījums būtiski ietekmē ODS tēraudu mehāniskās īpašības un radiācijas noturību. Titāna piemaisījumi (kā arī titāna dabisks piemaisījums tēraudos) Y_2O_3 pulvera nanodaļiņās pirms mehāniska sakausējuma rezultē Y_2TiO_5 un $Y_2Ti_2O_7$ nanodaļiņu veidošanā ODS tēraudos.

Tika veikti detalizēti mijiedarbību *ab initio* aprēķini starp diviem Y un vienu O atomiem, diviem Ti un vienu O atomiem, kā arī starp vienu Y, Ti un O atomiem. Saītes enerģija nebija atrasta starp defektiem, kad O atoms bija novietots O_{oct} pozīcija, savukārt saītes enerģijas tika atrastās visiem konfigurācijām, kad O piemaisījums bija novietots V_{Fe} vakanču pozīcijā.

MODELLING OF Y-Ti-O PRECIPITATE INSIDE THE *fcc*-Fe LATTICE IN SUPPORT OF ODS PARTICLE FORMATION

Aleksejs Gopejenko¹, Yuri F Zhukovskii¹, Yuri A Mastrikov¹, Pavel V Vladimirov²,
Eugene A Kotomin¹, Anton Möslang²

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

²*Karlsruhe Institut für Technologie, Institut für Angewandte Materialien, Karlsruhe, Germany*

Reduced activation ferritic-martensitic steels strengthened by Y_2O_3 precipitates allows one to increase their operation temperature and radiation resistance, which is crucial for the construction materials planned to be used in the future fusion and advanced fission reactors. Both size and spatial distribution of oxide particles significantly affect mechanical properties and radiation resistance of ODS steels. Addition of the titanium (present also as natural impurities in steels) in the particles of Y_2O_3 powder before their mechanical alloying leads to the formation of Y_2TiO_5 and $Y_2Ti_2O_7$ nanoparticles in ODS steels.

The detailed *ab initio* calculations of the interactions between two Y and single O atoms, two Ti and single O atoms as well as between single Y, Ti, and O atoms have been performed. No binding energies have been found between the defects when O atom has been positioned in O_{oct} site, while the binding energies have been assessed for all configurations when O impurity has been included in V_{Fe} vacancy position.

This work has been carried out within the framework of the EUROfusion Consortium and has received funding from the Euratom research and training programme 2014-2018 under grant agreement No 633053.

EXAFS SPEKTRU INTERPRETĀCIJA, IZMANTOJOT MOLEKULĀRO DINAMIKU NO PIRMAJĪEM PRINCIPIEM

Dmitrijs Bočarovs¹, Aleksejs Kuzmins¹, Matthias Krack²

¹Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

²Paula Šerera institūts, Šveice

Temperatūras atkarīgo rentgena absorbcijas spektru interpretācija, izmantojot molekulāro dinamiku (MD) un ņemot vērā materiālu kristalogrāfiskās struktūras anizotropiju un termisko nesakārtotību, ir sarežģīts uzdevums. Šim mērķim tika izmantota MD-EXAFS metodoloģija, kas nesen izstrādāta Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūtā [1].

Šajā darbā mēs prezentējam MD-EXAFS metodoloģijas paplašinājumu savienojumiem, kurus nevar korekti aprakstīt, izmantojot klasisko MD, proti tā saucamos molekulāras dinamikas aprēķinus no pirmajiem principiem (AIMD). Mēs esam pierādījuši MD-EXAFS pieejas efektivitāti kombinācijā ar AIMD metodi ZnO, ScF₃ un Cu₃N savienojumiem. Mūsu rezultāti liecina, ka izmantojot AIMD aprēķinus, ir iespējams kvalitatīvi aprakstīt negatīvas termiskās izplešanās efektu ScF₃ savienojumā, kas ir saistīts ar ScF₆ oktaedru rotācijas kustību. Tiek apspriestas šīs pieejas priekšrocības un ierobežojumi.

Pētījums ir finansiāli atbalstīts Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūta Studentu un jauno zinātnieku projekta Nr. SJZ/2016/9 ietvaros.

INTERPRETATION OF EXAFS SPECTRA USING FIRST PRINCIPLES MOLECULAR DYNAMICS

Dmitry Bocharov¹, Alexei Kuzmin¹, Matthias Krack²

¹Institute of Solid State Physics, University of Latvia

²Paul Scherrer Institute, Switzerland

Interpretation of the temperature-dependent X-ray absorption spectra of bulk materials using molecular dynamics (MD), taking into account anisotropy of the crystallographic structure and thermal disorder is a challenging task. For this purpose the MD-EXAFS methodology, as recently developed at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia (ISSP UL) [1] has been used.

In this work we present the extension of MD-EXAFS methodology for compounds which cannot be properly described using *ab initio* MD (AIMD) calculations. We have demonstrated the efficiency of the MD-EXAFS approach in combination with AIMD method for theory validation and temperature dependent structural properties description in ZnO, ScF₃ and Cu₃N. Our results suggest that AIMD calculations are able to reproduce qualitatively the negative thermal expansion effect in ScF₃, which is attributed to the tilting motion of ScF₆ octahedra. The advantages and limitations of this approach are discussed.

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2016/9 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.

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

DAUDZSIENU WS₂ NANOCAURUĻU AIZLIEGTĀS ZONAS KONFIGURĒŠANA VARIĒJOT DIAMETRU UN SIENIŅU SKAITU

Oļegs Lisovskis, Sergejs Piskunovs, Jurijs Žukovskis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Katalizatoru izstrādāšana efektīvai ūdens fotokatalītiskajai šķelšanai joprojām ir viens no galvenajiem izaicinājumiem atjaunojamās enerģijas sfērā. WS₂ nesēn bija atzīts par vienu no perspektīviem materiāliem katalizatoru izgatavošanai – pateicoties tā augstam elektronu kustīgumam, augstam aktīvo centru skaitam (augstākam, nekā ierastam fotokatalizatoru materiālam, TiO₂ tā visstabilākajā formā, anatāzs (101)), un mēreni plašai aizliegtajai zonai ar izdevīgu zonu mālu izvietojumu. Visbūtiskākais trūkums – fotokorozija - jau bija sekmīgi novērst ar dažādām metodēm, viena no kurām ir nanostruktūru izmantošana, tai skaitā nanocauruļu.

Galvenā WS₂ kā fotokatalizatora materiāla īpašība ir aizliegtās zonas regulēšanas iespēja bez nepieciešamības izmantot dopantus. Kamēr dopēšana ir viena no populāram metodēm, tā ir pēc būtības saistīta ar neregularitātēm fotokatalizatora struktūrā, kas intensificē elektronu un caurumu rekombināciju. Savukārt, WS₂ zonu malas ir izdevīgi novietotas, un to izvietojums ir atkarīgs no nanocaurules diametra un sieniņu skaita tādā veidā, ka kļūst iespējams sasniegt optimālu aizliegtas zonas konfigurāciju, vienkārši mainot divus augšminētos parametrus.

Dotajā pētījumā mēs veicām viensienas WS₂ nanocauruļu sēriju ar (n,0) un (n,n) hirālītātes indeksiem un pakāpeniski augošu diametru DFT simulēšanu, un pēc tam mēs analizējam efektu, ko rāda otrās un trešās sieniņas pievienošana.

BAND GAP TUNING FOR WS₂ MULTI-WALL NANOTUBES VIA ALTERING OF DIAMETER AND NUMBER OF WALLS

Oleg Lisovski, Sergei Piskunov, Yuri F. Zhukovskii
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Catalyst development for efficient solar water splitting is still one of the major challenges in the field of renewable energy. WS₂ has been recognized as one of prospective materials for catalyst fabrication – due to its high electron mobility, number of active sites (higher than for conventional material, TiO₂ in its most stable form of (101) anatase, and moderately wide band-gap with beneficial band-edge positions. The major drawback – suffering from photocorrosion – has already been successfully addressed via plenty of approaches, including employing of nanotubular structures.

The main feature of WS₂ as material for photocatalysts is its capability of band gap tuning without introducing dopant atoms. While doping is one of the popular approaches for band gap tuning, it inevitably implies formation of irregularities in photocatalyst structure, which intensifies processes of electron – hole recombination. In turn, WS₂ band gap edges are located beneficially and depend on NT diameter and number of walls in such a way that it is possible to achieve promising band edge positions via merely altering the two aforementioned parameters.

In this presentation, we report on band structure modeling of single wall WS₂ NT series of (n,0) and (n,n) chirality with progressively increasing diameter, and then we discuss the effect of adding the 2nd and the 3rd wall into structures.

The support of ERA.Net RUS Plus project No. 237 Watersplit is greatly acknowledged.

(Ba,Sr/Ca)TiO₃ PEROVSKĪTU CIETO ŠĶĪDUMU UN HETEROSTRUKTŪRU APRĒĶINI NO PIRMAJĪEM PRINCIPIEM ENERĢIJU RAŽOJOŠĀM IERĪCĒM

Leonid L. Rusevich, Guntars Zvejnieks, Denis Gryaznov, Eugene A. Kotomin
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Modernās metodes materiālu ražošanā ļauj veidot jaunus kompleksus materiālus ar uzlabotām segneto- un pjezo- īpašībām salīdzinājumā ar atsevišķām šo materiālu veidojošām komponentēm. Šajā darbā mēs aplūkojam (Ba,Sr/Ca)TiO₃ kompozīto perovskītu cietos šķīdumus [1] un heterostruktūras, kas ir daudzsolīši kandidāti svina saturošo materiālu aizstāšanai elektriskās/mehāniskās enerģijas konversijā. Izmantojot atomārās un elektroniskās struktūras aprēķinus no pirmajiem principiem ar lineāro atomu orbitāļu kombināciju (LCAO) un blīvuma funkcionāla teorijas (DFT) modernos, t.sk., hibridos funkcionālus (PBE0, B1WC) kā īstenoti CRYSTAL datorprogrammā, mēs aprēķinām elastiskās un pjezoelektriskās īpašības kompozītiem (Ba,Sr/Ca)TiO₃ perovskītiem ar atšķirīgiem sastāviem un telpiskiem izvietojumiem. Mēs paredzam, ka cietie šķīdumi un īpaši heterostruktūras ievērojami uzlabo BaTiO₃ tilpuma pjezoelektriskās īpašības, kas ir būtiski praktiskiem risinājumiem, īpaši enerģijas ražojošās ierīcēs.

Šis darbs īstenots ar ERA-NET HarvEnPiez projekta finansiālo atbalstu.

FIRST PRINCIPLES STUDY OF (Ba,Sr/Ca)TiO₃ PEROVSKITE SOLID SOLUTIONS AND HETEROSTRUCTURES FOR ENERGY HARVESTING APPLICATIONS

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

Recent progress in material engineering allows one to produce new complex materials with improved ferro- and piezo- properties as compared with their constituents. In this work, we considered (Ba,Sr/Ca)TiO₃ composite perovskites in the form of both solid solutions [1] and heterostructures, which are promising candidates for replacement of lead-containing materials for electrical/mechanical energy conversion. Using first principles calculations within the linear combination of atomic orbitals (LCAO) approximation and advanced hybrid functionals (PBE0, B1WC) of the density functional theory (DFT) as implemented in CRYSTAL software, we calculated the elastic and piezoelectric properties of composite (Ba,Sr/Ca)TiO₃ perovskites with different compositions and spatial arrangements. We predict that solid solutions and especially heterostructures considerably improve the piezoelectric properties of BaTiO₃ bulk, which is relevant for practical applications including energy harvesting.

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

[1] L.L. Rusevich, G. Zvejnieks, A. Erba, R. Dovesi, E.A. Kotomin, *J. Phys. Chem. A* 2017, **121**, 9409–9414.

ELEKTRONU LOKALIZĀCIJAS EFEKTI AR Tb DOPĒTAJĀ CeO₂

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

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Maksa Planka Cietvielu pētījumu institūts*

Cērija dioksīds (CeO₂) ir industriāli nozīmīgais materiāls jo tam ir raksturīga augsta jonu vadītspēja, tam piemīt augsts elektrostrikcijas koeficients un tāpēc kā tas spēj katalizēt vairākas ķīmiskās reakcijas. Eksperimentāli ir parādīts, ka defektu klātbūtne – skābekļa vakanču un lantanoīdu rindas elementu piemaisījumi – ietekmē šis un citas CeO₂ īpašības. Šajā darbā mēs analizējam skābekļa vakances (Vo) strukturālās, elektroniskās un enerģētiskās īpašības ar terbiju dopētajā CeO₂.

Mūsu darbā mēs apvienojām DFT+U aprēķinus 96-atomu superšūnā (Ce₃₁TbO_{64-δ}) ar nesenu pašizstrādātu punktveida simetrijas grupu analīzi, lai aprakstītu mijiedarbības starp Vo un apkārt esošajiem katjoniem. Šāda metodoloģija ļāva mums izskatīt visas iespējamās Vaikofa pozīcijas dotajā superšūnā, kurās var tikt ievietots cēriju aizvietojošs terbija jons, un atrast visstabilāko (enerģētiski minimālo) konfigurāciju. Tad mēs veicam aprēķinus superšūnā, kurā vienlaicīgi atradās gan Tb, gan Vo. Šajos aprēķinos tika akcentēta magnētisko stāvokļu un elektronu lokalizācijas efektu analīze ar stāvokļu blīvuma palīdzību.

ELECTRON LOCALIZATION EFFECTS IN Tb-DOPED CeO₂

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

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

²*Max Planck Institute for Solid State Research*

Cerium dioxide (CeO₂) is industrially important material because it exhibits high ionic conductivity, has high electrostriction coefficient and is able to catalyze select chemical reactions. Experimental data shows that defects, such as oxygen vacancies and doping atoms from the lanthanide series, may affect these and other properties of CeO₂. In this work we have analyzed structural, electronic and energetic properties of oxygen vacancy (Vo) in Tb-doped CeO₂.

In our work, we have combined DFT+U calculations of the 96-atom supercell (Ce₃₁TbO_{64-δ}) with the so-called site-symmetric approach, introduced by us very recently, to analyze interactions between Vo and the surrounding cations. We, thus, have explored all possible Wyckoff positions within the given supercell size for placing the Ce-substituting Tb ion with an aim to find the most stable (energetically minimal) configuration. We then proceeded with the calculation of simultaneous presence of Tb and Vo in the supercell. The emphasis was put on the analysis of magnetic configurations and electron localization effects using the density of states.

A.Č. thanks the financial support from the University of Latvia Foundation (Arnīs Riekstins's "MikroTik" donation).

KORUNDA STARPMEZGLU SKĀBEKĻA ATOMU ĪPAŠĪBU UN MOBILITĀTES APRĒĶINI NO PIRMAJĪEM PRINCIPIEM

Aleksandrs Platonenko¹, Deniss Grjaznovs¹, Jurijs Žukovskis¹, Evgenijs Kotomins^{1,2}

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Maksa Planka Cietvielu pētījumu institūts*

Radiācijas izraisītas izmaiņas strukturālās un optiskās korunda īpašībās, galvenokārt, ir saistītas ar primāriem Frenkeļa defektiem: neitrāliem un lādētiem starpmezglu atomiem O_i , kā arī skābekļa vakancēm (F-centri). Šajā darbā mēs veicam aprēķinus neitrālam un lādētam skābekļa starpmezglu atomam dažādās konfigurācijās, izmantojot “site-symmetry” pieeju. Tika noteiktas aktivācijas barjeras dažādos difūzijas virzienos un aprakstīta režģa relaksācija un tuvāko atomu mijiedarbība ar starpmezgla skābekli. Lai detalizētāk aprakstīt šos defektus, mēs arī aprēķinājām stāvokļu blīvumus un vibrācijas frekvences pamatstāvokli. Abiem defektiem enerģētiski izdevīgāka ir “hanteles”-tipa defekta veidošanās. Aprēķinātas migrācijas enerģijas ir ~ 1.1 eV neitrālam defektam un ~ 0.8 eV lādētam defektam.

Mūsu aprēķiniem mēs izmantojam blīvuma funkcionāla teoriju ar atomu orbitāļu lineāro kombināciju metodi, izmantojot korelācijas–apmaiņas hibrīdfunkcionāli B3PW, CRYSTAL14 programmas ietvaros. Abi defekti tika simulēti 120+1 atomu lielā superšūnā. Rezultāti tika salīdzināti ar literatūrā pieejamiem eksperimentāliem darbiem par defektu kinētiku.

PROPERTIES AND MOBILITY OF OXYGEN INTERSTITIALS IN CORUNDUM: *AB INITIO* STUDY

Aleksandrs Platonenko¹, Deniss Grjaznovs¹, Jurijs Žukovskis¹, Evgenijs Kotomins^{1,2}

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

²*Max Planck Institute for Solid State Research*

Radiation-induced changes in the structural and optical properties of corundum are mainly associated with primary Frenkel defects: neutral and charged interstitial oxygen atoms, as well as oxygen vacancies (F-type color centers). In this work we performed extended simulations on neutral and charged oxygen interstitials in different configurations of defective $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ bulk based on the site symmetry approach. We estimated the activation barriers along different migration paths and described the structural relaxation and interaction of O_i with the nearest atoms of regular lattice. For better understanding of these defects, we also performed a careful analysis of both calculated density of states and vibrational frequencies for the ground-state configurations. For both type of the interstitials the formation of dumbbell defects was the most energetically favorable configuration whereas the migration energy varied from ~ 1.1 eV for the neutral defect to ~ 0.8 eV for the charged one.

For our *ab initio* calculations we have used spin-polarized density functional theory within linear combination of atomic orbitals (LCAO) method with the B3PW hybrid exchange-correlation functional as implemented in CRYSTAL14 code. Both types of the interstitial defects were simulated using 120+1 atoms supercell. The main results were compared to available experimental data in the literature on defect annealing kinetics.

DAŽĀDU METOŽU PAREDZĒŠANAS KVALITĀTE INDĀN-1,3-DIONU SĒRIJAS REORGANIZĀCIJAS ENERĢIJĀM

Igors Mihailovs^{1,2}, Mārtiņš Rutkis¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Lietišķās ķīmijas institūts*

Viens no lielumiem, kas svarīgs lādiņnesēju kustīguma aprēķiniem organiskajos pusvadītājos ir reorganizācijas enerģija λ . Pretēji pārneses integrālim, tās aprēķināšana ir visai vienkārša, izmantojot S. Larsona un A. Klimkāna kanonizēto Δ SCF shēmu.[1]

Šajā darbā ir sniegts reorganizācijas enerģijas novērtējumu kvalitātes statistiskais salīdzinājums. Tika izmantota indān-1,3-diona atvasinājumu sērija un pārbaudīti dažādi aprēķinu parametri (izmantoti vienkāršie DFT hamiltoniāņi). Kā atskaites sērija tika izmantoti ar post-SCF pieejamajām metodēm iegūtie rezultāti. Salīdzinājums balstījās uz lineārās regresijas parametriem (slīpuma koeficients, atšķeltais nogrieznis, R^2 , nevis uz absolūtām vērtībām.

Hierarhisko klasteru analīze parāda, ka papildu valences un difūzās bāzes funkcijas nedod ievērojamu uizlabojumu rezultātam; difūzās funkcijas to pat pasliktina. B3LYP rezultāti daudz neatšķiras no CAM-B3LYP, un funkcionāla izvēle enerģijas aprēķiniem ir daudz svarīgāka nekā ģeometrijas aprēķiniem. Nulles punkta svārstību enerģijas iekļaušana aprēķinā rezultātu gan uzlabo.

PREDICTION QUALITY OF REORGANIZATION ENERGIES OF A SERIES OF INDAN-1,3-DIONES BY DIFFERENT METHODS

Igors Mihailovs^{1,2}, Mārtiņš Rutkis

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

²*Institute of Applied Chemistry, Riga Technical University*

One of the quantities used for mobility calculations of charge carriers in organic semiconductors is the reorganization energy λ . Contrariwise to the transfer integral, calculation of λ is quite straightforward, with the Δ SCF scheme canonized by S. Larsson and A. Klimkāns.[1]

In this work, statistical assessment of prediction quality of reorganization energy is given. A series of indane-1,3-dione derivatives was employed, and various computational parameters tested (with simple DFT Hamiltonians). For reference, post-SCF results at available precision were used. The comparison was based not on absolute values, but on parameters for linear regression (slope, intercept, R^2).

Hierarchical cluster analysis showed that the diffuse functions are not beneficial (even harmful), and extra valence functions also do not give any positive effect. B3LYP is not much different from CAM-B3LYP, but choice of functional for geometry is much less important than for energy calculations. Zero-point vibrational correction has positive effect.

Reference

[1] A. Klimkāns, S. Larsson, *Chem. Phys.* **1994**, *189(1)*, 25–31.

The financial support of ERDF project 1.1.1.1/16/A/046 is greatly acknowledged.

	Ēcis A.....	66
A		
Aišpurs E.....	66	
Annus P.....	38	
Anspoks A.....	6, 7	
Antonova M.....	5, 80, 82	
Antuzevičs A.....	26, 53	
Arslan H.....	13, 49, 50	
Augustovs P.....	16	
Auziņš K.....	44	
Avotiņa L.....	76, 77	
B		
Bajārs G.....	32, 65	
Balodis J.....	72	
Baumane L.....	34, 77	
Bebriša I.....	70	
Bērziņa A.....	61	
Bērziņa B.....	24, 25	
Bikse L.....	80	
Birks Ē.....	4, 5, 80	
Bite I.....	28, 44, 45, 46, 54	
Bočarovs D.....	83, 92	
Bormanis K.....	81	
Burkhanov A.....	81	
Butanovs E.....	11	
Butikova J.....	85	
C		
Cintiņš A.....	6, 7	
Cīrulis I.....	63	
Česnokovs A.....	95	
Čīpa J.....	34	
Čumičova P.....	85	
D		
Dikov R.....	81	
Dimanta I.....	36	
Dimants J.....	36	
Dimza V.....	82	
Dobele G.....	68	
Dorondo A.....	65	
Drunka R.....	56	
E		
Echeberria J.....	79	
Eglīte L.....	5, 80	
Eglītis R.....	90	
Elsts E.....	47	
Esnaola J.....	79	
Evarestovs R.....	83	
F		
Fomins S.....	86	
Frīdmane A.....	52	
G		
Gabrusenoks J.....	49	
García-Rosales C.....	79	
Gavere Z.....	52	
Gopejenko A.....	91	
Grabis J.....	55, 56	
Grants R.....	10, 78	
Grāveris V.....	40	
Grigorjeva L.....	43	
Grīnberga L.....	32, 37, 73	
Grjaznovs D.....	94, 95, 96	
Grūbe J.....	43, 51	
Gržibovskis R.....	57	
Gvardina I.....	88	
H		
Haļitovs M.....	76	
Hernández T.....	79	
Hodakovska J.....	37, 67	
I		
Ivanova A.....	58	
J		
Jankoviča D.....	56	
Jansone Z.....	20	
Jansons J.....	76	
Jaque D.....	46	
Jonāne I.....	6	
K		
Kalendarevs R.....	49, 50	
Kalvane A.....	81	
Kapilinskis Z.....	57	
Kaprāns K.....	65	
Kareiva A.....	53	
Karitāns V.....	87	
Kaulačs I.....	58	
Kinerte V.....	77	
Kleperis J.....	32, 33, 36, 37, 64, 65, 66, 67, 69, 70, 71, 73, 74	
Knite M.....	59, 60, 61, 62, 63	
Knoks A.....	37, 73, 74	
Kokars V.....	16, 21	

Korsaks V.....	24, 25
Kotomins J.....	91, 94, 95, 96
Krack M.....	92
Krasta T.....	10, 39
Krieķe G.....	26, 27, 46, 51
Kristiņš A.....	38, 88
Krusenberg I.....	68
Krūmiņa A.....	55, 56
Kudziņš K.....	5
Kundziņš M.....	82
Kuzmins A.....	6, 7, 10, 92
Kuzovkov V.....	47
Ķemere M.....	26, 29, 47
Ķizāne G.....	34, 77

L

Laganovska K.....	44, 45
Lankovska A.....	77
Lapčinskis L.....	62, 63
Lāce L.....	82
Lebedeva K.....	58
Lesničenoks P.....	33, 37, 63, 64, 66
Leščinskis B.....	76
Linarts A.....	62
Lisovskis O.....	93
Līviņš M.....	82
Ložkins S.....	67
Lukoševičs I.....	64
Lushchik A.....	47

M

Maiželis A.....	74
Malo M.....	79
Manika I.....	10, 78
Maniks J.....	10, 78
Mastrikovs J.....	91
Mateuss J.....	65
Melderis J.....	88
Mencis Jun J.....	71
Merkulov V.....	48
Mihailovs I.....	97
Miķelsone J.....	18, 19
Millers D.....	28, 43
Mironova –Ulmane Ņ.....	48
Möslang A.....	91
Muktepāvela F.....	79
Munoz Santiuste J.....	47

N

Nitišs E.....	87
Ņemcevs V.....	69

O

Ozoliņš M.....	20, 86
Ozols A.....	16
Ozols K.....	60

P

Pajuste E.....	76
Pavlovska E.....	51
Pentjušs Ē.....	72
Perveņeckā J.....	21
Piskunovs S.....	83, 93
Platacis E.....	79
Platonenko A.....	96
Pļavniece A.....	68
Polakovs B.....	11, 85
Popovs A.....	47, 53, 82, 90
Pudžs K.....	12
Purāns J.....	7, 49, 50
Putnina M.....	83

R

Reinfeldē M.....	18
Riekstiņa D.....	75
Rodionovs P.....	55
Rogulis U.....	29, 53
Roze M.....	58
Rudzītis J.....	75
Rusevičs L.....	94
Rutkis M.....	12, 97

S

Saharovs D.....	16
Sčegoļeva S.....	60
Sebris A.....	57
Šablonin E.....	47
Simonova Ļ.....	39
Sinusaite L.....	53
Skvorcova V.....	48, 50
Sloka B.....	36
Soto C.....	79
Sprinģis M.....	27
Sprūģis E.....	35
Stepiņa S.....	59, 62
Supe A.....	34
Šakale G.....	59
Šarakovskis A.....	27
Šiško A.....	79
Šmits K.....	28, 44, 45, 46, 54
Šternbergs A.....	4
Švarcs K.....	10

T	
Teteris J.	17, 18, 19
Tokmakovs A.	58, 87
Trinklere L.	24, 25, 34, 47, 48
Truhins A.	25, 42
Tupureina V.	61
Turks M.	57

U	
Užulis J.	12

V	
Vaivars G.	35
Vanags M.	37, 69, 70
Vasil'chenko E.	47
Vdovičenko M.	72
Vembris A.	21, 57
Vinis K.	49
Vītola V.	28

Vladimirov P.	91
Volkovs A.	69
Volperts A.	68

W	
Woodward S.	12

Z	
Zabels R.	10, 78
Zariņš A.	34
Zariņš E.	16, 21
Zarkov A.	53
Zavickis D.	84
Zhang B.	67
Ziņģe M.	52
Zolotarjovs A.	28, 43, 44, 45, 46
Zubkins M.	13, 49, 50
Zvejnieks G.	84, 94
Žukovskis J.	83, 91, 93, 96
Žūriņš A.	68

Piezīmes

Piezīmes

Piezīmes