

**Latvijas Universitātes
Cietvielu fizikas institūts**



36. zinātniskā konference

TĒZES

2020. gada 11. –13. februāris

**LU Cietvielu fizikas institūts
Rīga, 2020**

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



ABSTRACTS
of the 36th Scientific Conference

February 11– 13, 2020
Riga

LU Cietvielu fizikas institūta 36. zinātniskā konferences tēzes latviešu un angļu valodā.

Atbildīgais redaktors: Dr. phys. Anatolijs Šarakovskis.

Salikums: Līga Klēbaha.

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

Konferencē ir paredzētas 8 sekcijas:

- Optiskie materiāli I
- Optiskie materiāli I
- Organiskie materiāli I
- Organiskie materiāli II
- Fotonika un nanomateriāli
- Enerģija, materiāli enerģētikai
- Stenda referāti
- EUROfusion un teorija

Referātu tēzes sekcijās ir sakārtotas to nolasīšanas secībā.



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



11. februāris

OPTISKIE MATERIĀLI I

Vadītājs Anatolijs Šarakovskis

9:00	Andris Šternbergs	Tendences un izaicinājumi cietvielu fizikas jomā: Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūta perspektīva
9:30	Linards Skuja	Ar hlora piemaisījumiem saistītā optiskā absorbcija un fotoķīmiskās reakcijas sintētiskajā SiO ₂ stiklā
9:45	Anatolijs Truhins	Piroelektrisko kristālu enerģijas pārvešana luminoforiem
10:00	Anatolijs Truhins	α-kvarca kristāla un kvarca stikla luminiscence, ierosināta ar ArF (193 nm) un KrF (248 nm) eksimēru
10:15	Inga Jonāne	Cinka jonu ietekme uz Cu _{1-x} Zn _x MoO ₄ cieto šķīdumu struktūru un termohromajām īpašībām
10:30	Čiro Federiko Tipaldi	MgO un Mg _x Zn _{1-x} O cietā šķīduma režģa svārstību aprēķini

10:45 - 11:15 Kafija

OPTISKIE MATERIĀLI II

Vadītājs Linards Skuja

11:15	Aleksejs Kuzmins	Erbija jonu lokālā struktūra augšup-pārveidotā SrMoO ₄ :Er ³⁺ fosforā
11:30	Baiba Bērziņa	Ilgspidoša luminescence piemaisījumus saturošā AlN
11:45	Andris Antuzevičs	Rentgenstaru defekti aktivētos oksifluorīdu stiklos
12:00	Meldra Ķemere	Tb ³⁺ un Eu ³⁺ luminiscence un enerģijas pārnese SrF ₂ nanokristālitus saturošā oksifluorīdu stikla keramikā

12:15-13:15 Pārtraukums

ORGANISKIE MATERIĀLI I

Vadītājs Jānis Teteris

13:15	Andris Ozols	Koherentu staru kūļu pastiprināšana ar dinamiskām hologrammām molekulāros stiklveida azomateriālos
13:30	Normunds Ralfs Strautnieks	Lādiņnesēju transporta pētījumi P3HT plānās kārtiņās
13:45	Oskars Bitmets	Ar elektrovērpšanas metodi iegūtu PEDOT:PSS saturošu nanošķiedru raksturošana
14:00	Roberts Ziediņš	Trifenilamīna atvasinājumu molekulu ģeometrijas parametru atkarība no izvēlētās aprēķinu metodes un molekulas uzbūves
14:15	Aturs Bundulis	Trešās-kārtas nelineāri optisko efektu mērīšanas metodoloģija Z-scan metodei

14:30-15:00 Kafija

ORGANISKIE MATERIĀLI II

Vadītājs Mārtiņš Rutkis

15:00	Mārcis Lielbārdis	Organisko Lauka Efekta Tranzistoru izstrāde un pielietojums pusvadītāju lādiņnesēju kustīguma noteikšanā
15:15	Anete Bērziņa	Dopētu PMMA struktūru veidošanas metodika
15:30	Patricija Paulsone	Pastiprinātās spontānās emisijas parametru noteikšana sarkanās gaismas emitējošām krāsvielām plānās kārtiņās
15:45	Margarita Anna Zommere	Jaunu organisko TADF savienojumu optiskie pētījumi zilās gaismas emitējošām diodēm.

12. februāris

FOTONIKA UN NANOMATERIĀLI

Vadītājs Aivars Vembris

9:00	Jānis Jansons	Latvijas Universitātes Fizikas un matemātikas fakultātes sākums
9:30	Jānis Teteris	Hologrāfiskās litogrāfijas pielietošana materiālu virsmas nanostrukturēšanai
9:45	Māris Ozoliņš	Redzes parametri izkliedes klātbūtnē un lietojot individuāli pasūtītas kontaktlēcas
10:00	Jānis Sniķeris	Reversīvu nītinola nanostruktūru veidošana ar fokusēta elektronu stara palīdzību

10:15-10:45 Kafija

ENERĢIJA, MATERIĀLI ENERĢĒTIKAI

Vadītājs Alberts Kristiņš

10:45	Emīls Vīgants	No koksnes iegūts ogleklis kā elektrovadošā piedeva litija jonu bateriju katodā.
11:00	Jānis Kleperis	Vara katalizatora elektroķīmiska izsēdināšana CO ₂ reducēšanai par etilēnu
11:15	Pauls Annuss	Mišina (Teslas) spoļu īpašības

11:30-13:30 Pārtraukums

STENDA REFERĀTI

Vadītājs Anatolijs Šarakovskis

S-1	Karīna Taranda	Reaģentu un reakcijas apstākļu ietekme neaktivētu un fluora aktivētu silīcija dioksīda stikla sintēzēs
S-2	Agnese Spustaka	Nātrija fosfāta fosforiscentu stiklu īpašību salīdzināšana ar pulverveida stroncija alumīnāta īpašībām
S-3	Mareks Seņko	Neaktivētā un Ga-aktivētā ZnO nanostruktūru sintēze
S-4	Ramona Dūrena	Neaktivēta un ar Li-aktivēta ZnO ieguve un īpašību salīdzinājums
S-5	Ernests Einbergs	Ar hromu leģēta alumīnija oksīda izmantojamība dozimetrijā
S-6	Ēriks Vilunas	ZnO nanovadu izmantošana oksīdu pulveru maiņstrāvas elektroluminiscentajos elementos
S-7	Kaspars Vītols	Sudraba nanodaļiņas un retzemju jonus saturošu oksifluorīdu stikla keramikas pētījumi
S-8	Haralds Ozols	Cr ³⁺ paramagnētiskā zonde LaOCl
S-9	Regīna Burve	A new route for rare earth-doped TiO ₂ nanocrystalline powders production and its photocatalytic properties
S-10	Kārlis Brants	Radionuklīdu fitoremediācija no ūdenstilpnēm izmantojot vetiveru Chrysopogen zizaniodes
S-11	Jānis Čipa	Use of TL/OSL reader "Freiberg Instruments" for characterization of new dosimetric materials
S-12	Aija Kalniņa	Ar Mn ²⁺ joniem aktivēta MgGeO ₃ ilgspīdošā luminiscence
S-13	Guna Doķe	Ilgstoša pēcspīdēšana tuvajā infrasarkanajā spektra apgabalā ar hroma joniem aktivētā CaZnGe ₂ O ₆ materiālā
S-14	Jēkabs Cīrulis	Temperatūras un sastāva ietekme uz gadolīnija jonu iebūvēšanos oksifluorīdu stikla keramikas kalcijs fluorīda fāzē.
S-15	Elīna Pavlovska	Eiropija jonu sadalījuma un īpašību kvantitatīvā analīze stikla keramikā
S-16	Rihards Ruska	AlN:Mn pulveru luminescence
S-17	Ramūnas Nedzinskas	ZnMgO plāno kārtiņu temperatūras atkarīgā fotoluminiscence
S-18	Rolands Grants	Defektu agregātu veidošanās ar ātrajiem joniem apstarotā MgO: dislokāciju kustīguma un fotoluminiscences pētījumi
S-19	Faina Muktepāvela	ZnO nanopulveru virsmas modifikācija: termiskās apstrādes un piedevu ietekme
S-20	Mārtiņš Zubkins	Jauna magnetronās izputināšanas iekārta plāno kārtiņu izgatavošanai: iespējamie procesi, materiāli un kontrole
S-21	Halil Arslan	Oxidization process of Yttrium: Deposition of thin films by HiPIMS and Reactive DC Magnetron Sputtering

13:30-15:30

S-22	Oļegs Lisovskis	Zn _x Mg _{1-x} O cietie šķīdumi UV sensoriem: DFT simulēšana un spektrālā raksturošana
S-23	Dmitrijs Bočarovs	Slāņaino MoS ₂ un WS ₂ materiālu aprēķini izmantojot molekulāro dinamiku no pirmajiem principiem
S-24	Dmitrijs Bočarovs	Negatīvās termiskās izplešanās efekta modelēšana skandija fluorīdā izmantojot molekulāro dinamiku no pirmajiem principiem
S-25	Dāvis Zavickis	Co jona magnētiskā stāvokļa un lokālās apkārtnes raksturošana BaCoO ₃ perovskītā ar skābekļa vakancēm
S-26	Miks Jurjāns	NBT-CaTiO ₃ CIETO ŠĶĪDUMU ELEKTROMEĦĀNISKĀS ĪPAŠĪBAS.
S-27	Līga Bikše	Termiskās apstrādes loma uz NBT bāzētu keramiku virsmas morfoloģiju.
S-28	Ojārs Mārtiņš Eberliņš	Fotoluminiscence ar eiropiju aktivētā Na _{0.5} Bi _{0.5} TiO ₃ keramikā.
S-29	Sergejs Fomins	Fāzes atgūšanas algoritmu salīdzinājums optisko sistēmu kroplojumu raksturošanai
S-30	Sergejs Fomins	Izveidota dinamiskā LED avota salīdzinājums ar komerciālo RGB vadāmo avotu
S-31	Varis Karitāns	Stiklveida ķermeņa apduļķojumu struktūras noteikšana, izmantojot difraktīvo attēlu analīzi
S-32	Kaspars Kaprāns Aleksandrs Volperts	Ar slāpekli leģēta nanostrukturēta porainā oglekļa anodmateriāla pētījumi litija jonu baterijām
S-33	Ansis Mežulis	Ūdeņraža izmantošana gāzes degvielas SEG emisiju samazināšanai transporta sektorā
S-34	Guntars Vaivars	CO ₂ adsorbcijas uz vara aktivēšanas ar jonu šķidrums palīdzību
S-35	Jānis Teterovskis	Sulfonētā poliēterēterketona membrānu izgatavošana izmantojot ultraskaņas izsmidzinātāju.
S-36	Ināra Ņesterova	Nātrija jonu bateriju Na ₂ FeP ₂ O ₇ katodmateriāla sintēze, struktūra, sastāvs un elektroķīmiskās īpašības
S-37	Reinis Kaparkalējs	Sulfonētu poliēterēterketona membrānu uzbriešana elektrolītos
S-38	Ainārs Knoks	Karsēšanas atmosfēras ietekme uz ar grafēna kvantu punktiem leģēta TiO ₂ fotofizikālajām īpašībām
S-39	Ainārs Knoks	CO ₂ elektrokatalītiskās reducēšanas reakcijas mehānisma aprēķinu modeļa verificēšana ar ATR-FTIR
S-40	Ingars Lukoševičs	Ar slāpekli dopētas aktivētas ogles pielietojums kā gāzu sensora materiāls
S-41	Renārs Laviņš	Ar slāpekli dopētu un nedopētu aktivētu ogļu elektrodu pielietojums mikrobu baterijās
S-42	Roberts Oliņš	Elektroķīmiskās eksfoliacijas pielietojums grafēna funkcionalizēšanai ar slāpekli
S-43	Agris Zvirgzdiņš Pēteris Tjarve	Grafēns, tā iegūšana un plāno kārtiņu siltumvadītspēja un efektivitāte
S-44	Mareks Grižāns	Innovatīvi materiāli uz nanostrukturēta oglekļa bāzes – materiāli enerģētikai.
S-45	Gunārs Bajārs	Karbonizēta stikla šķiedras auduma masas atjaunošanās pēc izotermiskas karsēšanas
S-46	Leo Krugļikovs	Lineāra pastāvīgo magnētu ģeneratora teorētiskais modelis ūdens triecī
S-47	Zarina Umatova	Synthesis of thin film of WS ₂ and MoS ₂ on GaN nanowires and GaN wafers

13. februāris

EUROFUSION UN TEORIJA

Vadītājs Dmitrijs Bočarovs

9:00	Andris Šternbergs	Latvijas "EUROfusion" laboratorijas ieguldījums ceļā uz CO ₂ brīvu enerģijas avotu
9:30	Oļģerts Dumbrājs	Koaksiālie žirotroni DEMO kodolsintēzes reaktoriem
9:45	Arturs Cintiņš	Itrija un titāna uzvedība ODS tērauda izgatavošanas procesā
10:00	Andrejs Česnokovs	IrO ₂ ieslēgums ZnO: elektronisko defektu simulācija
10:15	Guntars Zvejnieks	Interfeisa-inducētās pjezoelektricitātes palielināšana (SrTiO ₃) _m /(BaTiO ₃) _M -m superrežģī
10:30	Andrejs Česnokovs	(La,Sr)MnO ₃ katoda virsmas termināciju ietekme uz tā elektronisko struktūru

10:45-11:15 Kafija

11. februāris

OPTISKIE MATERIĀLI I

Tendences un izaicinājumi cietvielu fizikas jomā: Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūta perspektīva

Andris Šternbergs

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts (LU CFI) ir vadošais institūts materiālzinātnē Baltijas jūras reģionā. Zinātniskā kapacitāte un pētnieciski inovatīvā ekosistēma šobrīd tiek attīstīta caur Moderno materiālu pētniecības un tehnoloģiju pārneses projektu “CAMART²”. Stratēģiski pilnvērtīgai attīstībai tiek identificētas nākotnes tehnoloģiskās tendences, jaunie materiāli un izaicinājumi, kuru risināšanai LU CFI veido stratēģiju un pētniecības programmu laika periodam 2020-2023-2027. Darbība tiek plānota veidojot vērtības ķēdes, kas rezultējas ar tirgum piemērotu produktu vai pakalpojumu izstrādi. Tas ir intensīvs zinātnieku koprades process, kura gaitā dokumenti tiek sinhronizēti ar Eiropas Komisijas plāniem un zinātnes finansējuma ietvarprogrammām, it īpaši ar gaidāmo “Apvārsnis Eiropa” programmu. Procesā piedalās LU CFI Starptautiskā padomdevēju komiteja, lai nodrošinātu plānošanas dokumentu sažobi ar pasaules tendencēm.

Trends and Challenges in Solid State Physics: Perspective of the Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Andris Sternbergs

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The Institute of Solid State Physics, University of Latvia (ISSP UL) is the leading institute of material science in the Baltic Sea region. Scientific capacity and the research and innovation ecosystem are currently being developed through the Center of Advanced Material Research and Technology Transfer project “CAMART²”. For strategic and full-fledged development future technological trends, new materials and challenges are being identified and ISSP UL develops a strategy and research program for the period 2020-2023-2027 for tackling them. The activity is planned by creating value chains that result in a marketable products or services. It is an intensive co-creation process by scientists where plans are being synchronized with those of the European Commission and their science funding framework programs, especially with the upcoming “Horizon Europe”. International Advisory Board of ISSP UL participates in the process to ensure that the planning documents are in line with global trends.

Ar hlora piemaisījumiem saistītā optiskā absorbcija un fotoķīmiskās reakcijas sintētiskajā SiO₂ stiklā

Linards Skuja¹, Nadège Ollier², Ivita Bite¹, Katrīna Laganovska¹, Krišjānis Šmits¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Laboratoire des Solides Irradiés, Université Paris Saclay, Ecole Polytechnique*

SiO₂ stikls ir galvenais optiskais materiāls pielietojumiem vidējajā ($\lambda < 300\text{nm}$, $\hbar\omega > 4\text{ eV}$) un dziļajā (līdz 160 nm) ultravioletajā (UV) spektrālajos apgabalos. Tā optiskās absorbcijas spektri šajā apgabalā ir sarežģīti, galveno ieguldījumu dod skābekļa un silīcija norautās saites. Kā sekas sintēzei no SiCl₄, šajos stiklos bieži atrodami hlora piemaisījumi $\equiv\text{Si-Cl}$ grupu vai starpmezglu Cl₂ molekulu formā. To ieguldījums optiskās absorbcijas spektros līdz šim nav labi izprasts. Nesen tika atrasts [1], ka Cl-saturoša SiO₂ stikla UV apstarošana inducē jaunu Ramana izkliedes līniju pie 955 cm⁻¹, kura norāda uz ClClO starpmezglu molekulu veidošanos. Mūsu darbā ir parādīts, ka šis process rada jaunu UV absorbcijas joslu pie 4.7 eV, kura dod ieguldījumu kopīgajā solarizācijas radītajā absorbcijā hlora saturošos SiO₂ stiklos. Tika atrasts, ka notiek enerģijas pārnese no fotoerosinātām Cl₂ molekulām tripleta stāvoklī uz starpmezglu O₂ molekulām, kas pierāda, ka abas molekulas var atrasties tuvu kopā nanoizmēra starpmezglu dobumos SiO₂ stikla tīkla struktūrā.

Chlorine impurities-related optical absorption and photochemical reactions in synthetic glassy SiO₂.

Linards Skuja¹, Nadège Ollier², Ivita Bite¹, Katrīna Laganovska¹, Krišjānis Šmits¹

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

²*Laboratoire des Solides Irradiés, Université Paris Saclay, Ecole Polytechnique, France*

Synthetic SiO₂ glass is the dominant optical material for applications in the medium ($\lambda < 300\text{ nm}$, $\hbar\omega > 4\text{ eV}$) to deep ultraviolet (down to 160 nm) spectral ranges. Its optical absorption spectrum there is complex; the main contributors are dangling oxygen- and silicon bonds. Chlorine impurities in the form of $\equiv\text{Si-Cl}$ groups or interstitial Cl₂ are often present due to the synthesis from SiCl₄; their contribution is not well-understood. It was recently shown, that UV-irradiation of Cl-containing glass gives rise to a new Raman line at 955 cm⁻¹, which can be attributed to formation of interstitial ClClO molecules [1]. The present study demonstrates that this process gives rise to an additional optical absorption band at 4.7 eV, which contributes to the overall solarization-induced absorption in Cl-containing glasses. An energy transfer between photoexcited triplet Cl₂ and interstitial O₂ molecules was detected, indicating that both molecules can be located closely together in nanosized voids in the structure of SiO₂ glass network.

[1] L. Skuja, K. Kajihara, K. Smits, A. Silins, H. Hosono, J. Phys. Chem. **C121** 5261(2017).

This work was supported by Latvian Science Council grant lzp-2018/1-0289.

Piroelektrisko kristālu enerģijas pārvešana luminoforiem

Anatolijs Truhins, Laima Trinklere, Aleksejs Zolotarjovs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Tika pētīti piroelektrisko kristālu LiGaO_2 , Li_2GeO_3 , LiNbO_3 un $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ elektriskie un luminiscences signāli. Tika konstatēts ka dzesēšanas / sildīšanas gaitā elektriskie impulsi korelē ar luminiscences impulsiem piroelektriskā efekta dēļ. Elektriskā reakcija tika izskaidrota ar elektronu emisiju. Eksperimentā tika pārbaudīts, vai piroelektriskā efekta izraisītā elektronu plūsma var ierosināt luminoforu luminiscenci. Luminofori ScPO_4 , SiO_2 , CsJ tika piestiprināti pie dažādiem piroelektriskiem kristāliem. Enerģijas pārvešanas process tika pētīts dzesēšanas / sildīšanas gaitā, mērot luminiscences spektrus un dzišanas kinētiku. Dažos piroelektrisko kristālu un luminoforu kombināciju gadījumos bija iespējams noverot gan luminofora luminiscences spektrus, gan atbilstošo dzišanas kinētiku, piemēram, $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ un ScPO_4 kombinācijai tika novērots spektrs ar autolokalizēta eksitona un retzemju aktivatoru joslām, un kinētiku, kas ir raksturīga luminoforam. Citos gadījumos bija iespējams iegūt tikai luminiscences kinētikas līknes, kas atbilst luminoforu luminiscences centriem (ar varu un sudrabu leģētos kvarca kristālos, silīcija stiklos ar germāniju un CsJ-Tl). Šādu pieeju var izmantot luminoforu luminiscences izpētei, ja nav iespējas izmantot parastās ir ierosināšanas metodes.

Energy transfer from pyroelectric crystals to attached phosphors

Anatolij Trukhin, Laima Trinkler, Aleksejs Zolotarevs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Electric and luminescence responses of pyroelectric crystals: LiGaO_2 , Li_2GeO_3 , LiNbO_3 and $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ were studied. Correlation of electric and luminescence pulses in cooling/heating runs due to pyroelectric effect was found. Electric signal was interpreted as electron emission. An attempt was done to excite luminescence of phosphor samples by electrons emitted from surface of pyroelectric crystals. For this experiment phosphors ScPO_4 , SiO_2 , CsJ were chosen. Energy transfer from the pyroelectric crystals caused luminescence of the phosphors. Spectra and kinetics of phosphor luminescence were compared with the known parameters of their photoluminescence. In some cases of pyroelectric crystal and phosphor combination it appeared possible to detect both luminescence spectrum and corresponding decay kinetics. One of such examples is combination of $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ crystal and ScPO_4 phosphor, demonstrating luminescence of self-trapped exciton and rare-earth activators with decay parameters characteristic for photoluminescence of the phosphor. In other cases it was possible only obtain decay kinetic curves of luminescence, which corresponded to luminescence centers of the phosphors (copper and silver doped quartz crystal, silica glass with germanium and CsJ-Tl). Pyroelectric effect can be used for study of luminescence of phosphors in the case when the usual method of excitation is unavailable.

The financial support of the Latvian Science Council Grant No. lzp-2018/1-0361 is greatly acknowledged.

**α -kvarca kristāla un kvarca stikla luminiscence,
ierosināta ar ArF (193 nm) un KrF (248 nm) eksimēru lāzeriem**

Anatolijs Truhins

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

α -kvarca kristāla un SiO₂ stikla luminiscence tika pētīta ar fokusētu lāzera ierosmi. Tika atrasts, ka kristāliskajā α -kvarcā autolokalizēta eksitona (AE) luminiscences intensitāte, kas ierosināta ar KrF (248 nm) eksimēra lāzeru divu fotonu režīmā, ir daudz zemāka nekā tā, ko ierosina ar ArF (193 nm) lāzeru. KrF (248 nm) lāzera ierosmes gadījumā ir redzama galvenokārt luminiscence, kas ir tuvu virsmai. Šai pievirsmas luminiscencei ir emisijas josla, kas līdzīga AE luminiscencei tilpumā. Temperatūras dzēšana arī ir līdzīga, tāpēc šī luminiscence tiek attiecināta uz AE, kas veidojas virsmas tuvumā. Virsmas AE luminiscences dzišanas kinētika ir garāka nekā tilpuma AE kinētika (desmitiem ms salīdzinājumā ar 1 ms pie T=80 K). Tiek pieņemts, ka elektroni vai / un caurumi autolokalizējas pie virsmas. To rekombinācija varētu nodrošināt ilgāku virsmas STE luminiscences ilgumu.

III tipa kvarca stikla luminiscence ar KrF ($\lambda=248$ nm) lāzera ierosmi ir līdzīga iepriekš pētītajai AE luminiscencei kvarca stiklā, ko ierosina ar elektronu staru.

Luminescence of α -quartz crystal and silica glass under excitation of excimer lasers (ArF (193 nm), KrF (248 nm))

Anatolij Trukhin

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Luminescence of crystalline α -quartz and silica glass was studied under focused laser excitation. It was found that in crystalline α -quartz the luminescence intensity of self-trapped exciton (STE) excited with KrF (248 nm) excimer laser in two-photon regime is much lower than that excited with ArF (193 nm). In the case of KrF (248 nm) laser excitation mainly luminescence related to near surface area is seen. The near surface luminescence has an emission band similar to that of STE in bulk. Temperature quenching is also similar, therefore this luminescence is attributed to STE created in the area of surface. Luminescence decay kinetic of surface STE is longer than bulk STE decay (tens of ms compared to 1 ms at 80 K). Electron or/and hole self-trapping near the surface is assumed. Their recombination could provide longer duration of surface STE luminescence.

The type III luminescence of quartz glass with laser excitation KrF (248 nm) is similar to the AE luminescence of quartz glass excited by electron beam.

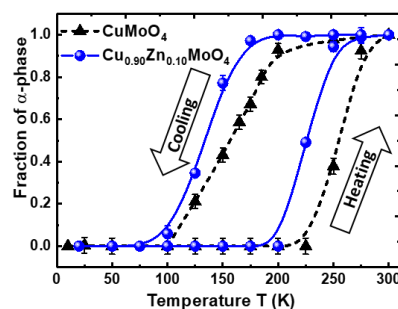
The financial support of the Latvian Science Council Grant No Izp-2018/1-0289 is greatly acknowledged.

Cinka jonu ietekme uz $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{MoO}_4$ cieto šķīdumu struktūru un termohromajām īpašībām

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

Molibdāti ar vispārīgo formulu $\text{A}^{2+}\text{MoO}_4$ veido plašu funkcionālo materiālu klasi. Starp tiem vara molibdāts (CuMoO_4) ir izpelnījies īpašu uzmanību, pateicoties tā termohromajām un pjezohromajām īpašībām. Savukārt, cinka molibdāts (ZnMoO_4) ar izomorfu struktūru ir baltais pigments, kam piemīt arī luminiscence.

CuMoO_4 termohromās īpašības ir cieši saistītas ar pirmā veida fāžu pāreju starp α un γ fāzēm, kuru raksturo histerēze temperatūru intervālā $\sim 100\text{-}300\text{K}$. Mainot CuMoO_4 sastāvu (piemēram, aizstājot Mo^{6+} ar W^{6+} vai Cu^{2+} ar Zn^{2+}), iespējams mainīt materiāla struktūru un ietekmēt tā optiskās īpašības. Šajā darbā tika veikti rentgenabsorbcijas spektroskopijas eksperimenti sinhrotronā PETRA III $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{MoO}_4$ cieto šķīdumu sērijai vara, cinka un molibdēna lokālās struktūras pētījumiem atkarībā no temperatūras ($T=20\text{-}300\text{K}$) un cinka koncentrācijas ($x=0\text{-}1.0$). Tika pētīta cinka jonu ietekmi uz CuMoO_4 termohromajām īpašībām un noskaidrots, ka pie zemas Zn^{2+} koncentrācijas ($x=0.10$) iespējams novērot fāžu pārejas histerēzi, kas pabīdīta uz zemākām temperatūrām (attēlā), savukārt, lielāka Zn^{2+} koncentrācija stabilizē α -fāzi visā zemo temperatūru diapazonā.



The influence of zinc ions on the structure and thermochromic properties of $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{MoO}_4$ solid solutions

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

Molybdates with general formula $\text{A}^{2+}\text{MoO}_4$ form a wide class of functional materials. Among them, copper molybdate (CuMoO_4) has attracted great interest because of its thermochromic and piezochromic properties. At the same time, zinc molybdate (ZnMoO_4) with isomorphic structure is a white pigment with luminescence properties. Thermochromic properties of CuMoO_4 are related to the first-order phase transition between α and γ phases with hysteresis behaviour in the temperature range $\sim 100\text{-}300\text{K}$. A change of the CuMoO_4 composition (for instance, substituting Mo^{6+} with W^{6+} or Cu^{2+} with Zn^{2+}) leads to changes in the structure and optical properties of the material.

In this study, we performed X-ray absorption spectroscopy experiments at synchrotron PETRA III for a series of $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{MoO}_4$ solid solutions to investigate the local structure of Cu, Zn, and Mo ions as a function of temperature ($T=20\text{-}300\text{K}$) and composition ($x=0\text{-}1.0$). We found that at low Zn^{2+} concentration ($x=0.10$) phase transition hysteresis shifts to lower temperatures (see figure), while larger Zn^{2+} concentration stabilizes α -phase in all low-temperature range.

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

MgO un Mg_xZn_{1-x}O cietā šķīduma režģa svārstību aprēķini

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

Pētījuma gaitā apskatīti MgO un Mg_xZn_{1-x}O cietais šķīdums, modelēta kristāliskā režģa dinamika izmantojot klasisko molekulārdinamikas aprēķinu metodi. Aprēķinos galvenokārt izmantota programma *GULP*. Aprēķinos izmantots Bekinghema starpatomārās mijiedarbības potenciāls. Piemeklēti starpatomārās mijiedarbības potenciāla parametri dažādiem jonu lādiņiem, izmantojot no pirmajiem principiem (programmā *CRYSTAL*) aprēķinātās kristallrežģa svārstību frekvences. Iegūtie potenciāli lietoti, lai aprēķinātu MgO un Mg_xZn_{1-x}O cieto šķīdumu fononu dispersijas līknes un fononu stāvokļu blīvumu. Aprēķini veikti dažādām Zn koncentrācijām. Ir salīdzināti iegūtie MgO aprēķinu rezultāti ar citu autoru publicētajiem eksperimentālajiem un aprēķinu rezultātiem. Darbā izmantotā klasisko aprēķinu metode pieļauj apskatīt liela izmēra režģus un ļoti dažādas piejaukumu koncentrācijas. Pievienojot Zn, nav vērojamas lokālās modas ārpus MgO fononu stāvokļu apgabala. Būtiskas izmaiņas ir novērojamas stāvokļu blīvuma zemo frekvenču apgabalā (100-300 cm⁻¹).

Lattice dynamics calculations for MgO and Mg_xZn_{1-x}O solid solution

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

In the course of this work MgO and the Mg_xZn_{1-x}O solid solutions were studied by modelling lattice dynamics, using the methods of classical molecular dynamics. The main program used was General Utility Lattice Program (*GULP*). The Buckingham potential was used for modelling interatomic forces. The parameters for this potential were found for different effective ionic charges by using vibrational frequencies obtained from *ab initio* calculations in the program *CRYSTAL*. With these potentials, the dispersion relations and densities of states were calculated for MgO and Mg_xZn_{1-x}O. Calculations were made for different concentrations of Zn in the solid solution.

The obtained results for MgO have been compared to the previous work done by other researchers, both experimental and theoretical. The classical calculation method used in this work allows for large crystalline structures and many different impurity concentrations. By adding more Zn in the solution, no local vibrational modes are observed, however, there is noticeable change in the low frequency region (100-300 cm⁻¹) of the DOS.

This work is supported by the M-Era.net research project ZMOMUVS.

11. februāris

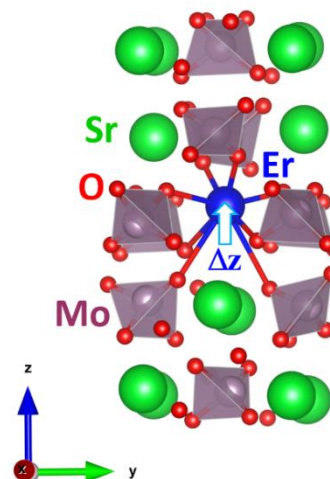
OPTISKIE MATERIĀLI II

Erbija jonu lokālā struktūra augšup-pārveidotā $\text{SrMoO}_4:\text{Er}^{3+}$ fosforā

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

Ar retzemju joniem dopēts stroncija molibdāts (SrMoO_4) ar sheelīta-tipa struktūru tiek pielietots gan kā lāzera aktīvā vide, gan luminescējošos materiālos. Parasti tiek uzskatīts, ka retzemju joni aizstāj stronciju, tomēr tiešie strukturālie eksperimenti to nekad nav pierādījuši. Problēma ir saistīta ar ļoti mazu dopēto jonu koncentrāciju (parasti zem 1-2 mol%).

Šajā darbā tiek izmantota sinhrotrona starojuma rentgenabsorbcijas spektroskopija, lai pārbaudītu erbija jonu novietojumu SrMoO_4 struktūrā. Er L_3 malas EXAFS spektru analīze, izmantojot apgriezto Monte-Karlo metodi, liecina, ka erbija joni atrodas necentrālā pozīcijā, nobīdīti pa c asi par $\Delta z \approx 0.5 \text{ \AA}$.



Local structure of erbium ions in upconversion $\text{SrMoO}_4:\text{Er}^{3+}$ phosphor

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

Rare-earth ions doped strontium molybdate (SrMoO_4) with a scheelite-type structure finds applications in laser-active media and luminescent materials. It is generally believed that rare-earth ions substitute strontium, however, it was never proved by direct structural experiments. The problem is related to a very small concentration of the doping ions (usually below 1-2 mol%).

In this study, we used synchrotron radiation X-ray absorption spectroscopy to probe the local environment around erbium ions in SrMoO_4 . The analysis of the Er L_3 -edge EXAFS spectra using reverse Monte Carlo method suggests that erbium ions are located in off-center position, being displaced along the c -axis by $\Delta z \approx 0.5 \text{ \AA}$.

Financial support provided by the LCS project lzp-2019/1-0071 is greatly acknowledged.

Ilgspīdoša luminescence piemaisījumus saturošā AlN

Baiba Bērziņa, Laima Trinklere, Guna Kriekē, Guna Doķe, Andris Antuzevičs,
Anatolijs Šarakovskis, Meldra Ķemere, Andris Fedotovs, Daina Riekstiņa,
Rihards Ruska, Jānis Čīpa
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Ilgspīdoša luminescence (PersL), kuras spīdēšana var ilgt daudzas stundas pēc tās ierosināšanas pārtraukšanas, ir aktuāla dažādo pielietojumu dēļ, kas ietver spīdošas drošības zīmes, tumsā spīdošus objektus uc. Svarīga nozīme ilgspīdošai luminescencei ir paredzama medicīnā un bioloģijā, kur, cilvēka ādas gaismas spektrālās caurlaidības īpatnību dēļ, noteicošā ir sarkanā gaisma. Pašreiz LU CFI tiek īstenots jauns LZP projekts $\text{MgSiO}_3: \text{Mn}^{2+}, \text{M}$ ($\text{M}=\text{Al}^{3+}, \text{Ga}^{3+}, \text{In}^{3+}$), kura mērķis ir izveidot jaunus un efektīgus ilgspīdošus, sarkano gaismu starojošus materiālus. Šim nolūkam ir izvēlēts $\text{MgSiO}_3: \text{Mn}^{2+}, \text{M}$ ($\text{M}=\text{Al}^{3+}, \text{Ga}^{3+}, \text{In}^{3+}$) materiāls. Pašreiz ir veikti pirmie soļi šī uzdevuma realizēšanā - ir sintezēts pirmais materiāla daudzums, un tam ir novērota sarkana ilgspīdoša luminescence.

Piemaisījumus saturošs AlN veido citu perspektīvu un ilgspīdošu materiālu grupu. Mūsu iepriekšējie AlN:Mn makro un nano pulveru pētījumi ir parādījuši, ka Mn izraisītai sarkanai luminescencei piemīt PersL īpašības. Tiek pētīti tās mehānismi. Arī citu piemaisījumu, tādu kā Fe, Cr, retzemju elementi uc. loma PersL radīšanā AlN tiek analizēta, un tā tiks turpmāk arī eksperimentāli pētīta.

Persistent luminescence of doped AlN

Baiba Berzina, Laima Trinkler, Guna Kriekē, Guna Doke, Andris Antuzevics,
Anatolijs Sarakovskis, Meldra Kemere, Andris Fedotovs, Daina Riekstina,
Rihards Ruska, Janis Cipa
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Persistent luminescence (PersL) - a long lasting light emission reaching many hours after ceasing of excitation source, is current for different applications including safety signs, glow-in-the-dark decorations and especially for needs of medicine and biology, where the red light is determinant due to peculiarities of light spectral transparency of human skin. In the ISSP at LU there is running a new LSC Project with aim to elaborate a novel and efficient material emitting red light persistent luminescence. For this purpose $\text{MgSiO}_3: \text{Mn}^{2+}, \text{M}$ ($\text{M}=\text{Al}^{3+}, \text{Ga}^{3+}, \text{In}^{3+}$) has been chosen as one of the most prospective materials. At present the first steps for realization of this task are realized - the first party of material is synthesized and its persistent red luminescence is observed.

Another group of prospective persistent luminescence materials is based on doped AlN. Our long-term investigations on AlN macro and nano powders doped with Mn allowed consideration that Mn caused red luminescence possesses PersL properties. At present investigation of this phenomenon including revealing of PersL mechanism is running on. Role of other type dopants such as Fe, Cr and rare earth elements in PersL origination in AlN is also analyzed and will be experimentally studied.

The present research is sponsored from the Latvian Sciences Council Grant No Izp-2019/1-0443.

Rentgenstaru defekti aktivētos oksifluorīdu stiklos

Andris Antuzevičs, Guna Kriēķe, Elīna Pavlovska
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Defektu veidošanās materiālos pēc apstarošanas ar jonizējošo starojumu ir vispārzināms fakts. Stiklos radiācijas defekti tipiski rada absorbcijas joslas redzamajā elektromagnētiskā spektra diapazonā un vizuāli to var novērot kā parauga nokrāsošanos. Papildus tam, ar retzemju joniem aktivētos stiklos ir iespējama aktivatoru pārlādēšanās un līdz ar to – izmaiņas luminiscences īpašībās. Optiskos pielietojumos abi efekti var būt nevēlami, tāpēc tos ir nepieciešams kontrolēt.

Šajā pētījumā tiks analizēta rentgenstaru radītu defektu veidošanās un stabilitāte dažādu sastāvu oksifluorīdu stiklos ar uzsvāri uz paramagnētisku kompleksu veidošanos un elektronu paramagnētiskās rezonanses (EPR) metodi. Tiks demonstrēts veids defektu veidošanās ierobežošanai, aktivējot paraugus ar eiropiju.

X-ray induced defects in activated oxyfluoride glasses

Andris Antuzevics, Guna Krieke, Elina Pavlovska
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Defect creation in materials is a well-established response to ionizing radiation. In typical glasses radiation defects cause absorption bands in the visible part of the electromagnetic spectrum, which leads to a coloration of the sample. Additionally, in rare-earth ion activated glasses changes in the oxidation state of the activator and thereby – luminescence properties – can be expected. For optical applications both effects may be undesirable and should be controlled.

In this study formation and stability of x-ray induced defects is analyzed in different oxyfluoride glass systems with emphasis on generation of paramagnetic species and electron paramagnetic resonance (EPR) investigations. A way of suppressing defect formation by doping the composition with europium will be demonstrated.

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

Tb³⁺ un Eu³⁺ luminiscence un enerģijas pārnese SrF₂ nanokristālitus saturošā oksifluorīdu stikla keramikā

Meldra Kemere, Uldis Rogulis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Retzemju jonu luminiscence tiek plaši pielietota visdažādākajās ierīcēs, un tās īpašības materiālos – gan materiāla struktūras ietekme uz retzemju jonu luminiscenci, gan aktivatoru savstarpējā mijiedarbība – joprojām tiek aktīvi pētītas. Darbā pētītas eiropija un terbija jonu luminiscences īpašības un enerģijas pārnese oksifluorīdu stikla keramikā, kura satur SrF₂ nanokristālitus.

Darba gaitā sintezēti stikla paraugi ar sastāvu SiO₂-Al₂O₃-Na₂O-SrF₂, aktivēti ar Tb³⁺ un Eu³⁺ joniem dažādās koncentrācijās (0-2 mol%). Izgatavoti stikla keramikas paraugi, karsējot stikla paraugus 650 – 700 °C temperatūrā 1-4 stundas. Veikti fotoluminiscences, fotoluminiscences ierosmes un dzišanas kinētiku mērījumi, kā arī rentgenstaru difrakcijas mērījumi.

Tb³⁺ un Eu³⁺ luminiscences spektru izmaiņas stikla keramikā norāda uz daļēju retzemju jonu iebūvēšanos SrF₂ nanokristālitos. Vienaktivētos paraugos stikla keramikā Tb³⁺ luminiscences dzišana notiek lēnāk nekā attiecīgajos stiklos, diaktivētos – ātrāk. Tas norāda uz efektīvu enerģijas pārnesei no Tb³⁺ uz Eu³⁺ joniem stikla keramikā.

Luminescence and energy transfer of Tb³⁺ and Eu³⁺ in oxyfluoride glass ceramics containing SrF₂ nanocrystallites

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

Rare-earth ion luminescence is used in a wide range of devices, its properties in materials – interaction with structure of the host material and interaction between activators – are still being studied extensively. In this work luminescence properties and energy transfer of europium and terbium ions in glass ceramics containing SrF₂ nanocrystallites were studied.

In the present study, oxyfluoride glasses with the composition SiO₂-Al₂O₃-Na₂O-SrF₂, activated with Tb³⁺ and Eu³⁺ ions (0-2 mol%) have been synthesized. Glass-ceramic samples were obtained by heating the precursor glasses at 650 – 700 °C temperature for 1 to 4 hours. Photoluminescence emission, excitation and decay measurements and X-ray diffraction measurements were performed.

The changes in Tb³⁺ and Eu³⁺ luminescence spectra in the glass ceramics indicate a partial incorporation of rare earth ions in the SrF₂ nanocrystallites. In singly-doped glass ceramics Tb³⁺ luminescence decay is slower compared to glasses while in the co-doped glasses – faster. It proposes an efficient energy transfer from Tb³⁺ to Eu³⁺ ions in the glass ceramics.

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

11. februāris

ORGANISKIE MATERIĀLI I

Koherentu staru kūļu pastiprināšana ar dinamiskām hologrammām molekulāros stiklveida azomateriālos

Yaroslav Skrypka¹, Valdis Kokars², Kaspars Traskovskis², Andris Ozols²,
Peteris Augustovs², Alexandr Shumelyuk¹, Serguey Odoulov¹

¹*Ukrainas Nacionālās Zinātņu akadēmijas Fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietīšķās ķīmijas fakultāte*

Divu koherentu gaismas viļņu pašdifrakcija, kuri ieraksta hologrāfisko režģi plānās molekulāro stiklu kārtiņās, ir izmantota vājā gaismas kūļa intensitātes pastiprināšanai uz stiprā kūļa rēķina. Vājā gaismas kūļa intensitāte pieauga divas reizes pie tikai 8 μm mijiedarbes garuma, tādējādi norādot uz ļoti lielu īpatnējo saites konstanti. Raksturīgais pastiprinājuma laiks ir samērā ilgs-ap 200 s. Tādēļ, visticamāk, pastiprināšanas procesa pamatā esošā Kerra tipa optiskā nelinearitāte ir saistīta ar fotoinducēto masas pārneši. Ieraksta mehānisms tiks aplūkots detalizētāk. Rezumējot var secināt, ka, ciktāl mēs zinām, pirmo reizi ir pierādīts, ka ar trifenilmētānu funkcionalizēti azomolekulārie materiāli var tikt izmantoti kā ļoti jutīgas vides hologrāfiskajam ierakstam un koherentu gaismas kūļu pastiprināšanai.

Coherent beam amplification with dynamic holograms in glass-forming molecular azobenzene based materials

Yaroslav Skrypka¹, Valdis Kokars², Kaspars Traskovskis², Andris Ozols²,
Peteris Augustovs², Alexandr Shumelyuk¹, Serguey Odoulov¹

¹*Institute of Physics, National Academy of Sciences of Ukraine*

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

Self-diffraction of two coherent light waves that record a holographic grating in thin films of azobenzene-containing molecular glass-forming materials is used for intensity enhancement of a weak beam in expense of the strong beam intensity. The intensity of a weak probe beam is doubled at interaction length of only 8 μm thus pointing to a very high specific coupling constant. The characteristic time of the intensity redistribution is relatively long, on the order of 200 s. Consequently, the underlying process of pronounced Kerr-type optical nonlinearity is related, most probably, to the photoinduced mass transfer. Recording mechanism will be discussed in more details. To summarize, we have shown, for the first time to the best of our knowledge, that triphenylmethane functionalized molecular materials can be used as highly-sensitive media for holographic recording and coherent beam amplification.

The financial support by the Joint Ukraine-Latvia Research & Development program's project **LV:** LV-UA/2017/3; **UA:** Ministry of Education and Science, Ukraine, (M67-2018) is greatly acknowledged.

Lādiņnesēju transporta pētījumi P3HT plānās kārtiņās

Normunds Ralfs Strautnieks, Kaspars Pudžs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Poli(3-heksiltiofēns) jeb P3HT regioregulārs pusvadītāju polimērs. To plaši izmanto organiskajā elektronikā (organiskie saules elementi, termoelektriskie pārveidotāji) galvenokārt tāpēc, ka tam ir regulārs sānu ķēdes novietojums visā polimēra garumā, kas stimulē efektīvu atsevišķu konjugēto polimēru sānu ķēžu sakārtošanos ar Π - Π saišu pārklāšanos. P3HT plānās kārtiņas īpašības ir parādījušas daudzsološu potenciālu plašākam pielietojumam saules baterijās un termoelektriskajos pārveidotājos, kas ir veicinājis interesi par tā elektrisko un termoelektrisko īpašību padziļinātu izpēti.

Darba gaitā ir pētītas termoelektriskās īpašības neatšķaidītiem P3HT ar dažādu polimerizācijas pakāpi un dopētiem P3HT paraugiem ar (2,3,5,6-tetrafluoro-2,5-cikloheksadiēn-1,4-dilidēn)-dimalonodinitrilu (TCNQ). Plānās kārtiņas iegūtas izmantojot rotējošā diska metodi no vielu šķīdumiem hlorbenzolā. Lādiņnesēja transporta pētīšanai tika izgatavoti paraugi ar dažādiem elektrodu materiāliem monopolāras lādiņnesēju injekcijas un bipolāras lādiņnesēju injekcijas nodrošināšanai. Lādiņnesēja transporta pētīšanai tika pielietotas Telpas Lādiņa Ierobežotās Strāvas (TLIS) metodes.

Studies of charge carrier transport in thin films of P3HT

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

Poly(3-hexylthiophene) (P3HT) is a regioregular semiconducting polymer. It is widely used in organic electronics (organic solar cells, thermoelectric converters) primarily because of its regular end-to-end arrangement of side chain, which allows efficient Π - Π stacking of the conjugated polymer backbones. The properties of thin films of P3HT have shown promising potential for wider applications in solar cells and thermoelectric converters. It has boosted interest in a deeper study of its electrical and thermoelectric properties.

The thermoelectric properties of pure P3HT with varying degrees of polymerization and doped P3HT samples with (2,3,5,6-tetrafluoro-2,5-cyclohexadiene-1,4-diyldiene)dimalononitrile (TCNQ) have been studied during the work. Thin films are obtained using the spin-coating method from the compound solutions in chlorobenzene. Samples with various electrode materials were produced for studying of the charge carrier transport in monopolar charge carrier injection and bipolar charge carrier injection regime.

The Space Charge Limited Current (SCLC) methods were applied to the study of charge carrier transport.

Ar elektrovērpšanas metodi iegūtu PEDOT:PSS saturošu nanošķiedru raksturošana

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

Elektrovērpšana ir izmantota kā jauna metode polimēru kompozītmateriālu ražošanai. Šīs metodes galvenais princips ir augstsprieguma izmantošana kā virzītājspēks nanošķiedru ražošanā no polimēru bāzes šķīdumiem.

Šajā darbā, lai iegūtu vadošus polimēru kompozītus, tika izmantotas ar elektrovērpšanas metodi un uz poli(etilēna oksīda) (PEO) bāzes veidotas nanošķiedras ar dažādu daudzumu poli(3,4-etilēndioksitiofēna) polistirēna sulfonātu (PEDOT: PSS). Lai raksturotu elektrovadītspēju iegūtajiem nanošķiedru tīkliem un pašām nanošķiedrām, tika izmantoti dažādu struktūru elektrodi. Litogrāfijas tehnika tika izmantota, lai izgatavotu elektrodus nanošķiedru elektrovadītspējas raksturošanai. Nanošķiedru tīkla morfoloģiju raksturošanai tika izmantota skenējošā elektronu mikroskopija.

Characterisation of electrospun PEDOT:PSS containing nanofiber

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

Electrospinning has been employed as a new method for the production of polymer composite materials. The main principle of this technique is the use of high voltage as driving force for the production of nanofibers from polymer-based solutions.

In this work, poly(ethylene oxide) (PEO) based composite nanofibers with different amounts of poly(3,4-ethylenedioxythiophene) polystyrene sulfonate (PEDOT:PSS) were produced using the electrospinning technique in order to obtain conductive materials.

Electrodes with different structures were used to characterize electrical conductivity for the obtained nanofiber networks and the nanofibers themselves. Lithography workflow was used to fabricate electrodes for nanofiber electrical conductivity characterization. Scanning electron microscopy was used to characterize morphology of nanofiber network.

Trifenilamīna atvasinājumu molekulu ģeometrijas parametru atkarība no izvēlētās aprēķinu metodes un molekulas uzbūves

Roberts Ziedīns¹, Igors Mihailovs^{1,2}, Mārtiņš Rutkis¹

¹Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

²Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte

Trifenilamīnu atvasinājumi ir vielu grupa, ko plaši izmanto dažādajās organiskās elektronikas un fotonikas ierīcēs, kā, piemēram, organiskās gaismu emitējošās diodēs. Tajā skaitā pēdējā gadu desmitā organiskās elektronikas laukā novērojama nezūdoša interese par termiski aktivēto aizkavēto fluorescenci, kuru uzrāda arī trifenilamīna fragmentu saturošie savienojumi. Tā kā jebkurš aprēķins sākas ar molekulas ģeometrijas optimizēšanu, ir ļoti svarīgi izvēlēties pietiekami labu aprēķinu metodi tai. Lai gan lielākai daļai molekulu var iegūt labus rezultātus ar praktiski visām plaši izmantotajām metodēm, tādām vielām kā trifenilamīni nav tik vienkārši paredzēt elektronisko un stērisko efektu kopīgās ietekmes rezultātu. Tādēļ tika nolemts izmēģināt vairākas metodes un salīdzināt ar atskaites metožu rezultātiem.

Tika salīdzinātas HF-3c, B3LYP un PBEh-3c metodes; dažām molekulām aprēķini tika veikti arī ar ω B97X-D/SVP un augstas precizitātes DSD-PBEB95-D3BJ ar bāzes funkciju kopu cc-pVTZ.

Rezultātā iegūst ļoti neviennozīmīgus rezultātus. B3LYP skaidri apraksta vairākus BLA gadījumus, bet citus labāk apraksta HF-3c; B3LYP izdod neparastu rezultātu, ka saite starp aromātisko gredzenu un centrālo N atomu ir garāka gredzenam, kas satur spēcīgu elektronakceptoru grupu. PBEh-3c negaidīti dod diezgan viduvējus rezultātus. Visas metodes paredz, ka difenilpirid-2-ilamīniem ir liela asimetrija starp fenilgredzeniem. Kopumā jāsecina, ka pētījumi jāturpina.

Dependence of geometry parameters of triphenylamine derivatives on the selected computational method and structure of the compound

Roberts Ziedīns¹, Igors Mihailovs^{1,2}, Mārtiņš Rutkis¹

¹Institute of Solid State Physics, University of Latvia

²Institute of Applied Chemistry, Riga Technical University

Triphenylamine derivatives are a group of substances widely used in various organic electronics and photonics devices, such as organic light emitting diodes. Particularly, during the last decade in the field of organic electronics, there is a continuing interest in thermally activated delayed fluorescence, also in compounds containing triphenylamine moieties.

Since any calculation starts with optimizing the geometry of the molecule, it is very important to choose a good calculation method for it. While most molecules can produce good results with virtually any among the widely used methods, it is not easy to predict the combined effects of electronic and steric effects on substances such as triphenylamines. Therefore, it was decided to try several methods and compare with the results of the reference methods.

HF-3c, B3LYP and PBEh-3c methods were compared; for some molecules, calculations were also performed with ω B97X-D/SVP and high-precision DSD-PBEB95-D3BJ with the base function set cc-pVTZ.

The results are quite ambiguous, though. B3LYP describes well several cases of BLA, while others are better described by HF-3c; B3LYP gives the unusual result that the bond between the aromatic ring and the central N atom is longer for a ring containing a strong electron-acceptor group. PBEh-3c gives quite mediocre results unexpectedly. All methods assume that diphenylpyrid-2-ylamines have a high asymmetry between phenyl rings. In conclusion, the studies need to be continued.

The financial support of Latvia-Lithuania-Taiwan project LV-LT-RW/2018/14 is greatly acknowledged.

Trešās-kārtas nelineāri optisko efektu mērīšanas metodoloģija Z-scan metodei

Arturs Bundulis, Mārtiņš Rutkis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Jau daudzus gadus zinātniskās grupas strādā, lai pārietu uz pilnīgi optisko telekomunikāciju sistēmu, kurā būtu iekļauti elementi datu pārraidei, apstrādei un glabāšanai. Kaut arī šajā jomā ir veikti daudzi nozīmīgi darbi un ir izveidoti neatkarīgi elementi datu pārraidei, kā arī apstrādei, pilnīgi optiskās sistēmas joprojām ir tālu no esošās elektriskās sistēmas aizstāšanas, jo tā ir pārāk neefektīva. Galvenais iemesls šim ir tas, ka šajās sistēmās izmantotie trešās-kārtas nelineārie optiskie (NLO) materiāli nav pietiekami efektīvi. Sakarā ar šo nelineāro optisko materiālu pētījumi joprojām ir ļoti aktuāla joma, taču trūkst stingri definētas metodoloģijas materiāla raksturošanai.

Šajā darbā mēs pētījām, kā dažādi eksperimentālie aspekti ietekmē NLO mērījumus, un mēģinājām noteikt metodes, lai atšķirtu dažādus procesus, kas var izraisīt optiskas izmaiņas. Ņemot vērā, ka termiskie efekti, dažādi molekulārie procesi un citi nevēlami efekti var izraisīt NLO īpašību pārvērtēšanu, šo efektu atdalīšana ir būtiska korektas metodoloģijas ieviešanai. Šajā darbā mēs izmantojām Z-scan metodi, lai izpētītu divus trešās-kārtas NLO efektus - Kerra efektu un divu fotonu absorbciju. Šī metode tika izvēlēta, jo tā var vienlaikus izmērīt abus efektus.

Šī darba izstrādāšanu atbalsta ERAF 1.1.1.1 aktivitātes projekts Nr. 1.1.1.1/16/A/046 "Oriģinālu organisko materiālu iespēju demonstrēšana Fotonisko Ierīču Prototipos".

Third-order nonlinear optical measurement methodology using Z-scan

Arturs Bundulis, Martins Rutkis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

For many years scientific groups has worked to step towards an all-optical telecommunication system, that would incorporate elements for data transmission, processing and storage. Although many significant works have been carried out in this field and independent elements for data transmission as well as processing has been presented, all-optical system is still far from replacing electrical systems due to it being too inefficient. This is mainly due to third-order nonlinear optical (NLO) materials used in these systems not being efficient enough. Due to this nonlinear optical material studies still is a very essential field but is lacking a correct methodology for material characterization.

In this work we studied how different experimental aspects NLO measurements and tried to establish methods to differ between various processes that can induce optical changes. This is essential as thermal effects, various molecular processes and other unwanted effects can lead to large overestimation of NLO properties. In this work we used Z-scan setup to study two third-order NLO effects - Kerr effect and Two-photon absorption. This method was chosen as it can simultaneously measure both effects.

This material is based upon work supported by the ERDF 1.1.1.1 activity project Nr. 1.1.1.1/16/A/046 'Application assessment of novel organic materials by prototyping of photonic devices'.

11. februāris

ORGANISKIE MATERIĀLI II

Organisko Lauka Efekta Tranzistoru izstrāde un pielietojums pusvadītāju lādiņnesēju kustīguma noteikšanā

Mārcis Lielbārdis, Aivars Vembris, Roberts Rimša
Latvijas Universitātes Cietvielu Fizikas Institūts

Organiski pusvadītāji savu īpašību dēļ ļauj veidot elastīgas elektroniskās iekārtas. LU CFI Organisku Materiālu Laboratorijā tiek pētīti materiālu pielietojumi organiskās gaismu izstarojošās diodēs un organiskos fotoelektriskajos elementos (saules baterijās). Pusvadītāja lādiņnesēju kustīgums ir svarīgs parametrs tā pielietojuma novērtēšanai. Organiskā lauka efekta tranzistora mērījumos to var noteikt.

Darba gaitā ir izveidota procedūra organisku lauka efekta tranzistoru izveidošanai un iekārta to parametru mērīšanai. Izveidotā mērījumu sistēma tika pārbaudīta ar paraugu, kurā izmantots organiskais pusvadītājs ar zināmiem parametriem.

Kā tranzistoru aizvara (*gate*) elektrods tiek izmantots Indija-Alvas oksīds (ITO), kā dielektriskais slānis – SU-8 fotorezists, uz kura uzputināts 20 nm Hroma slānis adhēzijai un 100 nm Vara slānis, kurus ar attīstītu AZ-1518 fotorezistu noņem, atstājot izteces (*source*) un noteces (*drain*) elektrodus ar 10, 20 un 30 mikrometru atstarpēm, uz kurām tālāk uzņests TPD kā pusvadītājs.

Iegūtajiem paraugiem tika mērītas strāvas atkarības no sprieguma, no mērījumiem noteikti vielas parametri, salīdzināti ar literatūrā atrodamajiem un tika novērtēta iekārtas mērījumu kvalitāte.

Development of Organic Field-Effect Transistors and their use in determining charge carrier mobility of semiconductors

Mārcis Lielbārdis, Aivars Vembris, Robert Rimsa
Institute of Solid-State Physics, University of Latvia

Organic semiconductor properties allow production of elastic electronic devices. In the UL ISSP Laboratory of Organic Materials, applications of materials in Organic Light-Emitting Diodes and organic photovoltaics are being studied. Charge carrier mobility is an important parameter in estimating the applications of a semiconductor. It can be determined by measuring the parameters of an organic field-effect transistor. In this work, a procedure for developing organic field effect transistors, and an experimental set-up for measuring their properties were developed. The measurement system was tested with a sample, using a semiconductor material with known parameters.

Indium-Tin Oxide (ITO) is being used as the gate electrode, SU-8 photoresist as the dielectric material, which was coated with 20 nm Chrome adhesion layer and 100 nm Copper layer, which are then removed, using a layer of developed AZ-1518 photoresist, leaving source and drain electrodes with 10, 20 and 30 micrometer gaps, which are then coated with TPD as a semiconductor.

Current - voltage (I-V) characteristics were measured on the resulting samples, the results were used for calculating the properties of the semiconductor and comparison to literature was made to estimate the quality of measurements.

Dopētu PMMA struktūru veidošanas metodika

Anete Bērziņa¹, Arturs Bundulis¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Mūsdienās komunikāciju sistēmās jau tiek pielietotas optiskas ierīces kombinācijā ar elektriskām iekārtām. Lai pārietu uz pilnīgi optiskām iekārtām, nepieciešams izmantot nelineāri optiskus materiālus, tātad plaši izmantotie silīcija savienojumi šādai sistēmai nederēs. Cita alternatīva būtu optisko fotorezistu izmantošana, taču tiem arī ir pārāk vājas nelineāri optiskās īpašības. Tāpēc izmantojam dopētas viesis-saimnieks sistēmas. Mēs kā matricas materiālu izmantojam PMMA, ko ir viegli izmantot kā matricu savienojumiem ar citiem organiskiem materiāliem ar izteiktām nelineāri optiskām īpašībām.

Šī darba mērķis ir izstrādāt metodiku dopēta PMMA paraugu veidošanai. Izgatavojot paraugus, organisko šķīdumu ar PMMA un aktīvo organisko vielu uzklāj uz stikla ar rotējošā diska metodi. Parasti PMMA tiek apstrādāts ar elektronu staru litogrāfiju, kas ir ļoti laikietilpīgi. Lai samazinātu izgatavošanas izmaksas, laiku un saglabātu PMMA kārtiņas kvalitāti, mēs izmantojam UV lampu PMMA izgaismošanai, caur izveidotu vēlamās struktūras masku uz parauga. Līdz ar to uz parauga uzputina alumīniju, kas pasargā PMMA no ultravioletā starojuma. Pēc tam ar rotējošā diska metodi uzklāj fotorezistu un ar lāzera ierakstu litogrāfijas palīdzību veido nepieciešamās struktūras. Lai šo struktūru pārnestu uz organisko kārtiņu, paraugs tiek kodināts, izmantojot slapjo kodināšanu. Līdz ar to rezultātā esam ieguvuši planāru paraugu ar organisku PMMA struktūru.

Doped PMMA structure manufacturing workflow

Anete Berzina¹, Arturs Bundulis¹

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

Nowadays people are already using optical devices combined with electrical devices in communication systems. In order to move towards an all-organic device, we need to use nonlinear optical materials and widely used pure silicon compounds are not gonna work. Other alternative would be optical photoresist, but they as well have too low nonlinear optical properties. Therefore we use doped host-guest systems. As the base material we are using PMMA, which is also easily used as a matrix to combine it with other organic materials that would have better nonlinear optical properties.

The main target of this work is to develop a method for doped PMMA structure manufacturing. To prepare samples a solution of PMMA and organic compound was applied on substrates using spin-coating method. Commonly PMMA is processed with electron beam lithography, but it takes a lot of time. In order to reduce the expenses, save time and the quality of PMMA layer, we used an UV lamp through a mask on sample. To protect PMMA from UV light, we created Aluminium layer by using vacuum deposition. Next we added a photoresist layer on top by using spin-coating method and exposed it with optical lithography. In order to transfer this structure to the organic layer, we used wet etching. As a result we have developed a planar sample with organic PMMA structure.

Pastiprinātās spontānās emisijas parametru noteikšana sarkanās gaismas emitējošām krāsvielām plānās kārtiņās

Patricija Paulsone¹, Elmārs Zariņš², Kristīne Lazdoviča², Valdis Kokars², Aivars Vembris¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Lietišķās ķīmijas institūts*

Organisko lāzeru aktīvajās vidēs kā vienu no vielām var izmantot sarkanās gaismas emitējošo krāsvielu 6-(terc-butil)-4H-pirān-4-ilidēnmalonitrils (DCM). Galvenais DCM molekulas trūkums ir tās kristalizācija, kas samazina optiskās īpašības gaismas pastiprināšanas cietā sistēmā. Lai novērstu kristalizēšanos, tai klāt tiek pievienotas dažādas telpiskās grupas, kas novieto molekulas tālāk vienu no otras.

Darba gaitā 12 jauni sintezētām vielām tika pagatavotas plānās kārtiņās ar rotējošā diska metodi. Kārtiņām tika veikti absorbcijas spektra, biezuma, pastiprinātās spontānās emisijas (ASE) un pastiprinājuma koeficienta mērījumi, kā arī katram paraugam tika noteikts fotoluminiscences kvantu iznākums. ASE un pastiprinājuma koeficienta mērījumiem tika izmantots nanosekunžu impulsu lāzers un paraugi tika ierosināti ar starojumu diapazonā no 460 nm līdz 560 nm, kas ir attiecīgo vielu absorbcijas maksimums.

Apkopojot datus, tika salīdzināti ASE rezultāti dažādu vielu un biezumu paraugiem un tika izdarīti secinājumi par elektronu akceptoru un donoru grupu ietekmi uz ASE parametriem.

Determination of amplified spontaneous emission parameter of red light emitting chromophores in thin films

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

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

²*Institute of Applied Chemistry, Riga Technical University*

Red light emitting dye 6- (tert-butyl) -4H-pyran-4-ylidenemalononitrile (DCM) can be used as a laser dye in light amplifying medium. The main disadvantage of DCM molecule is its crystallization that reduces optical properties of the light amplifying system. To prevent crystallization various bulky groups are added to the molecule, which place the molecules further apart from each other.

In this work, thin films from 12 new synthesized compounds were prepared by spin coating method. Absorption spectra, thickness, amplified spontaneous emission (ASE) and gain coefficients were measured and photoluminescence quantum yields were determined for each sample. A nanosecond pulse laser was used to measure ASE and gain coefficients. Samples were excited by radiation in the range from 460 nm to 560 nm, which are the absorption maximum for each compound in thin film.

The acquired data shows comparison of the ASE results for samples with various compounds and film thickness. Conclusions were made on the effect of electron acceptor and donor groups on ASE parameters.

The financial support of European Regional Development Fund within the Project No. Nr.1.1.1.1/16/A/046 is greatly acknowledged.

Jaunu organisko TADF savienojumu optiskie pētījumi zilās gaismas emitējošām diodēm

Margarita Anna Zommere¹, Aivars Vembris¹, Saulius Grigalevicius²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Polimēru ķīmijas un tehnoloģijas departaments, Kauņas Tehnoloģiskā Universitāte*

Organiskās gaismas emitējošās diodes (OLED) arvien plašāk tiek pielietotas displejos tīrās krāsas un augstās efektivitātes dēļ. TADF (Termiski aktivētas aizkavētās fluorescences) materiāli ir jaunākās paaudzes savienojumi, kuriem piemīt 100% ierosināto stāvokļu konvertācija gaismā.

Darba gaitā tika pētīti divu veidu TADF savienojumi - difenilsulfonu un benzofenonu atvasinājumi ar karbazola grupām, ar mērķi atrast potenciālu zilās gaismas emiteri. Skābekļa klātbūtne šāda tipa savienojumiem ir kritiska, jo tā mijiedarbojas ar tripleta ierosinātiem stāvokļiem un būtiski samazina TADF savienojuma emisiju. Tāpēc šādu vielu īpašību pierādīšanai tika apskatīti savienojumi degazētos un nedegazētos šķīdinātajos. No šādiem pašiem šķīdumiem tika veidotas arī plānas kārtiņas. Visiem savienojumiem tika izmērītas absorbcijas un emisijas īpašības gan šķīdumos, gan plānās kārtiņās. Vielu emisijas īpašības bija atšķirīgas nedegazētā un degazētā šķīdumā, kas liecināja par šo savienojumu TADF īpašībām. No dotajiem savienojumiem tika pagatavoti OLED ar struktūru ITO/PEDIT:PSS (40nm)/Emitters/TPBi(25nm)/LiF(1nm)/Al(120nm). Labākie savienojumi uzrādīja spilgtumu virs 500 cd/m².

Optical studies of new organic TADF compounds for blue light emitting diodes

Margarita Anna Zommere¹, Aivars Vembris¹, Saulius Grigalevicius²

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

²*Department of Polymer Chemistry and Technology, Kaunas University of Technology*

Organic light emitting diodes (OLED) are becoming more widely used in displays due to the pure colour and high efficiency. TADF (Thermally activated delayed fluorescence) materials are the latest generation of OLED technology, which has 100% of the conversion of excited states into light.

The research work has been done for two types of TADF compounds considered - diphenylsulfone and benzophenone derivatives with carbazole groups. The aim of the study was to find potential blue light emitters. The presence of oxygen for such compounds is critical, because it interacts with the triplet states and significantly reduces the emission intensity. Therefore, to prove TADF properties of investigated compounds, the optical properties were examined in both degassed and non-degassed solvents. Thin films were also prepared from the same solutions. For all compounds, the absorption and emission were measured in both solutions and thin layers. The emission properties were different in the non-degassed and degassed solution, which proved the TADF properties of these compounds. From given compounds basic structures of OLEDs were prepared: ITO/PEDIT:PSS(40nm)/Emitters /TPBi(25nm) /LiF(1nm)/Al(120nm). The most prospective compounds showed brightness above 500 cd/m².

12. februāris

**FOTONIKA UN
NANOMATERIĀLI**

Latvijas Universitātes Fizikas un matemātikas fakultātes sākums

Jānis Jansons

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Šogad apīt 80 gadi kopš Latvijas Universitātē (LU) sāka izveidot Fizikas un matemātikas fakultāti (FMF) Latvijas pirmajā padomju okupācijas laikā 1940./41. mācību gadā, sadalot divās daļās Matemātikas un dabas zinātņu fakultāti. Sākoties pēc gada vācu nacistu okupācijai, 1941. gada 1. jūlijā sasauktā ārkārtas Universitātes Padomes sēde nolēma atjaunot pirmspadomju laika LU Satversmi, struktūru un darbības kārtību. Tikai pēc atkārtotās padomju okupācijas Otrā Pasaules kara beigās 1944. gada rudenī tika atjaunota FMF (tagad – Fizikas, matemātikas un optometrijas fakultāte).

Referātā apskatīta fizikas un matemātikas studiju priekšvēsture, FMF dibināšana pirmajā padomju okupācijas laikā 1940./41. mācību gadā, pārvērtības vācu nacistu okupācijas laikā un FMF attīstība līdz 1958. gadam otrajā padomju okupācijas laikā.

Beginning Faculty of Physics and Mathematics of the University of Latvia

Janis Jansons

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

80 years have passed since the establishment of the Faculty of Physics and Mathematics of the University of Latvia. The article deals with the history of physics and mathematics studies and the establishment of the Faculty of Physics and Mathematics during the first Soviet occupation in 1940/41 academic year, transformations during the German Nazi occupation, rebuilding of the faculty after the war, and development until 1958 during the second Soviet occupation.

Hologrāfiskās litogrāfijas pielietošana materiālu virsmas nanostrukturēšanai

Jānis Teteris

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Ir zināms, ka optiskā diapazona virsmas plazmonu efektu iegūšana metālos un metālu oksīdos ietver tādu virsmu izgatavošanu, kurām ir raksturlielumi ar izmēru <400 nm. Viens no veidiem, kā to izdarīt, ir hologrāfiskās litogrāfijas tehnoloģijas izmantošana. Šajā ziņojumā tiks apskatīta hologrāfiskā litogrāfija un veikts tās salīdzinājums ar parastajām optiskās litogrāfijas tehnoloģijām. Tiks apskatīti tieši ieraksta fotorezisti, gan organiskos, gan neorganiskos amorfos savienojumos, kuru darbības pamatā ir fotoinducētā masas pārvietošana, kā arī to praktiskais pielietojums. Izmantojot imersijas hologrāfisko litogrāfiju, virsmas reljefa režģus ar periodu ~ 150 - 250 nm var izgatavot ar 491 nm lāzera ierakstu. Režģi tika ierakstīti amorfās halkogenīdu kārtiņās ar imersijas metodi. Režģa periods, krustojoties diviem gaismas stariem prizmā ar laušanas koeficientu n var izteikt kā $\Lambda = \lambda_0 / 2 n \sin\theta$, kur λ_0 ir gaismas viļņa garums vakuumā, bet θ ir pusleņķis starp gaismas stariem prizmas iekšpusē. Tika izmantotas taisnleņķa prizmas ar $n = 1.5 - 2.6$. Amorfas As-S-Se kārtiņas ar optisko laušanas koeficientu $n = 3.2$ pie 491 nm tika lietotas kā fotorezists virsmas reljefa režģu ierakstam. Imersijas prizmu pielietošana hologrāfiskajā ierakstā dod iespēju samazināt režģa periodu n reizes. Apskatīsim provizoriskus rezultātus virsmas strukturēšanā ar tiešo ierakstu, izmantojot lāzeru fotoinducētu kodināšanu, kā arī fotoelektroķīmisko kodināšanu uz metāliem un metālu oksīdiem.

Application of holographic lithography for material surface nanostructuring

Jānis Teteris

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

It is known that the production of optical range surface plasmon effects in metals and metal oxides involves making surfaces which have features with the sizes of <400 nm. One of the ways to do this is by using holographic lithography technology.

In this report the holographic lithography will be discussed and its comparison with conventional optical lithography technologies will be done. The present state of research and practical application of direct recording photoresists based on photoinduced mass displacement both in organic and inorganic amorphous compounds has been examined. By means of immersion holographic lithography the surface relief gratings with a period of ~150 – 250 nm can be fabricated with a 491 nm laser recording.

The grating period for two intersecting light beams in a coupling prism with refractive index n can be expressed as $\Lambda = \lambda_0 / 2 n \sin\theta$, where λ_0 is the wavelength of laser light in vacuum, n is refractive index of the prism and θ is the half-angle between the laser beams inside the prism. The right angle prisms with $n = 1.5 - 2.6$ were used. A prism serves as an immersion medium and n times decreases the period of the recorded grating.

We present preliminary results of direct writing of submicron patterns by the use of laser-photoinduced etching as well as photo-electrochemical etching on metals and metal oxides. It is believed that this new anisotropic photoetching process may find many lithographic applications in microelectronics and surface science.

Redzes parametri izkliedes klātbūtnē un lietojot individuāli pasūtītas kontaktlēcas

Māris Ozoliņš,^{1,2} Nicola Rizzieri³, Varis Karitāns^{1,2}

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu Fizikas Institūts*

²*Latvijas Universitāte, Fizikas, matemātikas un optometrijas fakultāte*

³*Rizzieri Optometriisti*

Mēs mērījām: a) cilvēka acs aberācijas bez un ar kontaktlēcām (CL), kuras novērš augstākās pakāpes aberācijas; b) redzes izšķirtspēju un kontrasta jutību apstākļos, kad pielietotie filtri simulē papildus izkliedi; kā arī c) novērtēta aberācijas un izkliedes izsmērētā acs punktu izkliedes funkcija PSF uz tīklenes. Pacienta acu aberācijas mērītas ar aberometru Keratron®Onda; vai, izpētot izkliedes efektus, ko radīja PRO-MIST # 1-5 filtri modeļa acī, izmantojot MultiSpot-2500 hartmana-šaka sensoru. Izkliedētās gaismas izraisītā PSF izplūde lielos leņķos tika vizualizēta, mērot ar fotokameras Olympus sensoru ar pikseļu soli 4µm un 14 bitu izšķirtspēju pie 405, 532, 670 nm. Redzes uzlabošanās, pielietojot individuāli piemērotās kontaktlēcas CL tika salīdzināta ar parasto briļļu lēcu pielietošanas gadījumiem. Gaismas izkliedes klātbūtne (izmantojot acu priekšā plānus PRO-MIST filtrus līdzīgi kā autoriem: *Ginis et al., JOV 12(3), 1–10, 2014*) neatklāja ievērojamas hartmana-šaka diagrammas maksimumu centru nobīdes (mērot pie 860 nm). Tomēr PSF izplūšana, ko izraisa redzamās gaismas daļā PRO-MIST filtri, plešas līdz leņķiem $\pm 5^\circ$. Šīs komponentes radītais gaismas intensitātes pjedestāls ievērojami samazina PSF un Strēla attiecības vērtības, un samazina stimula kontrasta vērtības uz acs tīklenes.

Visual merits of individually tailored contact lenses in presence of light scattering

Maris Ozolinsh,^{1,2} Nicola Rizzieri³, Varis Karitans^{1,2}

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

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

³*Rizzieri Optometriisti*

We measured and calculated - a) human eye aberrations without and with contact lenses (CL) eliminating higher order aberrations; b) visual resolution and contrast sensitivity in conditions when additional scattering is induced by special filters; and c) calculated point spread function PSF and other retinal visual merits. Aberration errors of patient eyes were measured by Keratron®Onda, or studying scattering effects caused by PRO-MIST #1-5 filters in modified model eye by hartman-shack sensor of MultiSpot-2500. Wide angle PSF caused by scattered light was detected using camera Olympus photodetector with pixel pitch of 4µm and 14-bit resolution at 405, 532, 670nm directly on detector or projected with lens. Applying of adapted custom-made CL for patients without any symptoms of eye cataract statically justified improvement of psychophysical perception characteristics comparing to conditions of use of conventional goggles. Presence of light scattering (experimental modeling using thin planeparallel PRO-MIST filters in front of eyes was similar to authors: *Ginis et al., JOV 12(3), 1–10, 2014*) does not reveal strong or remarkable shifts of hartman-shack graph maxima centers when measurements performed at 860 nm. However scattering (induced by PRO-MIST filters strongly dependent in visible) builds a PST pedestal stretching up to $\pm 5^\circ$. This light intensity pedestal reduces PSF peak-to-valley metrics that leads to decrease of vision contrast sensitivity and acuity. Impact of CL rotational and lateral shifts due to blinking is discussed. Studies done with support of PostDoc.No.1.1.1.2/16/I/001.

Reversīvu nitinola nanostruktūru veidošana ar fokusēta elektronu stara palīdzību

Jānis Snikeris, Vjačelsavs Gerbreders, Edmunds Tamanis
Daugavpils Universitātes G. Liberta Inovatīvās mikroskopijas centrs

Nitinols (NiTi) ir niķeļa un titāna sakausējums, kuram piemīt formas atmiņas īpašības. Kristālrežģa fāzu pārejas rezultātā, ko var izraisīt temperatūras paaugstināšanās, NiTi atgūst savu sākotnējo formu pēc mehāniskām deformācijām. NiTi formas atmiņas īpašības tiek plaši izmantotas medicīniskajās un industriālajās nozarēs.

Darba gaitā tika uzputinātas vairākas NiTi plānās kārtiņas uz kristāliska Si pamatnēm ar atomārajiem sastāviem no Ni₃₃Ti₆₇ līdz Ni₅₅Ti₄₅. Uzputināšana tika veikta ar DC magnetronu uzputināšanas metodi no Ni un Ti katodiem uz 650°C karstas pamatnes.

Apstarojot NiTi plānās kārtiņas ar fokusētu elektronu staru, notika nanopunktu veidošanās virsmas izplešanās rezultātā, kas tika konstatēta ar atomspēku mikroskopa mērījumiem. Uzsildot NiTi plānās kārtiņas līdz 100°C, tika novērota ievērojama nanopunktu tipluma samazināšanās. Lielākā novērotā nanopunktu tilpuma izmaiņa pirms un pēc uzsildīšanas bija 88%.

Šī eksperimenta rezultāti varētu atvērt jaunas NiTi pielietojuma iespējas nanotehnoloģijās.

Formation of reversible nitinol nanostructures by focused electron beam irradiation

Janis Snikeris, Vjaceslavs Gerbreders, Edmunds Tamanis
G. Liberts' Centre of innovative microscopy, University of Daugavpils

Nitinol (NiTi) is a metal alloy of nickel and titanium, which possesses properties of shape memory. NiTi is able to revert to its original shape after mechanical deformations due to phase shift of its crystal lattice, which can be triggered by raise of temperature. NiTi shape memory properties are widely used for medical and industrial applications.

In this work several NiTi thin films, with atomic percentages in range from Ni₃₃Ti₆₇ to Ni₅₅Ti₄₅, were sputtered on crystalline Si substrates. Sputtering was done by DC magnetron sputtering from Ni and Ti targets on substrate, which was heated to 650°C.

By irradiating NiTi thin films by focused electron beam, nanodots were formed due to surface expansion, which was observed by atomic force microscope measurements. After heating NiTi films to 100°C, volume of nanodots noticeably decreased. Largest observed decrease of nanodot volume before and after heating was 88%.

Results of this experiment could open up new applications of NiTi in nanotechnologies.

12. februāris

**ENERĢIJA,
MATERIĀLI ENERĢĒTIKAI**

No koksnes iegūta oglekļa piedeva litija jonu bateriju katodā

Emīls Vīgants¹, Gints Kučinskis², Gunārs Bajārs², Jānis Kleperis²

¹*Jelgavas Spīdolas ģimnāzija*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

LiFePO₄ (LFP) ir populārs litija jonu bateriju materiāls tā zemo izmaksu, toksicitātes un relatīvi augstās kapacitātes dēļ. Taču LFP ir arī savi trūkumi, tajā skaitā zema elektriskā un jonu vadītspēja. Zemās elektrovadītspējas dēļ LFP parasti pievieno elektrovadošas oglekļa piedevas. Mēs kā elektrovadošu piedevu pētām Latvijas valsts Koksnes ķīmijas institūtā (LKĶI) no koksnes iegūtu amorfa oglekļa piedevu.

Katodi tika pagatavoti laboratorijā, proporcijās 80:10:10 sajaucot attiecīgi LFP, polivinilidēnfluorīdu (PVDF) un elektrovadošas piedevas. Kā elektrovadoša piedeva tika izmantoti oglekļa kvēpi (carbon black), LKĶI sagatavotais materiāls vai abu iepriekš minēto piedevu maisījums masas attiecībā 1:1. Elektrodiem tika veikti elektroķīmiskie mērījumi, analizējot to lādiņietilpību kā funkciju no izmantotajām elektrovadošajām piedevām.

Rezultāti liecina, ka LKĶI uz koksnes bāzes veidotā elektrovadošā piedeva var darboties kā elektrovadošai piedeva LFP elektrodos. Salīdzinājums starp komerciālo elektrovadošo piedevu un LKĶI veidoto elektrovadošo piedevu pagaidām ir neviennozīmīgs.

Wood-Based Carbon Additive for Lithium-Ion Battery Cathodes

Emīls Vīgants¹, Gints Kučinskis², Gunārs Bajārs², Jānis Kleperis²

¹*Jelgava Spidola gymnasium*

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

LiFePO₄ (LFP) is a popular cathode material for lithium-ion batteries due to its low cost, toxicity and relatively high capacity. However, LFP also has its drawbacks, notably a low electrical and ionic conductivity. In order to enhance the electrical conductivity of LFP, highly conductive carbon is usually added to it. We are researching a wood-based amorphous carbon additive, created by the Latvian State Institute of Wood Chemistry (LSIWC).

The cathodes were created in a laboratory, consisting of LFP, polyvinylidene fluoride (PVDF) and the conductive additive at a mass ratio 80:10:10. Carbon black, wood-based carbon additive or a 1:1 mixture between the both were used as a conductive additive. Electrochemical measurements were made on the electrodes, analyzing the charge capacity as a function of the electron-conducting additives used.

The results show that the LSIWC wood-based carbon additive can be used as a conductive additive in LFP electrodes. The comparison between the commercially available additive and the one created by LSIWC is so far inconclusive.

The support of the project LZP FLPP Nr. LZP-2018/1-0194 “Nanostructured Nitrogenated Carbon Materials as Promoters in Energy Harvesting and Storage Technologies” is acknowledged.

Vara katalizatora elektroķīmiska izsēdināšana CO₂ reducēšanai par etilēnu

Jānis Kleperis¹, Ingars Lukoševičs¹, Sergejs Piskunovs¹, Pēteris Lesničenoks^{1,2}, Ainārs Knoks¹, Laimonis Jēkabsons¹

¹Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts,
²RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte

Katalītisko materiālu izstrādei pētnieki ir centušies uzlabot to veiktspēju, izmantojot dažādas stratēģijas, piemēram, nanostrukturēšanu, virsmas funkcionalizēšanu, leģēšanu un citas metodes, tādējādi katalītiskos metālus nostiprinot uz elektriski vadoša nesēja, parasti uz gāzes difūzijas elektroda pamatnes- oglekļa audums pārklāts ar aktīvās ogles masu.

Šajā darbā tika veikta vara elektroķīmiskā izsēdināšana uz Freudenberg-GDL pamatnes (katalizatora laukums 3,2 cm²). Pierādīts, ka impulsu izsēdināšanas procesā iegūst stabilāku un selektīvāku etilēna veidošanās katalizatora slāni ar 0,3 mA/cm² strāvas impulsa garumu 9 ms. Kā elektrolīts tika izmantots 1,25 M CuSO₄ šķīdums; izsēdināšanas laiks - 2 stundas, kopējais lādiņš - 30 C, nogulsnētā Cu slāņa biezums ap 3 μ, pārklājuma vienmērīgums - 77%. Mūsu teorētiskie aprēķini parāda, ka izdevīgākā vieta etilēna veidošanās starpproduktiem *CH₂ ir vara nanoklasteru/grafēna kontakta vieta.

Electrochemical deposition of copper catalyst for CO₂ reduction to ethylene

Jānis Kleperis¹, Ingars Lukosevics¹, Sergejs Piskunovs¹, Peteris Lesnicenoks^{1,2}, Ainārs Knoks¹, Laimonis Jēkabsons¹

¹Institute of Solid State Physics, University of Latvia,

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

For the development of catalytic materials, researchers have sought to improve their performance with various strategies, such as nanostructuring, surface functionalization, alloying and more, thereby fixing the catalytic metals on an electrically conductive carrier, usually on the gas diffusion electrode substrate – carbon cloth covered with activated carbon mass.

In this work electrochemical deposition of copper on Freudenberg-GDL substrate (catalyst area 3.2 cm²) was carried out. It was proved that more stable and selective to ethylene formation catalyst layer are obtained in pulse deposition process with 0.3 mA/cm² current pulse length 9 ms. As electrolyte the 1.25 M CuSO₄ solution was used; deposition time - 2 hours, total charge – 30 C, thickness of deposited Cu layer around 3 μ, coverage or uniformity of coating - 77%.

It is important to note that in this process the copper coating is formed as the monovalent copper oxide Cu₂O, which at negative potential is reduced to copper without changing morphology (SEM and XRD results). Our theoretical calculations shows that the most energetically favorable adsorption positions of *CH₂ intermediate is the top of Cu₇/graphene composite.

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

Mišina (Teslas) spoļu īpašības

Pauls Annuss¹, Alberts Kristiņš², Juris Veinbergs²

¹ Tallinas Tehnoloģiskās universitātes Tomasa Johana Zēbeka elektronikas nodaļa.

² Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Mishin (Teslas) spoles praktiskā izmantošana literatūrā tiek aprakstīta saistībā ar tā dēvēto biorezonances terapiju.

Ziņojumā īsi apskatīta šīs ārstēšanas metodes vēsture, kurai ir jau gandrīz simts gadi. Pagājušā gadsimta divdesmitajos gados Rojals Raifs (Royal Raymond Rife) paziņoja par īpašas rezonances frekvences atklāšanu, kura ir jebkuram dzīvam organismam, ieskaitot mikrobus un baktērijas. Turklāt viņš apgalvoja, ka ir iespējams ietekmēt šos organismus dziedināšanas nolūkos, ja minētā rezonances frekvence ir zināma. Raifs arī ziņoja, ka viņa izgudrotā optisko staru ierīce var iznīcināt patogēnus.

Viņa lietas turpinātāja Hilda Klarka (Hulda Regehr Clark) izmantoja savas konstrukcijas ierīci, literatūrā pazīstamu kā Zapper. Signāls no šīs ierīces tiek padots pacientam, izmantojot divus elektrodus. Apmēram pirms 15 gadiem Aleksandrs Mišins, izmantojot Nikolas Teslas idejas, izveidoja spoli, kura ļauj bezvadu režīmā iedarboties uz nevēlamiem mikroorganismiem un tādējādi atbrīvoties no tiem.

Pasreizējā pētījumā tiek pētītas Mišina spoļu īpašības un mērīti to parametri, lai sniegtu nelielu ieskatu par to lietderību un pielietojamību.

Features of the Mishin (Tesla) coil

Paul Annus¹, Alberts Kristiņš², Juris Veinbergs²

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

² Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Practical usage of the Mishin coil is claimed in the literature for so called bioresonance therapy.

Short overview is given of the almost hundred years old treatment method. In twenties of the last century Royal Rife claimed discovery of specific resonant frequency that is present for any living organism, including microbes and bacteria. Furthermore, he claimed, that it is possible to influence those organisms for healing purposes, if said frequency is known.

Rife also reported that an optical ray device of his invention could destroy the pathogens. Follower of the Rifes work Hulda Regehr Clark used device of her own construction, so called Zapper, which was connected to the human body with two electrodes. About 15 years ago, Alexander Mishin claimed invention of coils, based on the ideas of Nikola Tesla, which could wirelessly interact with pathogens and destroy them.

Current study is investigating features of the Mishin coils and measuring their parameters in order to give some insight on their usefulness and applicability.

12. februāris

STENDA REFERĀTI

Reaģentu un reakcijas apstākļu ietekme neaktivētu un fluora aktivētu silīcija dioksīda stikla sintēzēs

Karīna Taranda, Ivita Bite, Linards Skuja, Madara Leimane
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Augstas tīrības pakāpes sintētiskais SiO_2 stikls ir materiāls, ko izvēlas dziļi ultravioletā, radiācijas izturīgā un lieljaudas lāzera optikā, kā arī īpašās optiskajās šķiedrās. SiO_2 stiklu aktivējot ar F^- joniem, palielinās tā caurspīdīgums, lāzera/radiācijas izturība, VUV absorbcijas robeža novirzās uz īsākiem viļņu garumiem [1] un samazinās gaismas laušanas koeficients.

Darba laikā tika pētītas un atkārtotas neaktivētu un F-aktivētu SiO_2 stiklu sintēzes un mainīti to parametri, lai novērotu, kā šīs izmaiņas ietekmē stikla vizuālo izskatu, īpašības un sastāvu. Rezultātā divas sintēzes uzradīja sasniedzamos rezultātus: sintēze, kurā tika izmantoti reaģenti TEOS, EtOH, H_2O , HF [2] un sintēze, kurā tika izmantoti reaģenti TEOS, H_2O , HNO_3 , $\text{CH}_3\text{COONH}_4$ [3].

Iegūto SiO_2 stikla paraugu optisko īpašību raksturošanai tika izmantota Ramana spektroskopija. Savukārt, SiO_2 stiklu sastāva, struktūru un morfoloģisko īpašību raksturošanai tika izmantotas rentgenstaru difraktometrija, elektronu mikroskopija un enerģijas dispersīvā rentgenfluorescence.

Effect of reagents and reaction conditions on inactivated and fluorine activated silica glass syntheses

Karina Taranda, Ivita Bite, Linards Skuja, Madara Leimane
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

High purity synthetic SiO_2 glass is a material of choice for deep ultraviolet, radiation resistant and high power laser optics as well as special optical fibers. SiO_2 glass activation with F ions increases its transparency, laser / radiation resistance, shifts the VUV absorption limit to shorter wavelengths [1], and reduces the refractive index.

During the work, syntheses of inactivated and F-activated SiO_2 glasses were studied and repeated, and their parameters were changed to observe how these changes affect the visual appearance, properties and composition of the glasses. As a result, two syntheses showed achievable results: synthesis using TEOS, EtOH, H_2O , HF [2] and synthesis using TEOS, H_2O , HNO_3 , $\text{CH}_3\text{COONH}_4$ [3].

Raman spectroscopy was used to characterize the optical properties of the obtained SiO_2 glass samples. X-ray diffractometry, electron microscopy and energy dispersive X-ray fluorescence were used to characterize the composition, structures and morphological properties of SiO_2 glass.

[1] H. Hosono, M. Mizuguchi, L. Skuja, T. Ogawa, OPTICS LETTERS, 24 (1999) 1549.

[2] R. Maehana, S. Kuwatani, K. Kajihara, K. Kanamura, THE CERAMIC SOCIETY OF JAPAN, 119 (2011) 393

[3] K. Kajihara, M. Hirano, H. Hosono, CHEMCOMM, (2009), 2580

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

Nātrija fosfāta fosforiscentu stiklu īpašību salīdzināšana ar pulverveida stroncija alumināta īpašībām

Agnese Spustaka¹, Virgīnija Vītola¹, Ivita Bite¹, Donāts Millers¹, Laeticia Petit²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Tampere University of Technology*

SrAl₂O₄:Eu,Dy un citi ar eiropiju aktivēti alumināti ir ļoti efektīvi luminofori, kam raksturīga ilga pēcspīdēšana (fosforiscence) redzamajā spektrā, istabas temperatūrā. Lai paplašinātu izmantošanas iespējas, piemēram, optotehnikā, sensoru izveidē, saules paneļos u.c., tiek pētītas arī keramikas un stikli ar ilgu pēcspīdēšanu.

Darbā apskatīta SrAl₂O₄:Eu,Dy + xB (x=5 atom%, x=7 atom%) mikrodaļiņām aktivēta fosforicējoša fosfāta stikla izveide. Pētījuma gaitā tika pārbaudīts, kā atšķiras stikla matricā ievietotu daļiņu un atsevišķu mikrodaļiņu (pulvera) luminiscētās īpašības, lai novērtētu izmaiņas. Lai padarītu šo materiālu praktiski pielietojamu, tā pēcspīdēšanai jābūt salīdzināmai ar aluminātu pulveru fosforiscenci ilguma un intensitātes ziņā. Iegūtajiem paraugiem apskatīta daļiņu piejaukumu homogenitāte ar EDS metodi, kā arī apskatīta paraugu termostimulētā luminiscence, fotoluminiscence un rentgenluminiscence.

Apkopojot rezultātus, secināts, ka stikla matrica veiksmīgi aktivēta ar stroncija alumināta daļiņām un ir novērojama pēcspīdēšana, tomēr luminiscences intensitāte ir samazinājusies, kas varētu būt saistīts ar daļiņu degradāciju. Turpmākajos pētījumos būtu jāuzlabo daļiņu diverģēšana stikla matricā, lai iegūtu daļiņu telpisko sadalījumu matricā tuvu vienmērīgam.

Luminescence properties comparison between persistent luminescent sodium phosphate glasses with powder strontium aluminate

Agnese Spustaka¹, Virgīnija Vītola¹, Ivita Bite¹, Donāts Millers¹, Laeticia Petit²

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

²*Tampere University of Technology*

SrAl₂O₄:Eu,Dy, as well as other aluminates doped with europium, are very efficient luminophores characterized by long afterglow (phosphorescence) in the visible spectrum, room temperature. Ceramics or glasses with persistent luminescence have been of great interest as such materials could find applications in optoelectronics, sensors, etc.

This study is based on preparation of phosphate glasses with SrAl₂O₄:Eu,Dy + xB (x=5 atom%, x=7 atom%) microparticles using direct doping method. In this work phosphate glass with microparticles and strontium aluminate powder were compared in terms of luminescence properties. The practical applications of the afterglow of phosphate glasses should be comparable to the luminescence of powder of strontium aluminates in respect of duration and intensity. In this research were completed analysis of microparticles homogeneity with EDS, as well as luminescence characterization with thermally simulated, X-ray excited and photo luminescence.

Analysis of the experimental results showed that phosphate glasses revealing persistent luminescence were successfully prepared with strontium aluminate microparticles. However, the intensity of luminescence is significantly decreased due to microparticles degradation. In further research it is crucial to increase homogeneity of particles distribution in the host material.

Neaktivētā un Ga-aktivētā ZnO nanostruktūru sintēze

Mareks Senko, Ivita Bite, Agnese Spustaka, Donats Millers, Krišjānis Šmits
Latvijas Universitātes Cietvielu Fizikas Institūts

Cinka oksīds (ZnO) ir materiāls ar augstu ķīmisko un fizikālo izturību, elektrovadītspēju, optiskām īpašībām, salīdzinošu netoksiskumu, intensīvu un ātru luminescenci, kas piesaista plašu pētnieku interesi ar potenciālām izmantošanas iespējām vairāku industriju nozarēs. Pētījumi uzrāda, ka īpašības ietekmē III grupas elementi, tādi kā bors, alumīnijs, gallijs, indijs, jo tie iebūvējas ZnO kristālrežģī, uzlabojot optisko caurlaidību un vadāmību. Īpašības un izmantošanu ietekmē arī izvēlētajā ZnO sintēzes metode - sola-gēla, hidrotermālā, mikroviļņu asistētā metode.

Darba mērķos ietilpst ZnO scintilatoru efektivitātes pētīšana, veicot neaktivētā un Ga-aktivētā (0.2;0.4;0.6;0.8;1at.%) ZnO nanostruktūru sintēzi, izmantojot mikroviļņu asistēto un sola-gēla metodi. Salīdzināt iegūtos rezultātus un novērtēt sintēzes metodes kā arī Ga koncentrācijas ietekmi uz ZnO nanostruktūru luminescenci, morfoloģiju. Paraugu raksturošanai un īpašību noteikšanai izmantotas vairākas metodes: pulvera rentgendifraktometrija (XRD), skenējošā elektronu mikroskopija (SEM), transmisijas elektronu mikroskopija (TEM), rentgenstaru fluoroscences spektrometrija (EDX), fotoluminescence (PL), infrasarkanā Furjē spektroskopija (FTIR) un Ramana spektroskopija (RAMAN).

Un-doped and Ga-doped ZnO nanostructure synthesis

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

Zinc Oxide (ZnO) is a material with high chemical and physical stability, good optical properties, relative non-toxicity, intense and fast luminescence which attracts a great deal of research interest with potential applications in many industries. Studies show that properties can be improved with elements of III group (boron, aluminium, gallium and indium) as they incorporate in the crystal lattice and improve optical transmittance and electrical conductivity. The properties and application may also be affected by the chosen synthesis method - sol-gel method, hydrothermal method, microwave-assisted method and others

The objectives of the research include studying the effectiveness of ZnO scintillators, by synthesizing non-doped and Ga-doped (0.2;0.4;0.6;0.8;1at.%) ZnO using microwave-assisted synthesis and sol-gel method. Comparison of the obtained results and evaluation of the impact of gallium concentration on the luminescence and morphology of ZnO nanoparticles is presented. Several methods were used to determine and characterize the properties of samples: X-ray diffractometry (XRD), scanning electron microscopy (SEM), transmission electron microscopy (TEM), energy dispersive x-ray spectroscopy (EDX), photoluminescence (PL), Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) and Raman spectroscopy (RAMAN).

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

Neaktivēta un ar Li-aktivēta ZnO ieguve un īpašību salīdzinājums

Ramona Dūrena¹, Ivita Bite¹, Agnese Spustaka¹, Anzelms Zukuls²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Funkcionālo materiālu zinātniskā tehnoloģiju laboratorija*

Cinka oksīds (ZnO) ir platas aizliegtās zonas pusvadītājs ar lielu eksitonu saites enerģiju 60 mV, kādēļ ZnO eksitoni novērojami arī istabas temperatūrā. Lai ZnO īpašības pielāgotu nepieciešamajam pielietojumam, to aktivē ar dažādiem metālu joniem. Vairākos literatūras avotos ziņots, ka Li⁺ joni tā mazā rādiusa dēļ var aizvietot Zn²⁺ jonus ZnO kristālrežģī, kā arī iespiesties kristālrežģa starpmezglu telpā. Arī sintēzes metode ietekmē ZnO īpašības un pievienotā aktivatora inkorporāciju ZnO kristālrežģī, kā arī kristālu formu un izmērus.

Darba mērķis bija izpētīt Li⁺ jonu ietekmi uz ZnO kā scintilatora materiālu.

Darbā apskatīta neaktivēta ZnO sintēze un ar Li-aktivēta ZnO sintēze ar hidrotermālo un mikroviļņu asistēto sintēzes metodēm. Sintezēto paraugu Li⁺ jonu koncentrācija: 0, 0,5, 1, 3 un 5 %.

Iegūto materiālu struktūra un īpašību noteikšanai izmantotas vairākas metodes – rentgenstaru difrakcijas analīze (XRD), skenējošo elektronu mikroskopija (SEM), transmisijas elektronu mikroskopija (TEM), fotoluminiscence (PL).

Preparation of non-activated and Li-activated ZnO and characterization of properties

Ramona Durena¹, Ivita Bite¹, Agnese Spustaka¹, Anzelms Zukuls²

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

²*Research Laboratory of Functional Materials Technologies, Riga Technical University*

Zinc Oxide (ZnO) is a wide band gap semiconductor with high exciton energy 60mV, thus the excitons can be observed even at room temperature. To adapt the properties of ZnO to the application required, it is activated by various metal ions. It has been reported in several literature sources that Li⁺ ions, due to their small radius, can replace Zn²⁺ ions in the ZnO crystal lattice, as well as occupy interstitial position. The synthesis method also affects the properties of ZnO and the incorporation of the activator into the ZnO crystalline lattice, as well as the shape and size of the crystals. The aim of this work was to investigate the effect of Li⁺ ions on the properties of ZnO as a scintillator material.

In the present study non-activated ZnO samples and Li-activated ZnO samples were obtained by hydrothermal and microwave assisted synthesis methods. The concentration of Li⁺ ions in the synthesized samples were 0, 0.5, 1, 3 and 5%.

Several methods have been used to determine the structure and properties of the materials obtained – X-ray diffraction analysis (XRD), scanning electron microscopy (SEM), transmission electron microscopy (TEM), photoluminescence (PL).

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2019/6 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is gratefully acknowledged.

Ar hromu leģēta alumīnija oksīda izmantojamība dozimetrijā

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

Dozimetrija ir plaši izplatīta cietvielu fizikas nozare, kura pēta jonizējošā starojuma izsauktos elektroniskos procesus un specializējās jonizējošā starojuma detektēšanā un dozas noteikšanā. Materiāla dozimetriskās īpašības galvenokārt nosaka tā kristāliskās struktūras piejaukuma joni un lokālie matricas defekti, kuri veidojās ja piejaukuma jonam ir vēra ņemama izmēra vai oksidācijas pakāpes atšķirība.

Pētījuma galvenais mērķis ir pielāgot alumīnija oksīdu dozimetrijas prasībām, pētot hroma leģēšanas ietekmi uz luminiscences īpašībām ar nolūku palielināt lādiņnesēju ķērājcentru skaitu piejaukuma jona lokālajā apkārtnē.

Pētījumam tika sintezētas porainās $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Cr}$ mikrodaļiņas ar dažādām Cr koncentrācijām ar sol-gel metodi. Iegūtie dati norāda uz to, ka no visām pētītajām piejaukumu jonu koncentrācijām visaugstāko XRL un TSL signālu sniedz paraugs ar 0.2 wt% Cr_2O_3 . Veiktais pētījums piedāvā jaunu dozimetrisko materiālu ar vēlamām fiziskajām un ķīmiskajām īpašībām kā arī zemākām ražošanas izmaksām kā pašlaik plaši izmantotajiem dozimetriskajiem materiāliem.

Chromium doped alumina usability in dosimetry

Ernests Einbergs, Aleksejs Zolotarjovs, Krišjānis Šmits, Ivita Bite, Laima Trinklere
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Study of radiation induced electronic processes in materials precipitated a now widespread material science field called dosimetry, which specializes in ionizing radiation detection and quantification. The performance of most materials used for dosimetry applications is mainly governed by the impurity ions in the crystalline lattice coupled with lattice imperfections around them (with a meaningful difference in size or oxidation state compared to host ions).

In this study, we explored augmentation of luminescent properties of alumina caused by chromium ion doping, with a goal of increasing the quantity of charge carrier traps in the crystalline lattice.

For this study, porous $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Cr}$ microparticles were synthesized with sol-gel method. We have found that 0.2 wt% of Cr_2O_3 yielded the highest XRL and TSL readout of all the studied concentrations added to alumina during synthesis. Our results display a promising use case for Cr doped alumina. The conducted study provides information on a new alternative to the already existing ionizing radiation dosimetric materials with the desirable physical and chemical properties as well as relatively lower manufacturing cost.

The financial support of lzp 2018/1-0361 project is greatly acknowledged.

ZnO nanovadu izmantošana oksīdu pulveru maiņstrāvas elektroluminiscentajos elementos

Ēriks Vilunas, Katrīna Laganovska, Ivita Bite, Edgars Butanovs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Pulveru maiņstrāvas elektroluminiscentās (ACPEL) ierīcēm ir liels potenciāls izmantošanai displejos un liela mēroga apgaismošanai, tomēr šobrīd izmantotie sulfīdu materiāli ātri degradējas un ir ļoti jutīgi pret mitrumu, kas nozīmē, ka ir nepieciešama to iekapsulēšana. Tas palielina ražošanas izmaksas un ierobežo komerciālo izmantošanu. Stabilākie oksīdu materiāli varētu būt laba alternatīva, tomēr ilgu laiku tie ir tikuši uzskatīti par nepiemērotiem augstā darba sprieguma dēļ. Nesenie pētījumi liecina, ka ZnO nanovadu slāņa iekļaušana starp elektrodu un luminiscento slāni izraisa lauka pastiprināšanos un būtiski samazina sistēmas darba spriegumu.

Darba gaitā tika veikta ACPEL elementa izveidošana un tā īpašību pētīšana. ZnO nanovadi tika sintezēti uz ar indija alvas oksīdu (ITO) pārklātas stikla virsmas ar mikroviļņu asistētās sintēzes metodi un tie tika pārklāti ar fosforescento oksīdu pulveriem. Raksturošanai tika izmantota skenējošā elektronu mikroskopija (SEM), pulvera rentgendifraktometrija (XRD) un elektroluminiscence (EL).

Usage of ZnO nanowires in alternating current driven oxide powder electroluminescent elements

Ēriks Vilunas, Katrīna Laganovska, Ivita Bite, Edgars Butanovs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Alternating current driven powder electroluminescent (ACPEL) devices have great potential in display and large scale illumination applications, however the currently used sulfide materials degrade quickly and are highly sensitive to moisture, requiring encapsulation. This increases the costs of manufacturing and largely renders commercial applications non-viable. Oxide materials are more stable and would offer a good alternative, however, up until now they have been dismissed due to the need of high operating voltages. Recent studies have shown that incorporating a layer of ZnO nanowires between the electrode and the phosphoric layer creates a field enhancement effect and significantly reduces the operating voltage of the system.

In this work an ACPEL element was created and its properties researched. ZnO nanowires were synthesized on indium tin oxide (ITO) coated glass using microwave assisted synthesis and coated with phosphorescent oxide powders. For characterisation, scanning electron microscopy (SEM), powder x-ray diffractometry (XRD) and electroluminescence (EL) were used.

Sudraba nanodaļiņas un retzemju jonus saturošu oksifluorīdu stikla keramiku pētījumi

Kaspars Vītols, Meldra Ķemere, Andris Antuzevičs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Ar retzemju joniem aktivēta oksifluorīdu stikla keramika ir perspektīvs materiāls pielietojumam optiskās apgaismes ierīcēs, medicīnā, optiskās šķiedrās u.c. Sudraba joni un to apkopojumi (nanodaļiņas un nanoklāsteri) ir pielietojami medicīnā, optoelektronikā utt., turklāt tie spēj arī uzlabot retzemju jonu luminiscences efektivitāti.

Eu^{3+} jonu luminiscence ir oksifluorīdu stikla keramikā plaši pētīta, taču nav līdz galam izpētīta tās mijiedarbība ar sudraba joniem un nanodaļiņām. Darbā pētīta Ag nanodaļiņu veidošanās un Eu^{3+} luminiscences īpašības oksifluorīdu stikla keramikā.

Tika sintezēti trīs oksifluorīdu sērijas stikli ar sastāvu $14\text{K}_2\text{O}-13\text{KF}-8\text{YF}_3-6\text{Al}_2\text{O}_3-58\text{SiO}_2-0.1\text{SnO}_2$, kas aktivēti ar 0.1 mol% GdF_3 , 1mol% EuF_3 un AgNO_3 dažādās koncentrācijās (0, 0.005, 0.05 mol%). Karsējot stikla paraugus 500 - 750 °C temperatūrā 1-16 stundas, tika iegūti stikla keramikas paraugi. Paraugiem tika veikti luminiscences ierosmes, emisijas un absorbcijas, rentgenstaru difrakcijas (XRD) un elektronu paramagnētiskās rezonanses (EPR) mērījumi.

Stikla keramikā ar sudrabu parādās absorbcijas joslas (350-500nm), kas saistāmas ar virsmas plazmonu rezonansi, kura ir raksturīga metāliskām sudraba nanodaļiņām. Pie UV ierosmes novērota plata luminiscences josla, kas saistāma ar Eu^{2+} luminiscenci, sudraba jonu luminiscence nav novērota. Stikla keramikas Eu^{3+} luminiscences spektros novērojama nelielas joslu izmaiņas. XRD aina apstiprina K_3YF_6 nanokristālītu izveidošanos, bet tajā nav redzami sudraba nanodaļiņām raksturīgie maksimumi.

Studies of silver nanoparticles and rare earth ion containing oxyfluoride glass ceramics

Kaspars Vītols, Meldra Ķemere, Andris Antuzevičs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Oxyfluoride glass ceramics doped with by rare earth ions are a perspective material for use in optic lighting devices, medicine, optical fibers, etc. Silver ions and their clusters (nanoparticles and nanoclusters) can be used in medicine, optoelectronics, etc. Additionally, they can improve the efficiency of rare earth ion luminescence.

Eu^{3+} ion luminescence has been widely researched in oxyfluoride glass ceramics, and yet its interaction with silver ions and nanoparticles has not been fully explored. The formation of Ag nanoparticles and luminescence properties of Eu^{3+} in oxyfluoride glass ceramics are the focus of this study.

Three oxyfluoride series glass variants were synthesized with composition $14\text{K}_2\text{O}-13\text{KF}-8\text{YF}_3-6\text{Al}_2\text{O}_3-58\text{SiO}_2-0.1\text{SnO}_2$ which has been doped with by 0.1 mol% GdF_3 , 1mol% EuF_3 and AgNO_3 in different concentrations (0, 0.005, 0.05 mol%). Glass ceramic samples were obtained by heating glass samples at 500 – 700 °C temperature for 1-16 hours. Measurements of luminescence excitation, emission and absorption, as well as X-ray diffraction (XRD) and electron paramagnetic resonance (EPR) were performed on the samples.

Absorption bands (350-500nm) were observed in glass ceramics with silver, which are associated to surface plasmon resonance characteristic of metallic silver nanoparticles. Under UV excitation wide luminescence bands were observed, which can be associated with Eu^{2+} luminescence, silver ion luminescence was not observed. Slight changes of bands were observed in Eu^{3+} luminescence spectrum. XRD spectrum confirms K_3YF_6 nanocrystallite formation, but maximums characteristic of silver nanoparticles are not observed.

Cr³⁺ PARAMAGNĒTISKĀ ZONDE LaOCl

Haralds Ozols, Andris Antuzevičs, Guna Krieķe,
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Materiālu pētījumiem ar elektronu paramagnētiskās rezonanses (EPR) metodi kā aktivatoru tipiski izmanto Gd³⁺ vai Mn²⁺, tomēr, pētot dažādus aktivatorus LaOCl, netipisks EPR signāls tika novērots Cr³⁺.

Darba gaitā tika sintezēti LaOCl:Cr³⁺ paraugi ar dažādām Cr³⁺ koncentrācijām: 0.01 mol%, 0.1 mol% and 0.5 mol%.

LaOCl:Cr³⁺ EPR spektrs norāda uz superhipersīkstruktūru (shfs), ko varētu izskaidrot ar elektronu-kodolu mijiedarbību starp Cr³⁺ un apkārtējiem Cl kodoliem. Palielinot Cr³⁺ koncentrāciju paraugā, palielinās EPR spektra intensitāte, nepārbīdot shfs līnijas. Pētot parauga luminiscenci, tika noteikts, ka istabas temperatūrā luminiscence nav novērojama, bet zemākās temperatūrās luminiscences intensitāte ievērojami palielinās. Apkopojot rezultātus no eksperimentālajiem EPR un luminiscences datiem, kā arī modelējot EPR spektru, tiek veikti secinājumi par Cr³⁺ īpašībām LaOCl struktūrā.

Cr³⁺ PARAMAGNETIC PROBE IN LaOCl

Haralds Ozols, Andris Antuzevics, Guna Krieke
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

For electron paramagnetic resonance (EPR) studies of materials, activators such as Gd³⁺ or Mn²⁺ are typically used, however while studying different activators in LaOCl, an atypical EPR spectrum was observed for Cr³⁺.

In this work LaOCl:Cr³⁺ samples have been studied with different concentrations of Cr³⁺: 0.01 mol%, 0.1 mol% and 0.5 mol%.

EPR spectrum of LaOCl:Cr³⁺ consists of a superhyperfine structure (shfs) which can be explained with electron-nucleus interactions between Cr³⁺ and the surrounding Cl nuclei. The intensity of the EPR spectrum increases with increasing the Cr³⁺ concentration in the sample without shifting the shfs structure. Luminescence study of the material shows that there is virtually no luminescence at room temperature, however at lower temperatures luminescence intensity greatly increases.

Based on the EPR and luminescence experimental data and EPR spectra simulations, the properties of Cr³⁺ as an activator in LaOCl are discussed.

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

Jauna metode ar retzemju elementiem dopētu TiO₂ nanokristālisko pulveru iegūšanai un to fotokatalītiskās īpašības

R. Burve, P. Rodionovs, V. Serga, A. Krūmiņa
*Neorganiskās ķīmijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte*

Titāna dioksīds (TiO₂) ir pusvadītājs ar platjoslas enerģētisko spraugu, kurš kļuvis par vispopulārāko fotokatalizatoru vides problēmu risināšanai. Dabā TiO₂ ir sastopams trīs polimorfās kristāliskās modifikācijās: brukīts, anatāzs un rutilis. TiO₂ optiskās un fotokatalītiskās īpašības ir atkarīgas no tā kristāliskās struktūras. Turklāt ar dopanta palīdzību var uzlabot TiO₂ nanostruktūru absorbcijas īpašības un fotokatalītisko aktivitāti. Daudzsološi dopanti ir retzemju elementi (RE). RE elementu klātbūtne paaugstina fāžu pārejas no anatāza uz rutilu temperatūru.

Šajā pētījumā tika pagatavoti tīri un ar Ce-, Eu-, Gd-dopēti (0,5 un 5 mol%) TiO₂ nanokristāliski pulveri, izmantojot jaunu sintēzes paņēmieni – ekstrakcijas–pirolītisko metodi (EPM). Metālus saturošos ekstraktus (prekursorus) iegūst, veicot šķidrums ekstrakciju, kā ekstrahentu izmantojot baldriānskābi. Visi sintezētie prekursori un to maisījumi pētīti ar termogravimetrisko analīzi (TGA) un augsttemperatūras diferenciālo skenējošo kalometriju (HDSC). Pulveru iegūšanas nākamajā stadijā prekursori tika termiski apstrādāti. Tīru un ar RE dopētu TiO₂ pulveru kristalizācija un fāžu pārejas pētītas ar rentgenstaru difrakcijas (XRD) metodi kā funkcija no pirolīzes temperatūras un dopanta daudzuma. Iegūto pulveru fotokatalītiskā aktivitāte pētīta, fotokatalītiski sadalot metilēnzilo.

A new route for rare earth-doped TiO₂ nanocrystalline powders production and its photocatalytic properties

R. Burve, P. Rodionovs, V. Serga, A. Krumina
*Institute of Inorganic Chemistry, Faculty of Materials Science and Applied Chemistry,
Riga Technical University*

Titanium dioxide (TiO₂) is a large band gap semiconductor, which became the most popular photocatalyst to solve environmental problems. In nature TiO₂ has three polymorphic crystalline modifications: brookite, anatase and rutile. Optical and photocatalytic properties of TiO₂ depend on its crystalline structure. Moreover, absorption properties and the photocatalytic activity of TiO₂ nanostructures can be improved by doping. Promising dopants are rare-earth elements (RE). The presence of RE elements increases the temperature of anatase to rutile phase transition.

In the present work, a series of pure and Ce-, Eu-, Gd-doped (0,5 and 5 mol%) TiO₂ nanocrystalline powders were prepared by a new route – extraction–pyrolytic method (EPM). Metal containing extracts (precursors) were produced by liquid–liquid extraction using valeric acid as extractant. All produced precursors and its mixtures were investigated by thermogravimetric analysis (TGA) and high temperature differential scanning colometry (HDSC). As next step for powders production precursors were thermally treated. Crystallization and phase transitions of undoped and RE-doped TiO₂ powders were studied as a function of pyrolysis temperature and dopant amount by X-ray diffraction (XRD) method. Photocatalytic activity of produced powders was studied by photocatalytic degradation of methylene blue.

Radionuklīdu fitoremediācija no ūdenstilpnēm izmantojot vetīveru *Chrysopogon zizaniodes*

Kārlis Brants¹, Daina Riekstiņa², Vladimirs Gostilo³, Ģederts Ieviņš¹, Gunta Ķizāne⁴

¹Latvijas Universitātes Bioloģijas fakultāte

²Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

³Baltic Scientific Instruments

⁴Latvijas Universitātes Ķīmiskās fizikas institūts

Patreiz izmantotās fizikālās un ķīmiskās radioaktīvā piesārņojuma attīrīšanas metodes ir dārgas un sarežģītas. Salīdzinoši lēta un iedarbīga vides piesārņojuma attīrīšanas tehnoloģija ir fitoremediācija. Darba mērķis bija novērtēt vetīvera *Chrysopogon zizaniodes* izmantošanu ūdenstilpņu attīrīšanai no radionuklīdiem. Tika noteikta uzkrātā dabīgo radionuklīdu K-40, Ra-226 un Th-228 aktivitātes koncentrācija brīvā dabā ūdenstilpnēs augušie augiem. Eksperimenti tika veikti divās Rīgas ūdenstilpnēs: Kīleveina grāvī un Viesturdārza dīķī, augus izvietojot uz plošiem. Pēc 10 nedēļu augšanas augus novāca, izžāvēja un veica gamma-spektrometrijas mērījumus atsevišķi vetīvera saknēm un dzinumiem (paraugu tilpums – 1000 ml, paraugu masa 15 – 29 g, mērīšanas ilgums – 24 stundas). Abu ūdenstilpņu paraugos zemāka radionuklīdu koncentrācija tika konstatēta augu saknēs, pie kam K-40 aktivitāte bija augstāka par Ra-226 un Th-228 aktivitāti. Mērījumos noteiktā K-40 aktivitāte augu dzinumos bija 1150 Bq/kg Kīleveina grāvī un 870 Bq/kg Viesturdārza dīķī. Turpinot radionuklīdu fitoremediācijas pētījumus ar vetīveru, būtu nepieciešams veikt līdzīgus pētījumus mākslīgā vidē, kas satur Cs-137.

Phytoremediation of radionuclides from water using vetiver *Chrysopogon zizaniodes*

Karlis Brants¹, Daina Riekstina², Vladimirs Gostilo³, Gederts Ievins¹, Gunta Kizane⁴

¹Faculty of Biology, University of Latvia

²Institute of Solid State Physics, University of Latvia

³Baltic Scientific Instruments

⁴Institute of Chemical Physics, University of Latvia

Nowadays employed physical and chemical methods for clean-up of radioactivity contaminated sites are expensive and complicated. Phytoremediation is a relatively cheap and effective technology for removal of environment pollutants. The aim of present work was to assess a possibility to use the vetiver *Chrysopogon zizaniodes* for removal of radionuclides from water bodies. The accumulated activity concentration of natural radionuclides K-40, Ra-226, and Th-228 has been determined in plants growing in two open air water reservoirs within Riga territory: the Kilevein ditch and the pond of Viestur's Garden. Vetiver plants were set on rafts and left to grow for a 10 week period. Then, plants were harvested and dried. Separate gamma-spectroscopy measurements were performed for samples made of vetiver roots and stems. The sample volume was – 1000 ml, weight 15 – 29 g, the measurement time – 24 hours. In the case of both water reservoirs, the lowest radionuclide activity has been determined in plant roots, and the K-40 activity was higher than that of Ra-226, and Th-228. The K-40 activity in the samples made of vetiver stems was 1150 Bq/kg in the case of the Kilevein ditch, and 870 Bq/kg in the case of the Viestur's Garden pond. In future, it would be necessary to perform analogous phytoremediation study with vetiver in the case of artificial environment containing Cs-137.

Use of TL/OSL reader “Freiberg Instruments” for characterization of new dosimetric materials

Jānis Čīpa, Laima Trinklere, Baiba Bērziņa, Valdis Korsaks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Interaction of ionizing radiation or UV light with wide band materials results in ionization - transfer of the previously bound electrons and holes into conduction/valence bands and their trapping on the trap centres. Supply of additional stimulation energy in the form of heat or light releases charge carriers, causing thermoluminescence (TL) or optically stimulated luminescence (OSL). Aim of the given study is development of new prospective materials for dosimetry needs and elucidation of energy storage and recombination luminescence mechanisms in them. In our project the prospective wide band materials (doped AlN ceramics, Al₂O₃-Cr, LiGaO₂) are studied for use as luminescence detectors of UV and ionizing radiation using the methods of TL and OSL. The newly acquired TL/OSL reader from Freiberg Instruments well suits implementation of the project tasks. Thermal, spectral and timing properties of the TL and OSL from the studied materials characterized by the new instrument will be analysed for potential application for the dosimetric needs.

“Freiberg Instruments” TL/OSL ierīces izmantošana jaunu dozimetrisko materiālu raksturošanai

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

Jonizējošās radiācijas un ultravioletās gaismas iedarbība uz platzonu materiāliem izraisa jonizāciju – iepriekš saistīto elektronu un caurumu. Papildus enerģijas piegāde siltuma vai gaismas formā atbrīvo saķertos lādiņa nesējus, izraisot termoluminiscenci (TL) vai optiski stimulēto luminiscenci (OSL). Šī pētījuma mērķis ir izstrādāt jaunus perspektīvus materiālus dozimetrijas vajadzībām un precizēt tajos enerģijas uzglabāšanas un rekombinācijas luminiscences mehānismus. Mūsu projektā tiek pētīti perspektīvi platzonu materiāli (AlN keramikas, Al₂O₃-Cr, LiGaO₂), kurus varētu pielietot UV gaismas un jonizējošā starojuma detektoros, izmantojot TL un OSL metodes. Nesen iegādātā “Freiberg Instruments” TL/OSL ierīce tiek izmantota projekta uzdevumu īstenošanai. Pateicoties šīs ierīces izmantošanai tika izpētīti jauno materiālu TL un OSL termiskie, spektrālie un laika parametri, kas tiks analizēti, lai novērtētu materiālu pielietojamību dozimetrijas jomā.

The financial support of Izp 2018/1-0361 project is greatly acknowledged.

Ar Mn^{2+} joniem aktivēta $MgGeO_3$ ilgspīdošā luminiscence

Aija Kalniņa, Guna Doķe
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Dažādi luminofori tiek plaši pielietoti, sākot no izklaides industrijas līdz pat tehnoloģiskiem izaicinājumiem medicīnā. Ilgspīdošā luminiscence ir daudz pētīta zilajā un zaļajā spektra apgalā, bet daudz mazāk ir pētījumu par šiem procesiem spektra sarkanajā un ifrasarkanajā daļā, tāpēc šajā darbā kā aktivators izvēlēts divvērtīgs mangāns, kurš izteikti luminiscē spektra daļā no 600-800 nm. Viens no faktoriem, kas ietekmē izstarotā starojuma intensitāti konkrētā vielā, ir piejaukumu koncentrācija, tāpēc noderīgi zināt, kā mainās luminiscences intensitāte $MgGeO_3$ atkarībā no pievienotā Mn^{2+} daudzuma.

Darba gaitā iegūti $MgGeO_3:Mn^{2+}$ paraugi ar koncentrācijām 0 mol%, 0,1 mol%, 0,25 mol%, 0,5 mol%, 0,75 mol%, 1 mol%, 1,5 mol%, 2 mol%, 5 mol% un 10 mol%. Paraugos, kas ierosināti gan ar UV starojumu, gan rentgenstarojumu novērojama intensīva sarkanā luminiscence ar maksimumu ap 680 nm un pēcspīdēšana vairāku stundu garumā.

Darba gaitā uzņemti luminiscences un pēcspīdēšanas spektri, izmērītas dzišanas kinētikas, no kurām var spriest par pēcspīdēšanas ilgumu. Papildus tika veikti termostimulētās luminiscences, rentgendifrakcijas u.c. mērījumi.

Persistent luminescence of Mn^{2+} doped $MgGeO_3$

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

A variety of luminophores are widely used ranging from the entertainment industry to the technological challenges of medicine. Persistent luminescence has been studied in the blue and green spectral regions, however much less research has been devoted to the red and infrared part of the spectrum. Therefore, in this study divalent manganese, which is highly luminescent from 600 to 800 nm, has been selected as the activator. The intensity of luminescence in a given material depends on the concentration of impurities, so it is useful to know how the luminescence intensity of $MgGeO_3$ varies with the amount of Mn^{2+} concentration.

In the course of this research $MgGeO_3:Mn^{2+}$ samples with Mn^{2+} concentration of 0 mol%, 0.1 mol%, 0.25 mol%, 0.5 mol%, 0.75 mol%, 1 mol%, 1.5 mol%, 2 mol%, 5 mol% and 10 mol% were prepared. Samples excited by both UV and X-rays exhibit intense red luminescence and afterglow for several hours with a peak around 680 nm. During the research the luminescence and afterglow spectra were taken, the decay kinetics were measured, from which the duration of the afterglow can be evaluated. Additionally, thermostimulated luminescence, X-ray diffraction etc. measurements were made.

Ilgstoša pēcspīdēšana tuvajā infrasarkanajā spektra apgabalā ar hroma joniem aktivētā $\text{CaZnGe}_2\text{O}_6$ materiālā

Guna Doķe, Guna Krieķe, Māris Sprinģis, Andris Antuzevičs, Anatolijs Šarakovskis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Šobrīd ir plaši pieejama informācija par ilgspīdošiem materiāliem, kuru emisija novērojama spektra redzamajā apgabalā, savukārt publikācijas par materiāliem, kuros ilgstoša pēcspīdēšana ir novērojama tuvajā infrasarkanajā spektra apgabalā ir salīdzinoši nelielā skaitā. Lai iegūtu ilgstošu pēcspīdēšanu šajā spektra apgabalā, par vienu no piemērotākajiem aktivatoriem tiek uzskatīts Cr^{3+} .

Darba gaitā, izmantojot cietfāzu sintēzes metodi, sintezēts $\text{CaZnGe}_2\text{O}_6:\text{Cr}^{3+}$ materiāls ar Cr^{3+} koncentrāciju 0,5 mol%.

Materiālam, to ierosinot gan ar rentgenstarojumu, gan ar UV, novērojama plata luminiscences josla ar maksimumu ap 800 nm. Pēc apstarošanas pārtraukšanas, novērojama ilgstoša pēcspīdēšana. Papildus šiem mērījumiem, paraugs tika analizēts izmantojot tādas metodes kā rentgenstaru difrakcija, elektronu paramagnētiskā rezonanse, termiski stimulētās luminiscences mērījumi, u.c.

Apkopojot rezultātus, tika izdarīti secinājumi par ilgstošās pēcspīdēšanas procesiem $\text{CaZnGe}_2\text{O}_6:\text{Cr}^{3+}$ materiālā.

Near infrared long persistent luminescence of chromium doped $\text{CaZnGe}_2\text{O}_6$ material

Guna Doķe, Guna Krieķe, Maris Sprinģis, Andris Antuzevics, Anatolijs Sarakovskis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Currently, there is a widely available information on long persistent luminescence materials with emission in the visible spectral range, while number of publications on afterglow in the near-infrared spectral range is relatively small. Cr^{3+} is considered to be one of the most suitable activators for afterglow in this region of the spectrum.

During the work $\text{CaZnGe}_2\text{O}_6:\text{Cr}^{3+}$ material with Cr^{3+} concentration of 0.5 mol% was synthesized by solid state synthesis method.

The material exhibits a broad luminescence band with a peak around 800 nm, excited by both X-rays and UV. After cessation of irradiation, afterglow is observed. In addition to these measurements, the sample was analyzed using methods such as X-ray diffraction, electron paramagnetic resonance, thermal stimulated luminescence measurements, etc.

Summarizing the results, conclusions were drawn about the processes of long persistent luminescence in $\text{CaZnGe}_2\text{O}_6:\text{Cr}^{3+}$ material.

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2019/8 realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.

Temperatūras un sastāva ietekme uz Gd^{3+} iebūvēšanos oksifluorīdu stikla keramikas CaF_2 fāzē

Jēkabs Cīrulis, Andris Antuzevičs, Guna Krieķe
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Caurspīdīgas ar retzemju joniem aktivētas oksifluorīdu stikla keramikas ir potenciāla alternatīva augstas efektivitātes luminiscējošu materiālu izstrādē. Aktuāli ir kontrolēt aktivatoru iebūvēšanos stikla keramikas kristāliskajā fāzē.

Šajā pētījumā tika sintezēti stikli ar sekojošiem sastāviem: $46 SiO_2 - 20 Al_2O_3 - 8 CaCO_3 - 25.9 CaF_2 - 0.1 GdF_3$ (STD) un **STD** – $20.9 CaF_2 - 5 XF$, kur **X** ir Li, K, Na. Paraugi tika karsēti dažādās temperatūrās un tiem tika veikta elektronu paramagnētiskās (EPR) rezonanses un rentgenstaru difrakcijas analīze.

No **EPR** spektriem var iegūt kvantitatīvu informāciju par Gd^{3+} jonu iebūvēšanos CaF_2 kristāliskajā fāzē. Mērījumi paralēli tika veikti polikristāliskiem CaF_2 paraugiem ar mērķi raksturot Gd^{3+} jonu iebūvēšanās dinamiku stikla keramikas kristāliskajā fāzē atkarībā no parauga sastāva un apdedzināšanas temperatūras.

Temperature and composition effect on Gd^{3+} incorporation in CaF_2 phase of oxyfluoride glass ceramics

Jēkabs Cīrulis, Andris Antuzevics, Guna Krieķe
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Transparent rare earth doped oxyfluoride glass ceramics is potential alternative for high efficiency luminescent materials. It is of interest to control the incorporation of activator ions in the crystalline phase of glass ceramics.

Following glass compositions were synthesized: $46 SiO_2 - 20 Al_2O_3 - 8 CaCO_3 - 25.9 CaF_2 - 0.1 GdF_3$ (STD) and **STD** – $20.9 CaF_2 - 5 XF$ where **X** is Li, K, Na. Samples were treated at different temperatures, electron paramagnetic resonance (EPR) and x-ray diffraction analysis was carried out.

The **EPR** spectra contain quantitative information about incorporation of Gd^{3+} ions in CaF_2 crystalline phase. In addition, measurements for polycrystalline CaF_2 samples were made to characterize Gd^{3+} incorporation dynamics depending on the composition and annealing temperature of glass ceramics.

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

Eiropija jonu sadalījuma un īpašību kvantitatīvā analīze stikla keramikā

Elīna Pavlovska, Andris Antuzevičs, Guna Kriekē
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Caurspīdīga stikla keramika ir kompozītmateriāls, kurā amorfā stikla fāzē atrodas izkliedēti nanokristāli. Tā kā caurspīdīgām stikla keramikām ir vairāki iespējamie pielietojumi fotonikā, svarīgi ir novērtēt aktivatoru jonu iebūvēšanos kristāliskajā fāzē, kā arī raksturot optiskās īpašības kvantitatīvi.

Darba gaitā sintezētas stikla keramikas, kas satur $\text{CaF}_2:\text{Eu}^{3+}$ kristālisko fāzi, ar Eu^{3+} koncentrācijām no 0.5-10 mol%. Paraugiem veikti rentgendifrakcijas mērījumi, no kuriem iespējams novērtēt aktivatoru jonu iebūvēšanās efektivitāti, izmantojot kristāliskā režģa konstantes izmaiņas atkarībā no Eu^{3+} koncentrācijas.

Paraugus ierosinot ar 420-530 nm starojumu, tika izmērīti luminiscences ierosmes spektri. Luminiscences spektros redzamas Eu^{3+} raksturīgās luminiscences joslas.

Noteikts, ka luminiscences intensitāte stikla keramikā pieaug, palielinot eiropija jonu koncentrāciju. Selektīvās ierosmes spektroskopija tika izmantota, lai noteiktu, cik dažādās pozīcijās stikla keramikā atrodas eiropija joni.

Quantitative analysis of Europium ion distribution and properties in glass ceramics

Elina Pavlovska, Andris Antuzevics, Guna Kriekē
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Transparent glass ceramics are composite materials, in which nanocrystals are distributed in glass phase. Transparent glass ceramics have several potential applications in photonics, therefore it is important to evaluate the incorporation of the activator ions in the crystalline phase and to quantify optical properties.

Glass ceramics containing $\text{CaF}_2:\text{Eu}^{3+}$ crystalline phase with Eu^{3+} concentrations in the 0.5-10 mol% range were synthesised. X-ray diffraction measurements were performed, which allowed to evaluate the efficiency of activator ion incorporation using the change of the lattice constant as a function of Eu^{3+} content.

Samples were excited with 420-530 nm and luminescence excitation spectra were measured. The luminescence spectra show the characteristic luminescence bands of Eu^{3+} .

The intensity of luminescence increases with the increase of europium ion content. Site selective spectroscopy was used to determine the number of non-equivalent positions of europium ions in glass ceramics.

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

AlN:Mn pulveru luminescence

Rihards Ruska, Baiba Bērziņa, Laima Trinklere, Guna Krieķe, Andris Antuzevičs, Jānis Čipa
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

AlN:Mn makro un nano izmēru pulveriem tika pētīta luminescence, lietojot spektrālas metodes, kas ietver fotoluminescences un tās ierosmes spektru mērījumus un luminescences kinētikas pētījumus. Visos materiālos dominējošā bija labi zināmā sarkanā Mn luminescence ar joslas maksimumu pie 600 nm. Tika novērots, ka šī luminescence ierosinās divos spektra apgabalos, veidojot platas un saliktas joslas pie 520 nm un 260 nm. Tika arī novērots, ka atbilstoši abām AlN:Mn ierosināšanām pie 520 nm un 260 nm, veidojas ilgi spīdoša luminescence.

Iegūto rezultātu analīze un to salīdzināšana ar rezultātiem, kas iegūti AlN, kas nesatur speciāli ievadītus piemaisījumus, ļauj secināt, ka AlN:Mn sarkano Mn spīdēšanu izsauc divi defektu-radīti luminescences mehānismi. Viens no tiem ir iekšcentra mehānisms, bet otrs ir rekombinācijas luminescences mehānisms, kas realizējas AlN:Mn to ierosinot atbilstoši 520 nm un 260 nm joslās.

Luminescence of AlN:Mn powders

Rihards Ruska, Guna Krieķe, Andris Antuzevics, Baiba Berzina, Laima Trinkler, Janis Cipa
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Luminescence of AlN:Mn macro- and nano-size powders was studied using material spectral characterization including measurement of photoluminescence and its excitation spectra as well as luminescence kinetics. The well known Mn-caused red luminescence peaking at 600 nm appeared being dominant in all materials. It was observed that there are two spectral regions where the red luminescence can be excited, forming a wide and complex excitation bands peaking at 520 nm and 260 nm. It was also found that excitation of AlN:Mn at both 520 nm and 260 nm PLE bands results in long lasting luminescence.

Analysis of experimental results and their comparison with those obtained in undoped AlN materials allow conclusion that there are two defect-caused mechanisms originating Mn luminescence. One of them is the so-called intra-center mechanism, but other is recombination mechanism realizing at 520 and 260 nm excitations, respectively.

The present research is sponsored from the Latvian Sciences Council Grant No Izp-2019/1-0443.

ZnMgO plāno kārtiņu temperatūras atkarīgā fotoluminiscence

Ramūnas Nedzinskas¹, Laima Trinklere², Liuwen Chang³, Mitch Chou³

¹*Fizikas un tehnoloģijas centrs, Viļņa, Lietuva*

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

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

Mūsu konsorcijs grupa no Taivānas ir atklājusi, ka epitaksiālo plāno kārtiņu izgatavošana ZnO un MgO sajaukumiem dažādās attiecībās dod iespēju iegūt ZnO-MgO stabilu pseidobināro sistēmu ar nepārtraukti maināmu aizliegto zonu enerģijas intervālā no 3.37 līdz 7.8 eV. Šādu vielu ZnMgO var izmantot UV detektoriem, kas ir nejutīgi pret saules gaismu un vienlaicīgi reģistrē UV starojumu ar dažādu enerģiju. Šajā darbā tiek pētītas virtcīta un kubiskā tipa ZnMgO plāno kārtiņu optiskās īpašības, izmantojot fotoluminiscences (PL) mērījumus plašā temperatūras diapazonā (3-300 K). Novērotās PL joslas tiek izskaidrotas ar lādiņu nesēju dinamikas dažādiem procesiem ZnMgO plānajās kārtiņās. Piemēram, šaurā josla augstāko enerģiju rajonā rodas pateicoties starpzonu optiskajām pārejām ZnMgO epitaksiālajā kārtiņā, bet PL joslas zemāko enerģiju rajonā ir saistītas ar defektu stāvokļiem materiāla aizliegtajā zonā. Bez tam, izmantojot aktivācijas enerģijas aprēķinus tiek apspriesti iespējamie lādiņa nesēju pārvietošanās mehānismi.

Temperature-dependent photoluminescence of ZnMgO thin films

Ramūnas Nedzinskas¹, Laima Trinkler², Liuwen Chang³, Mitch Chou³

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

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

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

Based on recent novel findings (unpublished) of our consortium group from Taiwan, alloying ZnO with MgO in varying amounts allows realization of stabilized ZnO-MgO pseudobinary system with a smooth tuning of the bandgap between 3.37-7.8 eV, previously not accessible. Therefore, ternary alloy ZnMgO have a great potential application in solar-blind UV detection, significantly enhancing the ability of the devices at different energies simultaneously.

In this work, optical properties of wurtzite-ZnMgO and rocksalt-ZnMgO thin films, grown on lattice-matched substrates, are investigated using temperature-dependent (3-300 K) photoluminescence (PL) spectroscopy.

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

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

Defektu agregātu veidošanās ar ātrajiem joniem apstarotā MgO: dislokāciju kustīguma un fotoluminescences pētījumi

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

Pētījumā izmantoti ar MeV-GeV enerģijas Au, Ni un Kr joniem fluencu 10^9 - 10^{13} joni/cm² apgabalā apstaroti MgO monokristāli, uzmanību veltot defektu agregātu un dislokāciju veidošanai. Uz profila virsmām mērītas dislokāciju kustīguma un fotoluminescences (PL) izmaiņas jonu trajektorijas virzienā. PL emisija 760 nm apgabalā 532 nm lāzera ierosmei mērīta, izmantojot konfokālo lāzera skanējošo spektromikroskopiju. Jonu iespiešanās dziļumā, kas atbilst aprēķināto elektronisko enerģijas zudumu Brega maksimumam, gan fotoluminescences intensitāte, gan dislokāciju kustīguma izmaiņas fluencēm $\geq 10^{11}$ joni/cm² uzrāda maksimumu (Fig.1). Pie zemākām fluencēm visā apstarotajā zonā novērots tikai PL fona signāls. Eksperimentāli novērtēta elektronisko zudumu sliekšņa vērtība pētītajiem joniem. Rezultāti apliecina elektronisko enerģijas zudumu mehānisma noteicošo lomu defektu veidošanā. Diskutēts defektu agregātu ieguldījums MgO mehānisko īpašību modifikācijā.

Formation of extended defects in MgO under irradiation with swift ions: dislocation mobility and photoluminescence study

Rolands Grants, Ilze Manika, Alexei Kuzmin, Janis Maniks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Single crystals of MgO have been irradiated with MeV-GeV energy heavy ions (Au, Ni and Kr) at fluences 10^9 - 10^{13} ions/cm². In this study, the attention is focused on ion-induced formation of extended defects including defect aggregates and dislocations. The results are based on depth-profile measurements of dislocation mobility and photoluminescence (PL) emission at a wavelength around 760 nm (532 nm laser excitation) using confocal laser scanning spectromicroscopy.

At fluences $\geq 10^{11}$ ions/cm², both the photoluminescence and dislocation impeding display a peak at the depth which corresponds to the Bragg maximum of calculated electronic energy loss (Fig.1). The threshold values of electronic loss for different ion species and ion energies have been experimentally evaluated. At fluences below 10^{10} ions/cm² in all irradiated zone only PL background signal is observed. The results confirm that ion-induced effects for given fluences bare ensure mechanism of damage. The contribution of defect aggregates to the modification of mechanical properties is discussed.

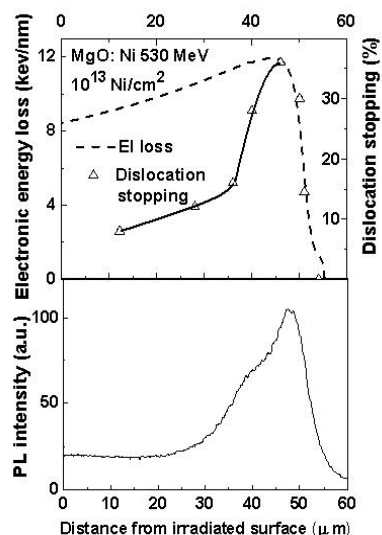


Fig.1 Depth profiles of energy loss, dislocation stopping and PL

ZnO nanopulveru virsmas modifikācija: termiskās apstrādes un piedevu ietekme

Faina Muktepāvela¹, Aleksejs Zolotarjovs¹, Krišjānis Šmits¹, Elena Gorokhova²,
Kārlis Kundziņš¹, Larisa Grigorjeva, Piotr Rodnyi³, Ivan Venevcev³, Artem Chizhov⁴

¹Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

²Zinātniskās ražošanas asociācija S.I.Vavilova Valsts optiskais institūts

³Sanktpēterburgas Valsts Politehniskā universitāte

⁴Neorganiskās ķīmijas katedra, Maskavas Valsts universitāte

Šajā darbā galvenā uzmanība veltīta ZnO nanopulveru raksturošanai izejas stāvoklī. Pētīta pulveru spontānas agregatizācijas, termiskās apstrādes un donoru piedevu ietekme uz mikrostrukturāras veidošanos ZnO scintilējošā keramikā. Termodinamiskais novērtējums rāda, ka ZnO nanograudu spontāna apvienošanās polikristālā nav izdevīgs process graudu robežu (γ_{gb}) un virsmas enerģijas (γ_s) salīdzināmo vērtību dēļ ($\gamma_{gb}/\gamma_s = 0.75$). Tomēr šāda nanopulveru mijiedarbības iespēja parādās prizmatiskām (1010) plaknēm, kurām ir viszemākā virsmas enerģija. Tas noved pie nanostieņu veidošanās. Karsēšana 300-900K apgabalā noved pie nanostieņu izmēra un to kopējā tilpuma palielināšanās. Rezultāti rāda, ka šādi lielus nanostieņus saturoši aglomerāti apgrūtina kompaktēšanu un uzrāda zemu difūzijas aktivitāti punktu defektu likvidēšanai saķepināšanas procesā. Donoru piedevas (In, Ga) maina fasetētās ZnO daļiņu virsmu, uzlabojot keramikas scintilācijas un mehāniskās īpašības

Surface modifications of ZnO nanopowders: effect of thermal treatment and additives

Faina Muktepāvela¹, Aleksejs Zolotarjovs¹, Krišjānis Šmits¹, Elena Gorokhova²,
Kārlis Kundziņš¹, Larisa Grigorjeva, Piotr Rodnyi³, Ivan Venevcev³, Artem Chizhov⁴

¹Institute of Solid State Physics, University of Latvia

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

³St.Peterburg State Polytechnic University

⁴Department of Inorganic Chemistry, Moscow State University

This work focuses on the characteristics of the initial ZnO nanopowders for ZnO scintillated ceramics and explores the role of powder modifications by spontaneously aggregation, heating or donor additives in the microstructure formation of ceramics. Thermodynamic estimates shown that the aggregation of ZnO nanograins into a polycrystals is not a favorable process due to the comparable energy of grain boundaries to surface energy ($\gamma_{gb}/\gamma_s=0.75$). At the same time, prismatic planes {1010} with a minimum of surface energy have the possibility of interaction of nanopowders that leads to the formation of nanorods. The heating in the range 300-900K results in an increase of the volume of nanorods. Results show that such an agglomerate structure with large nanorods hinders compacting and exhibits low diffusion activity during sintering. Donor additives (In, Ga) change the surface of faceted ZnO particles that contributes to an increase in scintillation and mechanical properties.

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

Jauna magnetronās izputināšanas iekārta plāno kārtiņu izgatavošanai: iespējamie procesi, materiāli un kontrole

Mārtiņš Zubkins, Juris Purāns, Andris Āzens
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Magnetronās izputināšanas metode sniedz iespēju izgatavot kārtiņas uz dažādām pamatnēm no plaša neorganisko materiālu klāsta un variēt to struktūru, morfoloģiju un īpašības plašā diapazonā. Šajā referātā tiek prezentētas Plāno Kārtiņu Laboratorijas iekārta un tās iespējas, kas tika izgatavota sadarbībā ar SIA Sidrabe Vacuum.

Iekārta ir aprīkota ar diviem magnetroniem un lineāru pamatņu turētāja kustību, kas nodrošina vienmērīgu (<2%) kārtiņu izgatavošanu uz laukuma līdz 5×10cm. Viens no magnetroniem ir piemērots šķidra mērķa izputināšanai. Pamatni ir iespējams uzsildīt līdz 800°C grādu temperatūrai izgatavošanas laikā. Ir pieejama automatizēta kontroles sistēma, izmantojot optisko plazmas emisiju vai elektriskos izlādes parametrus, kas ir būtiska reaktīvo procesu stabilizēšanai. Kārtiņu biezumu var kontrolēt uzklāšanas laikā, izmantojot gaismas atstarošanās spektru vai kvarca rezonatoru. Ar laika izšķirtspējas (< 1μs) spektrometru iespējams monitorēt plazmas izlādes dinamiku pulsējošos procesos (HiPIMS). Procesu ar ūdeņradi ir pieejami.

Modernizētā iekārta sniegs iespēju izgatavot jaunus materiālus, vienmērīgākas kārtiņas stabilos procesos un veikt augstvērtīgākus pētījumus.

Advanced magnetron sputtering equipment for thin film deposition: possible processes, materials and control

Martins Zubkins, Juris Purans, Andris Azens
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Magnetron sputtering is a suitable technique for the deposition of thin films on a different type of substrates from a wide range of inorganic materials. The method allows controlling the structure, morphology and properties of films over a wide range. This report presents the capabilities of the equipment in the Thin Films Laboratory, which was produced in collaboration with Sidrabe Vacuum Ltd.

The system is equipped with two magnetrons and linear substrate holder movement, which ensures uniform (<2%) deposition of films up to 5×10cm in size. One of the magnetrons is suitable for liquid target sputtering. The substrate can be heated up to 800°C. An automated control system, using optical plasma emission or electrical discharge parameters, is essential to stabilize reactive processes. A light reflectance spectrum or a quartz resonator can be used to control the film thickness during the deposition. Plasma discharge dynamics in pulsed processes (HiPIMS) can be monitored with a time-resolved (<1μs) spectrometer. Hydrogen processes are available.

The new equipment will allow the deposition of new materials, more homogeneous films in stable processes and more extensive research.

Oxidization process of Yttrium: Deposition of thin films by HiPIMS and Reactive DC Magnetron Sputtering

Halil Arslan, Mārtiņš Zubkins, Andris Āzens, Jeļena Butikova, Juris Purāns
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Yttrium oxide (Y₂O₃) thin films were studied previously for different applications, but only recently [Kaminaga et al., 2016] yttrium monoxide (YO) thin films, narrow optical band gap ≈ 0.5 eV and electrical conductivity close to metallic state, with rock salt structure and Y²⁺ (4d¹) valence, were produced by pulsed laser deposition technique. In this research yttrium oxide thin films with different stoichiometry (YO_x) were obtained by HiPIMS and reactive DC magnetron sputtering in an Ar + O₂ atmosphere (≈ 3 mTorr working pressure) onto different substrates. The O₂ partial pressure is varied from 10⁻⁷ to 10⁻⁵ Torr. The oxygen inlet position is intentionally kept away from the target to sputter in the so called metallic mode.

The electronic properties and atomic structures were studied by in-lab techniques such as XRD, XPS (UPS), Ellipsometry, Raman and FT-IR Spectroscopies. The different valence states of yttrium (Y⁰, Y²⁺, Y³⁺) are observed corresponding to the different phases of yttrium oxides (i.e. YO, Y₂O₃). The oxidation mechanism of metallic Y film is being investigated.

Aknowlegment: This research is being supported by the project ERAF No: 1.1.1.1/18/A/073 and ISSP within the scope of young scientific supporting project No :SJZ/2018/12.

Zn_xMg_{1-x}O cietie šķīdumi UV sensoriem: DFT simulēšana un spektrālā raksturošana

Oļegs Lisovskis, Sergejs Piskunovs, Laima Trinklere, Guna Krieķe
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Pusvadītāji ar platu aizliegtu zonu ir jūtīgi pret UV gaismu, un tāpēc var tikt izmantoti kā bioloģiskie un ķīmiskie sensori ozona detektēšanai, ūdens tīrīšanai, piesārņojumā līmeņa noteikšanai jebkurai bioloģiskai vielai. Mūsu pētījuma mērķis ir izveidot UV gaismas sensoru uz Zn_{1-x}Mg_xO cietā šķīduma pamata. Pseudobinārai sistēmai ZnO-MgO ir maināma aizliegtā zona ar platumu no 3.3 eV līdz 7.8 eV, atkarībā no divu vielu savstarpējās attiecības, tas būtiski pastiprina UV sensoru spēju detektēt signālus ar dažādām enerģijām vienlaicīgi. Mēs prezentējam rezultātus, kas tika iegūti ar hibrīdās blīvuma funkcionāla teorijas (hybrid Density Functional Theory, DFT) aprēķinu palīdzību. Tika pētīta kubiskās konfigurācijas Mg_{1-x}Zn_xO un heksagonālas konfigurācijas Zn_{1-x}Mg_xO cieto šķīdumu atomārā un elektroniskā struktūra, ņemot vērā ZnO/MgO attiecību un defektu klātbūtni. Papildus, mēs veicam prognozi par abu fāžu, heksagonālās un kubiskās, stabilitāti. Nomērītie luminiscences spektri arī ir apspriesti šajā prezentācijā.

Autori izsaka pateicību M-ERA.NET projektam ZMOMUVS par finanšu atbalstu.

Zn_xMg_{1-x}O solid solutions for solar-blind UV sensors: DFT simulations and spectral characterization

Oleg Lisovski, Sergei Piskunov, Laima Trinklere, Guna Krieķe
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Wide-bandgap semiconductors are sensitive to UV light, and can be used as biological and chemical sensors for ozone detection, detectors for water purification, determination of pollution levels in any biological agent. The task of our study is to elaborate a solar-blind UV light sensor based on Zn_xMg_{1-x}O material. A pseudobinary system ZnO-MgO has a tunable bandgap from 3.3 eV to 7.8 eV, depending on mutual ratio of the components, this significantly enhances the ability of the sensor to detect signals at different energies simultaneously. Here we present results obtained by means of hybrid Density Functional Theory (DFT) calculations on atomic and electronic structure of cubic Mg_{1-x}Zn_xO and hexagonal Zn_{1-x}Mg_xO solid solutions, taking into account the ZnO/MgO ratio and the presence of defects. In addition, we make predictions on stability of both hexagonal and cubic phases. The measured luminescence spectra are also discussed in this presentation.

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

Slāņaino MoS₂ un WS₂ materiālu aprēķini izmantojot molekulāro dinamiku no pirmajiem principiem

Dmitrijs Bočarovs¹, Inga Jonāne¹, Aleksejs Kuzmins¹, and Matthias Krack²

¹Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

²Paula Šerera Institūts, Šveice

Divdimensiju (2D) slāņu materiālos ietilpst pārejas metālu dihalkogenīdi. Šo materiālu struktūra ir līdzīga grafīta struktūrai, un to raksturo spēcīgas ķīmiskās saites plaknē un vāja saikne starp slāņiem. Mūsu iepriekšējie dažādu materiālu (piemēram, Cu₃N, ZnO, UO₂ un ScF₃) MD-EXAFS pētījumi liecina, ka molekulārās dinamikas aprēķinu izmantošana sniedz ticamu un detalizētu informāciju par termisko nesakārtotību attālumā līdz 6-7 Å no absorbējošā atoma. Šī pētījuma ietvaros mēs izmantojam šādu metodoloģiju iepriekšminētajiem slāņveida materiāliem, veicot MoS₂ un WS₂ savienojumu *ab initio* molekulārās dinamikas (AIMD) aprēķinus temperatūras diapazonā no 300 K līdz 1200 K, lai noskaidrotu termiskās nesakārtotības un strukturālās anizotropijas detaļas slāņveida struktūru režģa dinamikā. Vidējo kvadrātisko relatīvo nobīžu (MSRD) analīze parādīja, ka abiem savienojumiem ir spēcīga atomu vibrāciju anizotropija (starpplāņu MSRD atšķiras no MSRD vienā slānī). Turklāt mēs apstiprinājām iegūtos AIMD rezultātus, veicot tiešo salīdzinājumu ar W L₃-malas un Mo K-malas absorbcijas spektriem, izmantojot MD-EXAFS pieeju, kas izstrādāta [1] un balstīta uz EXAFS datu analīzi, izmantojot molekulārās dinamikas aprēķinus.

Darbs tika izstrādāts pateicoties projekta Nr. 1.1.1.2/VIAA/I/16/147 (1.1.1.2/16/I/001) "Pēcdoktorantūras pētniecības atbalsts" sniegtajam finansiālajam atbalstam

First-principles molecular dynamics simulations of layered MoS₂ and WS₂ materials

Dmitry Bocharov¹, Inga Jonane¹, Alexei Kuzmin¹ and Matthias Krack²

¹Institute of Solid State Physics, University of Latvia

²Paul Scherrer Institute, Switzerland

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. Our previous MD-EXAFS studies of different materials such as Cu₃N, ZnO, UO₂ and ScF₃ suggest that the use of molecular dynamics simulations provides reliable and detailed information on the thermal disorder as far as up to 6-7 Å from the absorbing atom. In the framework of this study, we apply this methodology to the above-mentioned layered materials performing *ab initio* molecular dynamics (AIMD) simulations of MoS₂ and WS₂ compounds in the temperature range from 300 K to 1200 K in order to elucidate the details of thermal disorder and structural anisotropy on the lattice dynamics of layered structures. Analysis of Mean-Square Relative Displacement (MSRD) shown the strong anisotropy in atomic vibrations (interlayer MSRD differ from intralayer MSRD) for both compounds. In addition, we validated the obtained AIMD results by a direct comparison with the W L₃-edge and Mo K-edge absorption spectra using the MD-EXAFS approach developed in [1] and based on the analysis of EXAFS data using molecular dynamics simulations.

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

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

Negatīvās termiskās izplešanās efekta modelēšana skandija fluorīdā izmantojot molekulāro dinamiku no pirmajiem principiem

Dmitrijs Bočarovs¹, Matthias Krack², Jurijs Rafalskis¹, Aleksejs Kuzmins¹, Juris Purāns¹
¹Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts
²Paula Šerera Institūts

Skandija fluorīds (ScF₃) pieder pie materiāliem, kuriem piemīt negatīvas termiskās izplešanās (NTE) efekts. Tas parāda spēcīgu režģa saraušanos līdz aptuveni 1000 K, pārejot uz izplešanos augstākā temperatūrā. Šeit NTE efekts ScF₃ tiek pētīts temperatūras diapazonā no 300 K līdz 1600 K, izmantojot *ab initio* molekulārās dinamikas (AIMD) aprēķinus izotermiski-izobārā (NpT) ansamblī. Režģa konstantes, starpatomu Sc – F – Sc saites leņķa sadalījuma un Sc – F un Sc – Sc radiālā sadalījuma funkciju atkarība no temperatūras tiek iegūta kā superšūnas izmēra no $2a \times 2a \times 2a$ līdz $5a \times 5a \times 5a$ funkcija, kur a ir ScF₃ režģa parametrs. Lai apstiprinātu AIMD simulāciju precizitāti, tika izmantots salīdzinājums ar eksperimentālajiem Sc K-malas EXAFS datiem pie 600 K. Mūsu rezultāti liecina, ka AIMD aprēķini spēj kvalitatīvi reproducēt NTE efektu ScF₃, tomēr, lai precīzi uzskaitītu dinamisko nesakārtotību, jāizmanto superšūnas izmērs, kas lielāks par $2a \times 2a \times 2a$. NTE izcelsme ScF₃ ir izskaidrojama ar mijiedarbību starp ScF₆ oktaedra izplešanos un rotāciju.

Darbs tika izstrādāts pateicoties projekta Nr. 1.1.1.2/VIAA/I/16/147 (1.1.1.2/16/I/001) “Pēcdoktorantūras pētniecības atbalsts” sniegtajam finansiālajam atbalstam.

Ab initio molecular dynamics simulations of negative thermal expansion effect in scandium fluoride

Dmitry Bocharov¹, Matthias Krack², Yuri Rafalskij¹, Alexei Kuzmin¹ and Juris Purans¹
¹Institute of Solid State Physics, University of Latvia
²Paul Scherrer Institute

Scandium fluoride (ScF₃) belongs to a class of negative thermal expansion (NTE) materials. It shows a strong lattice contraction up to about 1000 K switching to expansion at higher temperatures. Here the NTE effect in ScF₃ is studied in the temperature range from 300 K to 1600 K using *ab initio* molecular dynamics (AIMD) simulations in the isothermal-isobaric (NpT) ensemble. The temperature dependence of the lattice constant, inter-atomic Sc–F–Sc bond angle distributions and the Sc–F and Sc–Sc radial distribution functions is obtained as a function of supercell size from $2a \times 2a \times 2a$ līdz $5a \times 5a \times 5a$ where a is the lattice parameter of ScF₃. A comparison with the experimental Sc K-edge EXAFS data at 600 K is used to validate the accuracy of the AIMD simulations. Our results suggest that the AIMD calculations are able to reproduce qualitatively the NTE effect in ScF₃, however a supercell size larger than $2a \times 2a \times 2a$ should be used to account accurately for dynamic disorder. The origin of the NTE in ScF₃ is explained by the interplay between expansion and rotation of ScF₆ octahedra.

Financial support provided by project No. 1.1.1.2/VIAA/I/16/147 (1.1.1.2/16/I/001) under the activity “Post-doctoral research aid” is greatly acknowledged.

- [1]. B. K. Greve, K. L. Martin, P. L. Lee, P. J. Chupas, K. W. Chapman, A. P. Wilkinson, Pronounced negative thermal expansion from a simple structure: cubic ScF₃, *J. Am. Chem. Soc.* 132 (2010) 15496.
[2]. D. Bocharov, M. Krack, J. Rafalskij, A. Kuzmin, J. Purans, *Ab initio* molecular dynamics simulations of negative thermal expansion in ScF₃: the effect of the supercell size, *Comp. Mater. Sci.* 171 (2020) 109198.

Co jona magnētiskā stāvokļa un lokālās apkārnes raksturošana BaCoO₃ perovskītā ar skābekļa vakancēm

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

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

Šajā darbā, izmantojot blīvuma funkcionāla (DFT) skaitliskos aprēķinus superšūnā, tika analizēta bārija kobalta oksīda (BCO) ar skābekļa vakancēm (V_o) strukturālās un elektroniskās īpašības, kā arī vakancu veidošanās enerģijas atkarība no V_o pozīcijas. Iegūtie rezultāti salīdzināti ar aprēķiniem ideālā BCO bez vakancēm un ieviests lokālās apkārnes stāvokļa raksturojums, kas pēc tā ļautu spriest par kobalta magnētiskajiem stāvokļiem. Aprēķini tika veikti divām dažādām BCO telpiskās simetrijas grupām, lai pārlicinātos par modeļa pareizību.

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

Characterization of Co ion magnetic state and local distortions in oxygen vacancy enriched BaCoO₃ perovskite

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

Protonic ceramic fuel cells (PCFCs) represent an important alternative to oxide conducting solid oxide fuel cells demonstrating higher ionic conductivity. In contrast to an electrolyte material, the optimal cathode material still has to be found, by identifying solid solution compositions with sufficiently high electronic and protonic conductivity. Recent experimental investigations in the literature optimized (Ba,Sr,La)(Fe,Co,Zn,Y)O_{3-δ} perovskites as the cathode material for PCFC.

In this work we used density functional (DFT) calculations in supercell to analyze oxygen vacancy enriched barium cobalt oxide (BCO) structural and electronic properties as well as oxygen vacancy formation energy depending of V_o site. Obtained results are further compared to calculations with vacancy free BCO where we implement careful characterization of local distortions which allows to evaluate magnetic state of cobalt ion. Two separate BCO space groups are considered in calculations to ascertain the model correctness.

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

NBT-CaTiO₃ cieto šķīdumu elektromehāniskās īpašības.

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

Savienojumi uz NBT bāzes tiek intensīvi pētīti sakarā ar nepieciešamību aizvietot svinu saturošus segnetoelektriķus ierīcēs, kurās tiek izmantots pjezoelektriskais efekts. Darba mērķis ir uzlabot elektromehānisko īpašību mērījumus, izmantojot lāzera interferometru, kā arī veikt elektromehānisko īpašību pētījumus (1-x)NBT-xCaTiO₃ cietajos šķīdumos. Iepriekš tika konstatēts, ka savienojumos uz NBT bāzes paraugu deformācija (u) elektriskā lauka (E) izmaiņas rezultātā ir neviendabīga, kas noved pie izteikti nesimetriskām u(E) cilpām bipolāras lauka izmaiņas gadījumā. Lai iegūtu korektas deformācijas vērtības lauka virzienā, paraugi tika izgatavoti disku formā un novietoti uz izliektas pamatnes.

Ar uzlaboto metodiku tika iegūtas simetriskas u(E) atkarības. Tā kā CaTiO₃ pievienošana NBT samazina fāzu pārejas temperatūru uz nepolāro stāvokli, sastāvam x=0.05 izdevās iegūt u(E) atkarības fāzu pārejas rajonā. Deformācijas lēcieni pie noteiktas lauka vērtības atbilst ar lauku inducētai 1.veida fāzu pārejai.

Electromechanical properties in NBT- CaTiO₃ solid solutions.

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

NBT-based compositions are widely studied due to environmental requirements to replace the lead containing ferroelectrics in large variety of devices, where piezoelectric effect is applied. The aim of the present work is to improve the measurements of the electromechanical properties, using laser interferometer, as well as study the electromechanical properties in (1-x)NBT-xCaTiO₃ solid solutions. Earlier it was found that electric field (E) induced deformation (u) in the NBT-based compositions is nonhomogeneous, what leads to extremely non-symmetrical u(E) dependences in the bipolar field pulses. The disk shaped samples and bended substrate was used to avoid this problem.

The symmetrical u(E) dependence was obtained by improved method. Since addition of CaTiO₃ in NBT reduce temperature of the phase transition to nonpolar state, in composition x=0.05 dependence of u(E) in the region of phase transition was obtained. The jump of deformation at certain E value corresponds to the field induced 1st order phase transition.

Termiskās apstrādes loma uz NBT bāzētu keramiku virsmas morfoloģiju.

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

Pētot mikrostruktūras sastāviem uz NBT bāzes, produktīvs apstrādes veids ir termiskā kodināšana. Tās pamatā ir atšķirīgais graudu un graudu robežu sublimācijas ātrums. Tomēr publicētie raksti par sastāvu uz NBT-bāzes izpēti atklāj sarežģītākus procesus augstas temperatūras apstrādē. Procesā iegūtās dažādu veidu mikrostruktūras var iedalīt trīs grupās. Pirmā grupā ietilpst “plakanas” parauga virsmas, kur starp graudiem novērojamas graudu robežas kā šauras līnijas (Fig.1a). Otrās grupas paraugu virsmu raksturo izteikts reljefs, kur graudu virsma vairs nav vienā plaknē (Fig.1b). Trešā grupā ietilpst mikrostruktūras, kurās graudi parādās kā regulāri kubi ar izteiktām skaldnēm un šķautnēm. (Fig.1c). Šī pētījuma mērķis ir noteikt termiskās apstrādes parametru ietekmi uz mikrostruktūras veidošanos, kam raksturīgi kubveida graudi. Iegūtie rezultāti satur arī ieteikumus optimāliem termiskās apstrādes parametriem, lai iegūtu kvalitatīvas mikrostrukūras attēlus sastāviem uz NBT bāzes.

Role of thermal treatment on surface morphology of NBT-based ceramics.

Līga Bikshe, Kārlis Kundzins, Ēriks Birks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Thermal etching is fruitful tool in study of microstructure of NBT-based compositions. It is based on fact, that evaporation rate from surface is different, comparing grains and grain boundaries. Still the published articles, devoted to study of NBT based compositions, reveal more complex process of this high temperature treatment. Various kinds of microstructures can be divided into three groups. One group represent “plain” patterns where grain boundaries appear as tiny lines separating grains (Fig.1a). In second group, pattern is characterised by well expressed relief, where grains are not more plain objects (Fig.1b). Third group represent microstructure, where grains appear as regular cubes with very well expressed faces and edges (Fig.1c). Aim of this study is to determine role of heat treatment parameters on appearance of microstructure, characterised by cubic grains. Obtained results also contain recommendations for optimal heat treatment parameters to obtain qualitative grain patterns of NBT-based compositions.

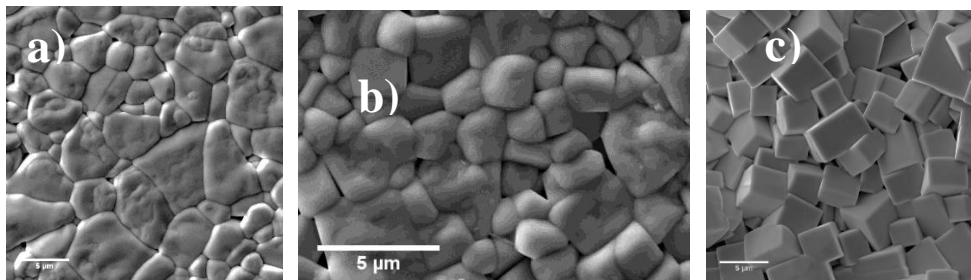


Figure 1 Three types of grain patterns obtained by thermal etching: “plain” (a), with relief (b) and cubes (c).

Fotoluminiscence ar eiropiju aktivētā $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ keramikā.

Ojārs Martiņš Eberliņš, Guna Krieķe, Ēriks Birks
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

$\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ (NBT) struktūra ir zinātnieku uzmanības centrā jau ilgu laiku. Tam par iemeslu ir nepārliciecināmas un pat pretrunīgas eksperimentālo rezultātu interpretācijas, kas ir saistītas ar neregulāru aliovalento Na^+ un Bi^{3+} jonu sadalījumu ABO_3 perovskita struktūras A-apakšrežģī. Šajā pētniecības jomā viens no galvenajiem izaicinājumiem ir NBT lokālas apkārtnes raksturošana.

Darbā tika pētīta ar Eu^{3+} aktivēta NBT fotoluminiscence. Tika noteikti luminiscences spektri pārejām no $^5\text{D}_0$ uz $^7\text{F}_n$ ($n=0-4$) līmeņiem, ierosinot $^5\text{D}_0$ un $^5\text{D}_1$ līmeņus. Luminiscences maksimumi tika aproksimēti ar Gausa funkcijas palīdzību. Tika konstatēta nepārtraukta luminiscences maksimumu viļņa garumu nobīde atkarībā no ierosmes viļņa garuma, kas ļauj izdarīt secinājumu par plašām lokālas apkārtnes variācijām saistībā ar dažādām Na/Bi konfigurācijām. Tika noteikta kristāla lauka koeficienta izmaiņas atkarībā no lokālās apkārtnes. Luminiscences mērījumi atkarībā no temperatūras ($20-300^\circ\text{C}$) ļāva noteikt polarizēta stāvokļa ietekmi uz luminiscences efektivitāti.

Photoluminescence of europium doped $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ ceramics.

Ojārs Martins Eberlins, Guna Krieke, Eriks Birks
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The structure of $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ (NBT) has been a focus of the scientific community for a long time. This is due to unconvincing and even controversial interpretations of experimental results, which are related to irregular distributions of aliovalent Na^+ and Bi^{3+} ions in A-sublattice of the ABO_3 perovskite structure. The characterization of local environment in NBT is one of the main challenges associated with this research area.

In this work photoluminescence of Eu^{3+} activated NBT was studied. Luminescence spectra of transitions from $^5\text{D}_0$ to lower ^7F energy levels after excitation of $^5\text{D}_0$ and $^5\text{D}_1$ energy levels were measured. Luminescence maxima were fitted with Gaussian peaks. Continuous shift of luminescence wavelength maxima in respect to excitation wavelength was found, which led to conclusions about a wide range of local environments related to different Na/Bi configurations. The variation of the crystal field coefficient in dependence on local environment was determined. Temperature dependent luminescence measurements ($20-300^\circ\text{C}$) allowed to determine the role of poled state on the luminescence efficiency.

Fāzes atgūšanas algoritmu salīdzinājums optisko sistēmu kropļojumu raksturošanai

Sergejs Fomins, Krišs Pujāts, Dāvis Zāģeris, Varis Karitāns
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Fāzes atgūšana ir svarīga vairākos zinātnes virzienos. Vesturiski eksistē vairāki fāzes atgūšanas algoritmi, kuriem ir dažāda veiktspēja un darbības ātrumi. Mūsu iepriekšējos darbos tika izmantots Candes et al. (2011) piedāvātais algoritms. Šoreiz tiek apskatām PhasePack atgūšanas pieeju un proti divus empiriski visātrāk fāzi atgustošas metodes. Ir izvirzīti nosacījumi algoritmu spejai darboties gadījumos a) ar ierobežoto novērojumu skaitu, b) pie zemas signāls/troksnis attiecības, c) pie punktveida monohromatiskiem avotiem.

Referāta otrā daļa ir veltīta praktiskam metodes pielietojumam un salīdzināšanai ar Šaka-Hartmana sensora darbību līdzīgos apstākļos. Sākotnējie rezultāti apliecina salīdzināmu abu metožu darbību.

Comparison of phase recovery algorithms for characterization of optical system aberrations

Sergejs Fomins, Krišs Pujāts, Dāvis Zāģeris, Varis Karitāns
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Phase recovery is important in several scientific fields. Historically, there is a number of phase-recovery algorithms with varying performance and operating speeds. In our study Candes et al. (2011) proposed algorithm was implemented. We have extended our study to PhasePack recovery approach, namely the two empirically fastest phase recovery methods. Conditions are set for the performance of algorithms in cases (a) of limited number of observations, (b) low signal-to-noise ratios, (c) and point monochromatic sources. The second part of the paper is devoted to the practical application of the method and comparison with the performance of a Shack-Hartmann sensor under similar conditions. Initial results confirm similar operation of both methods.

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

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

Izveidota dinamiskā LED avota salīdzinājums ar komerciālo RGB vadāmo avotu

Sergejs Fomins, Dāvis Zāģeris, Māris Ozoliņš, Renārs Trukša
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Gaismai ir noteicoša loma mūsu dzīvē. Tai ir modinoša, fizioloģiskos procesus regulējoša, kognitīvo ierosinājumu stimulējoša iedarbība. Pēdējā desmitgadē ir aktualizējusies gaismas diožu tehnoloģijas zila spektra nelabvēlīgas iedarbības sekas uz cirkadiāna ritma darbību un acs fizioloģiju. No otras puses, pateicoties LED iespējam ir parādījušies komerciāli pieejamie dinamiskie gaismas avoti. Tiem ir pārsvarā noskaņojumu veicinošs pielietojums, bet mūsdiānā, pieeja varētu ļaut daudz efektīvāk izmantot gaismu fizioloģiskām vajadzībām. Redzes uztveres laboratorijas jau vairākus gadus veido dažāda spektrālā sastāva dinamiskos gaismas avotus. Dotajā pētījumā tiks apskatīti jauna avota ar nobīdītu zilu spektru kolorimetriskie un krāsu rendēšanas parametri, salīdzinājumā ar pieejamajiem RGBW avotiem. Indeksu noteikšanai esam izmantojuši 12 keramiskus krāsu paraugus, kuri atbilst standartizētajiem. Psihofizikālā pētījumā piedalījās 10 cilvēki, kas pielāgoja baltas gaismas avotus ar dažādu krāsu temperatūru ar diviem piedāvātajiem gaismas avotiem. Rezultāti liecina ka ciāna krāsa 490 nm diodes pielietošana ļauj pa divreiz samazināt zilās diodes iesaisti baltas gaismas saskaņošanā, kas atstāj labvēlīgu iespaidu un cirkadiāno sistēmu un acs fizioloģiju.

Comparison of dynamic LED source with commercial RGBW controlled source

Sergejs Fomins, Dāvis Zāģeris, Māris Ozoliņš, Renārs Trukša
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Light plays a significant role in everyday life. It has a stimulating effect that regulates physiological processes and has a stimulating cognitive effect. In the last decade, the adverse effects of the blue-spectrum LED technology was spotlighted on circadian rhythm activity and eye physiology. On the other hand, based on LED capabilities commercially available dynamic light sources have emerged. Those have predominantly mood related application, but in our opinion, the approach could allow for a more efficient use of light for physiological purposes. For several years now, Vision perception laboratory of ISSP have been developing dynamic light sources of different spectral composition. This study will look at the colorimetric and color rendering parameters of a new light source with offset blue spectrum compared to the available RGBW source. We have used 12 ceramic color samples that are standardized to determine the rendering indexes. A psychophysical study involved 10 colour normal participants in the task of adjustment of white light sources of different color temperatures with the two light sources offered. The results show that the use of a cyan 490 nm diode allows to halve the blue diode's involvement in white matching, which leaves a positive effect on the circadian system and physiology of the eye.

Stiklveida ķermeņa apduļķojumu struktūras noteikšana, izmantojot difraktīvo attēlu analīzi

Varis Karitāns^{1,2}, Adele Antoņuka², Andrejs Tokmakovs¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Latvijas Universitātes Fizikas un Matemātikas, un Optometrijas fakultāte*

Stiklveida ķermeņa apduļķojumu ir entoptiska parādība, kas izpaužas kā kustīgas difrakcijas ainas redzes laukā. Pēdējos gados daudzi pētījumi veltīti šo apduļķojumu struktūras noteikšanai. Šajā pētījumā analizētas iespējas apduļķojumu struktūru novērtēt, izmantojot kodēto difrakcijas struktūru metodi.

Izmantojot optisko litogrāfiju, stikla virsma vispirms tika strukturēta. Tālāk, izmantojot buferizētu fluorūdeņražskābi, stikla virsmā tika izkodinātas sīkas mikrostruktūras. Pēc mikrostruktūru izveides gan izkodinātā virsma, gan otra stikliņa virsma tika aktivēta skābekļa plazmā (5 W; 500 kHz), un abas virsmas tika savienotas, izmantojot PDMS slāni.

Mikrostruktūru dziļums tika novērtēts gan ar bezkontakta profilometriju, gan kodēto difrakcijas struktūru metodi. Kodināšanas ātrums bija aptuveni 80 nm/min. Simulācijas liecina, ka, izmantojot kodēto difrakcijas struktūru metodi, četras bināras maskas ir pietiekamas, lai būtu iespējams šādu mikrostruktūru virsmas profilu noteikt. Iegūti arī sākotnējie dati, izmantojot optiskā sistēmā iegūtas difrakcijas ainas.

Determining the structure of vitreous floaters using diffractive imaging

Varis Karitans^{1,2}, Adele Antonuka², Andrejs Tokmakovs¹

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

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

Vitreous floaters are an entoptic phenomenon manifesting themselves as diffraction patterns floating in the field of view. In recent years, many studies address the issue how to recover the structure of the elements causing vitreous floaters. In this study, possibilities to determine the structure of these elements with the method of coded diffraction patterns have been analyzed.

First, the surface of the glass was patterned using optical lithography. Next, tiny microstructures were etched in the surface of the glass using a buffered oxide etch. Izmantojot optisko litogrāfiju, stikla virsma vispirms tika strukturēta. After the microstructures had been etched both the etched surface and the surface of another glass were activated in oxygen plasma (5 W; 500 kHz) and both surfaces were joined using a PDMS layer.

The depth of the microstructures was assessed both with non-contact profilometry and the method of coded diffraction patterns. The etching speed was about 80 nm/min. Simulations indicate that the method of coded diffraction patterns is capable of recovering the surface profile of the microstructures using four binary masks. Preliminary data has also been obtained using diffraction patterns acquired in an optical system.

The financial support of the postdoctoral project (1.1.1.2/16/I/001; 1.1.1.2/VIAA/1/16/199) is greatly acknowledged.

Ar slāpekli leģēta nanostrukturēta porainā oglekļa anodmateriāla pētījumi litija jonu baterijām

Kaspars Kaprāns¹, Aleksandrs Volperts², Gunārs Bajārs¹, Gints Kučinskis¹, Gaļina Dobeļe², Jānis Kleperis¹

¹*Cietvielu fizikas institūts, Latvija universitāte*

²*LV Koksnes Ķīmijas institūts*

Litija jonu baterijas (LJB) tiek plaši pielietotas kā vairākkārt uzlādējami enerģijas avoti gan elektroautomobiļos, gan stacionārai enerģijas uzglabāšanai. Dažādu oglekļa alotropo formu nanomateriāli tiek plaši pētīti LJB elektrodmateriālu pielietojumos. Oglekļa leģēšana ar slāpekli ir efektīva metode, lai uzlabotu oglekļa fizikālās un ķīmiskās īpašības, ar mērķi sasniegt augstākus enerģijas uzglabāšanas ietilpības un ciklētājamības rādītājus. Darbā tika izmantota ērta un atkārtojama metode, lai sintezētu nanostrukturētu, N-dopētu, porainu oglekļa anoda materiālu. Elektronus vadošais porainā oglekļa tīkls saglabā stabili kristālisku struktūru litizācijas-delitizācijas procesā, savukārt porainā struktūra saskaroties ar elektrolītu, nodrošina augstu saskares virsmas laukumu, kas atvieglo jonu difūziju baterijas darbības laikā. Iegūtie rezultāti uzrāda atgriezenisko gravimetrisko lādiņietilpību 247 m Ah g⁻¹ pie strāvas blīvuma 0.3 mA g⁻¹, kas tika rēķināts ņemot vērā elektrodmateriāla kopējo masu, kas dod iespēju novērtēt tā iespējamo pielietojumu litija jonu baterijās.

Nanostructured porous hybrid network of nitrogen-doped carbon as an anode for Li-ion batteries

Kaspars Kaprāns¹, Aleksandrs Volperts², Gunārs Bajārs¹, Gints Kucinskis¹, Galina Dobeļe², Janis Kleperis¹

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

²*Latvian State Institute of Wood Chemistry*

Lithium-ion batteries (LIBs) open up huge potential markets for rechargeable batteries in powering vehicles and storing electric power for the grid. Carbon nanomaterials have been widely explored for use as electrode materials for the fabrication of LIB. Nitrogen doping represents a general and effective method in further improving the physical and chemical properties of carbon nanomaterials to enhance the energy storage capabilities and cyclability of the resulting batteries. We report a facile and scalable process to prepare nanostructured N-doped porous carbon network as a promising anode material for (LIBs). The so-formed electrically conducting porous network containing carbon structures maintain stable crystal structure during lithiation-delithiation process and porous architecture provides a fast electrolyte penetration/diffusion. Therefore, the designed material presents a reversible capacity of 247 m Ah g⁻¹ at the current density of 0.3 mA g⁻¹ based on the total mass loading of the composite, suggesting a potential for application as an anode material for lithium-ion batteries.

The financial support of project LZP-2018/1-0194 CARMA is greatly acknowledged.

Ūdeņraža izmantošana gāzes degvielas SEG emisiju samazināšanai transporta sektorā

Ansis Mežulis¹, Jānis Kleperis¹, Laila Zemīte²
¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*
²*Rīgas Tehniskās universitātes Enerģētikas institūts*

Siltumnīcefekta gāzu (SEG) emisiju samazināšana ir globāla problēma, kuras risināšanā ir iesaistījusies arī Latvija. Rezumējot LV Ministru kabineta rīkojumu "Par Alternatīvo degvielu attīstības plānu", gāzes degvielas sektors ir atvērts jauniem risinājumiem, kas samazina SEG emisijas. Aktuālākā šī problēma ir Rīgā, kur dzīvo 33% no visiem Latvijas iedzīvotājiem, un ir dzelzceļa mezgli un osta. Konkrētā darba mērķis ir SEG emisiju samazināšana transporta sektorā, aprobējot ar ūdeņradi bagātinātas saspīestas dabasgāzes (HCNG) degvielas lietošanu Latvijā. Tā realizācijai nepieciešams izpētīt iespējas saspiest HCNG līdz CNG uzpildes balonu standarta spiedienam 200-250 bar un to transportēt pa cauruļu vai virtuālo gāzes vadu. HCNG degvielas efektivitāte slēpjas CO₂ emisijas samazinājumā attiecībā pret CNG vidēji 10-15% apmērā. Lietojot HCNG kā transporta degvielu, papildus jāatzīmē degvielas ekonomija, dzinējiem darbojoties zemas slodzes liesa degmaisījuma režīmā. HCNG degvielas potenciālais lietošanas sektors Latvijā ir: a) ar dīzeļdzinējiem darbināmie iekšējo ūdeņu kuģi un lokomotīves, kuras ir veikušas pāreju (vai apsver to veikt) uz duālo degvielu dīzelis-dabasgāze; b) autobusi un smagās automašīnas, kuras darbojas ar CNG, un kurām izplūdes kolektors pieļauj lielāku sadegšanas siltumu 5-10% robežās.

Hydrogen application in gas fuel for GHG emission reduction in transport sector

Ansis Mežulis¹, Janis Kleperis¹, Laila Zemite²
¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*
²*Institute of Power Engineering, Riga Technical University*

Reducing the greenhouse gas (GHG) emissions is foremost a global problem in which Latvia has been involved. Summarizing the directive of the Cabinet of Ministers "On Alternative Fuels Development Plan", the gas fuel sector is open to new solutions to reduce GHG emissions. This problem is particularly acute in the capital Riga, where 33% of the total population of Latvia lives, works even more, and in Riga there are railway hubs and a port.

The present work aims to reduce GHG emissions in the transport sector by means of approving hydrogen enriched natural gas (HCNG) as a fuel in Latvia. This requires exploring the feasibility of compressing HCNG to the standard pressure of CNG cylinders of 200-250 bar and transporting it by the pipeline or a virtual gas pipeline.

The main advantage of HCNG is reduced CO₂ emission by average of 10-15% in comparison to CNG. Additionally, the usage of HCNG in vehicles increase fuel economy while working under low load and leaner burning.

The potential use in transport sector of HCNG fuel in Latvia is pointed to: a) inland diesel waterway vessels and locomotives that have transitioned or are considering switching to dual fuel diesel-natural gas; b) CNG buses and lorries with an exhaust manifold allowing for a higher combustion heat within 5-10%.

This research is funded by the Ministry of Economics of the Republic of Latvia, project LAGAS, project No VPP-EM-INFRA-2018/1-0003

CO₂ adsorbcijas uz vara aktivēšanas ar jonu šķidruma palīdzību

Georgijs Čikvaidze, Jānis Kleperis, Guntars Vaivars
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

CO₂ elektroreducēšana ir perspektīva metode enerģijas un vides ilgtspējas problēmu risināšanai. Ir nepieciešami jauni elektrokatalizatori, kuri var nodrošināt reducēšanās procesu pie zemiem virsspriegumiem, un reakcijas produkti ir ogļūdeņraži ar augstu pievienoto vērtību (etilēns u.c.). Līdz šim visaugstāko efektivitāti nodrošināja vara katalizatori un katalītiskās reakcijas nodrošināšanai ir jāpanāk efektīva CO₂ adsorbcija no gāzes fāzes uz katalizatora virsmas. Labi zināma ir jonu šķidrumu īpašība – spēja absorbēt CO₂. Šajā darbā mēs pētījām adsorbcijas procesa aktivēšanu uz vara katalizatoru ar jonu šķidrumu.

CO₂ adsorbcijas raksturošanai izmantoja ATR-FTIR spektroskopijas metodi. Mērīja ar FTIR spektrometru Vertex 80v (Bruker, Vācija), papildinātu ar VeeMAX III (PIKE Technology Inc., USA). Germānija kristāla virsmu pārklāja ar 20 nm biezu vara kārtiņu un virs tās nodrošināja CO₂ plūsmu. *In situ* mērītie spektri uzrādīja ievērojamu adsorbcijas pieaugumu jonu šķidruma klātbūtnē.

Adsorption of CO₂ on copper stimulated by ion liquid

Georgijs Čikvaidze, Jānis Kleperis, Guntars Vaivars
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Electroreduction of CO₂ represents a promising approach toward addressing global challenges in energy and sustainability. The success depends on developing efficient electrocatalysts capable of selectively reducing CO₂ to valuable hydrocarbon products at low overpotentials (ethylene, etc.). So far, the best candidate is copper and for efficient catalyst reaction, the CO₂ should adsorb from gaseous phase on the catalyst surface. CO₂ capture with ionic liquids is well known. In this work, we investigated the adsorption process stimulated by ion liquid. CO₂ adsorption on Cu surface was studied by ATR-FTIR spectroscopy.

Spectra measured using FTIR spectrometer Vertex 80v (Bruker, Germany) together with ATR accessory: VeeMAX III (PIKE Technology Inc., USA). The surface of the ATR crystal from germanium was coated with 20 nm thick copper. This surface was blown by a stream of CO₂. In situ measurements showed a significant increase in the adsorption of CO₂ on the surface of copper in the presence of an ionic liquid.

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

Sulfonētā poliēterēterketona membrānu izgatavošana izmantojot ultraskaņas izsmidzinātāju

Jānis Teterovskis, Guntars Vaivars
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Sulfurētām poliēterēterketonām (SPEEK), izņemot šķīdību organiskajos šķīdinātājos, ir cita būtiskā īpašība – protonu vadīšanas spēja, kas padara to par pievilcīgu materiālu polimēra membrānu iegūšanai pielietojumam degšūnās. Tomēr līdzšinējā membrānu izgatavošanas metode ir ar izliešanas paņēmienu. Membrānu izgatavošanu veic izšķīdinot polimēru un apstrādājot ar ultraskaņu. Pēc apstrādes ar ultraskaņu šķīdumu ielej stikla Petri trauciņā un žāvē. Membrānas izgatavojot ar izsmidzināšanas metodi, var tās izgatavot klājot plānus slāņus, tos žāvējot uzreiz izsmidzināšanas iekārtā. Līdz ar to iespējama membrānas izgatavošana ar nepieciešamajiem konstruktīvajiem parametriem un slāņu īpašību variāciju.

Plāno kārtiņu iegūšanai izmantoja plānā slāņa smidzinātāju ND-SP. ND-SP ir 3D vadāma sistēma plāno kārtiņu iegūšanai ar polimēra šķīdināšanas paņēmienu.

Sulfonated polyetheretherketone membrane preparation with ultrasound spray-coater

Jānis Teterovskis, Guntars Vaivars
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Sulfonated polyetheretherketone polymers are soluble in organic solvents and they show high proton conductivity. Therefore, the material is applicable as a proton conducting membrane in fuel cells. Traditional membrane preparation method is casting. The polymer is dissolved and dispersed with ultrasound. Homogeneous solution is cast in Petri dish and dried. Spraying allows to produce multilayered membranes. At the same time it is possible to dry in situ in a spray-coater chamber. Such approach allows to produce membranes with innovative solutions- changing parameters and layer properties.

ND-SP Spray Coater was used for film preparation. ND-SP is a 3-axis controlled system developed for the fabrication of thin films by wet deposition.

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

Nātrija jonu bateriju $\text{Na}_2\text{FeP}_2\text{O}_7$ katodmateriāla sintēze, struktūra, sastāvs un elektroķīmiskās īpašības

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

Nātrija jonu baterijas tiek uzskatītas par potenciālu alternatīvu litija jonu baterijām nātrija plašās pieejamības dēļ. Lai gan nātrija jonu baterijās lielākoties tiek izmantoti materiāli, kas analogi litija jonu baterijām, lielāka Na jona rādiusa un atšķirīgu ķīmisko īpašību dēļ, nepieciešams veikt dziļāku nātriju jonu bateriju materiālu izpēti un optimizāciju.

Darbā tika analizētas $\text{Na}_2\text{FeP}_2\text{O}_7$ elektroķīmiskās īpašības kā funkcija no sintēzes metodes un paraugā esošā oglekļa daudzuma - elektrovadītspējas uzlabošanai kā oglekļa avots tika pievienota glikoze, 5% un 15% no kopējās masas.

Analizējot $\text{Na}_2\text{FeP}_2\text{O}_7$ fāžu tīrību un elektroķīmiskās īpašības, secinām, ka piemērotākā ir divpakāpju cietfāžu sintēze. Oglekļa elektrovadošā piedeva būtiski uzlabo gan produktu tīrību, gan lādiņietilpību. Maksimālā iegūtā lādiņietilpība – 80 mAh/g jeb 82% no teorētiskās lādiņietilpības 97 mAh/g.

Synthesis, structure, composition, and electrochemical properties of $\text{Na}_2\text{FeP}_2\text{O}_7$ cathode material for sodium ion batteries

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

Sodium-ion batteries are considered as a potential alternative to lithium-ion batteries due to the abundance of sodium in the environment. Although materials used in sodium-ion batteries are mostly analogous to materials used in lithium-ion batteries, because of higher Na ion size and different chemical properties, lithium cannot directly be replaced with sodium in existing materials, as deeper research and optimization of materials is necessary.

During the work, electrochemical properties of $\text{Na}_2\text{FeP}_2\text{O}_7$ were studied as a function of synthesis route and carbon content. Glucose was added to the synthesis as a carbon; 5wt.% and 15wt.% carbon content was tested.

By analyzing the phase purity and electrochemical properties of $\text{Na}_2\text{FeP}_2\text{O}_7$, we find that the two-step solid-phase synthesis yields the most promising results. After adding carbon, charge capacity and purity of product is significantly improved. The highest value of charge capacity obtained was 80 mAh/g or 82% of theoretical charge capacity 97 mAh/g.

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

Sulfonētu poliēterēterketona membrānu uzbriešana elektrolītos

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

Sulfonētu poliēterēterketonu (SPEEK) sintezēja no poliēterēterketona (*Sigma Aldrich*, molmasa $M_n \sim 10300$) to sulfurējot. Sulfonēšanas pakāpe = 0.70. Polimēru membrānas izgatavoja ar izliešanas paņēmienu. Izšķīdinātu polimēru izlēja Petri trauciņā un žāvēja 48 stundas pie 80 °C.

Ūdens absorbciju un uzbriešanas pakāpi noteica visām izgatavotajām membrānām. Sausu membrānu nosvēra un izmērīja tās platumu un biezumu. Pēc tam membrānas iegremdēja uz 24 stundām dejonizētā ūdenī un atkal noteica tās ģeometriskos parametrus. Atsevišķi noteica membrānu izmēra izmaiņas pēc analogas iegremdēšanas 1M KHCO_3 šķīdumā. *Metrohm Autolab* potenciostats/galvanostats PGSTAT204 tika izmantots impedances un vadītspējas mērījumiem (frekvenču apgabals no 50 kHz līdz 100 Hz; 10 frekvences/ dekadē; signāla amplitūda 10 mV). Kālija saturu membrānās pēc jonu apmaiņas noteica, izmantojot rentgenfluorescenci elementānālizei (*Bruker S8 Tiger*).

Swelling of sulfonated polyetheretherketone membranes in electrolytes

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

Sulfonated polyetheretherketone (SPEEK) was synthesized from polyetheretherketone (PEEK), obtained from Sigma Aldrich (average molecular weight $M_n \sim 10300$) using advanced sulfonation method. Degree of sulfonation = 0.70. Polymer membranes prepared by using a solvent cast method. Polymer solutions were poured into Petri dishes and dried for 48 h at 80 °C.

Water uptake and swelling degree were determined for each of the prepared membranes. Dry membranes weighted and measured length and thickness. After that, membranes immersed in deionised water for 24 h, weighted and measured again. Alternatively, membranes immersed in a 1M KHCO_3 solution. *Metrohm Autolab* potentiostat/galvanostat PGSTAT204 was used for impedance/ conductivity measurements, and measuring parameters were: frequency range was 50 kHz to 100 Hz; 10 frequencies per decade; signal amplitude 10 mV. Potassium content after ion-exchange obtained using XRF element analysis (*Bruker S8 Tiger*).

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

Karsēšanas atmosfēras ietekme uz ar grafēna kvantu punktiem leģēta TiO₂ fotofizikālajām īpašībām

Ainārs Knoks¹, Jānis Kleperis¹, Pēteris Lesničenoks^{1,2}, Gints Kučinskis¹, Līga Grīnberga¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte*

Fotokatalītiska ūdens apstrāde ir viens no daudzsološiem pasīvas vai daļēji pasīvas vides attīrīšanas veidiem. Tam nepieciešams stabils un pieejams katalizators. Titāna dioksīds (TiO₂) ir uzskatāms par labu kandidātu neskatoties uz platu aizliegto zonu un relatīvi īsu ģenerēto fotolādiņu dzīves laiku. TiO₂ fotokatalītiskās īpašības var uzlabot, pievienojot dažādus materiālus, piemēram WO₃ vai uglekļa daļiņas kā grafēna kvantu punkti (GQD), tādā veidā izmainot TiO₂ fotofizikālās īpašības. Lai optimizētu sintēzes procesu, piemaisījuma materiālu ievadīšanu var veikt TiO₂ sintēzes laikā. Bet zemos spriegumos anodētais oksīds ir amorfs, kam nepieciešama kristalizēšana. Ir novērts, ka karsēšanas atmosfēras un temperatūras atstāj atšķirīgu ietekmi ne tikai uz TiO₂, bet arī uz piemaisījumiem, piemēram, GQD.

Šī darba ietvaros tiek apskatīta TiO₂/GQD kompozīta karsēšanas dažādās atmosfērās (Ar/H₂, gaiss, N₂) ietekme uz materiāla fotofizikālajām īpašībām. Tika sintezēti paraugi ar dažādu GQD piejaukumu daudzumu un karsēti atšķirīgās atmosfērās, salīdzinot to ietekmi. Paraugu raksturošana veikta ar SEM, XRD, Raman spektroskopiju kā arī optiskām un elektroķīmiskām metodēm.

Annealing atmosphere influence on photophysical properties of TiO₂/GQD system

Ainars Knoks¹, Janis Kleperis¹, Peteris Lesnicenoks^{1,2}, Gints Kucinskis¹, Liga Grinberga¹

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

²*Faculty of material science and applied chemistry, Riga Technical University*

Photocatalytic water treatment is considered as one of promising cleaning treatments. This requires stable and abundant as well as versatile catalysts. Titanium dioxide (TiO₂) is considered to be a good candidate with flaws i.e. wide band gap and a relatively short lifetime of the generated photo charges. The photocatalytic properties of TiO₂ can be tweaked with addition of components such as WO₃ or carbon particles, for example, graphene quantum dots (GQD), which are suitable for modifying the photophysical properties of TiO₂. Implementation of GQD is done during the TiO₂ synthesis. But at low voltages, the anodized oxide is amorphous, which requires crystallization by annealing. It has been determined that annealing atmosphere not only influences the TiO₂ but also CQD. Thus, for successful material synthesis understanding of the influence on GQD must be investigated.

In this work, influence of heating atmosphere (Ar / H₂, air, N₂) on TiO₂ / GQD is examined. Samples with various GQD addition were created and annealed at different atmospheres. Sample comparison was carried out by results provided by investigation with SEM, XRD, Raman spectroscopy, as well as optical and electrochemical methods. It was found that nitrogen atmosphere provide with lower photocurrent and charge carrier density in comparison to Ar/H₂.

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

CO₂ elektrokatalītiskās reducēšanas reakcijas mehānisma aprēķinu modeļa verificēšana ar ATR-FTIR

Ainārs Knoks¹, Georgijs Čikvaidze¹, Sergejs Piskunovs¹, Guntars Vaivars¹, Jānis Kleperis¹,
Pēteris Lesničenoks^{1,2}, Ingars Lukoševičs¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte*

Globālas klimata pārmaiņas liek sevi manīt jau šodien, tādēļ aktuāli pētījumi par selektīviem katalizatoriem CO₂ reducēšanai, kurus lētā un videi draudzīgā veidā varētu izmantot plaša mēroga konstrukcijās. Lai atrastu pēc iespējas labākus katalizatorus, vēlams kombinēt teorētiskos aprēķinus ar smalkiem eksperimentiem. Mūsu teorētiskajos aprēķinos pierādīts, ka vara nanoklasteru Cu₇ graudu robežvirsmas ir ar vislielāko elektrokatalītisko aktivitāti CO₂ reducēšanai par C₂H₄ caur karbēna mehānismu (CH₂ dimerizēšanos).

FTIR spektroskopija spēj dot nepastarpinātu informāciju molekulārā līmenī, tāpēc, lai reģistrētu reakcijas starpproduktus un galaproduktus, uz ATR kristāla tika izveidota elektrolīzes šūna ar plānu vara katoda pārklājumu. Ķīmiski absorbēts CO ir visbiežāk ziņotais starpprodukts, ko IR spektros parasti atpazīst pēc platas asimetriskas joslas 2100-1900 cm⁻¹ intervālā pie potenciāliem, kas zemāki par -0,4 V, ar CO₂ piesātinātos bikarbonātu elektrolītos. Pēc mūsu aprēķiniem kā starpproduktam arī vajadzētu būt CH₂ molekulārajam fragmentam; gala produkti ir C₂H₄ molekula un paralēlās reakcijas gala produkts CH₄. Mūsu pirmo eksperimentu rezultāti tiks prezentēti.

ATF-FTIR use as theoretical reaction mechanism verification method in determination of CO₂ electrochemical reformation products

Ainars Knoks¹, George Chikvaidze¹, Sergei Piskunov¹, Guntars Vaivars¹, Janis Kleperis¹,
Peteris Lesnicenoks^{1,2}, Ingars Lukosevics¹

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

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

Global climate change is taking its toll today, leading to research on selective CO₂ reduction catalysts that can be used in large-scale, low-cost and environmentally friendly ways. To rationally design more advanced catalysts, the combination of theoretical and experimental approaches is desired. According to our theoretical predictions the grain boundaries of Cu₇ cluster can demonstrate the best electrocatalytic ability for the C₂H₄ formation through CH₂ dimerization (“carbene” mechanism).

FTIR spectroscopy can directly provide molecular-level information, therefore, to record the reaction intermediates and products, an electrolysis cell with a thin film of copper cathode was formed on the ATR crystal. Chemisorbed CO is the most frequently reported intermediate, which in IR spectra is detected as asymmetric band in region 2100-1900 cm⁻¹ at potentials lower than -0.4 V in CO₂-saturated bicarbonate solution. According to our calculations, the CH₂ molecular moiety also should be as intermediates; the end products are the C₂H₄ molecule, including the parallel reaction with end product CH₄. The results of our first experiments will be presented.

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

Ar slāpekli dopētas aktivētas ogles pielietojums kā gāzu sensora materiāls

Ingars Lukoševičs¹, Aleksandrs Volperts², Gaļina Dobeļe², Jānis Kleperis¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts,*

²*LV Koksnes Ķīmijas institūts*

Oglekļa materiāli, piemēram, grafēns vai oglekļa nanocaurulītes, sevi pierādījuši kā potenciālu gāzu sensora materiālu. Materiāla darbības efektivitāti iespējams palielināt, ieviešot struktūrā defektus – piejaukuma atomus. Ir zināmi vairāki elementi, ar kuriem dopējot izmainās šo materiālu īpašības, no kuriem slāpekļa dopanti nanostrukturētiem oglekļa materiāliem piedod katalītiskas īpašības.

Darbā, pārstrādājot koksni, iegūta ar slāpekli dopēta aktivēta ogle, kas izvēlēta kā jutīgais materiāls gāzu sensoram. Tā raksturota ar XPS un hromatogrāfijas metodēm. Kā atbildes reakciju reģistrējot sensora materiāla elektrisko pretestību, apskatīti sekojoši parametri: pretestības izmaiņa, izmaiņas ātrums gāzes iedarbībā un reģenerācijas laikā, atkārtojamība. Kā mērķa gāze apskatīti amonjaks NH₃ un slāpekļa oksīdu NO_x maisījums. Iegūtie rezultāti tiks apkopoti kopā ar papildus raksturojumiem maģistra darbā.

Nitrogen doped activated carbon as gas sensor material

Ingars Lukosevics¹, Aleksandrs Volperts², Galina Dobeļe², Janis Kleperis¹

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

²*Latvian State Institute of Wood Chemistry*

Carbon materials such as graphene or carbon nanotubes have shown the potential to be used as a gas sensor material. The efficiency of sensing can be improved by introducing defects – foreign atoms. Multiple dopants have shown to significantly change the properties of carbon-based material. Nitrogen as dopant has shown to cause catalytic properties to appear.

In this work by recycling wood nitrogen doped activated carbon is obtained and used to make the gas sensor. The material is characterized by the means of XPS and chromatography.

Electric resistance is registered as the sensor response. Multiple sensor material parameters are studied, namely the maximum resistance change, the rate of change in influence of gas and the regeneration period, and the repeatability. The response is tested against ammonia NH₃ and nitrogen oxide mix NO_x. Obtained results with additional characterization will be compiled in the master's thesis.

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

Ar slāpekli dopētu un nedopētu aktivētu ogļu elektrodu pielietojums mikrobu baterijās

Renārs Lavins¹, Ingars Lukoševičs², Zane Lanka¹, Jānis Kleperis²

¹Rīgas 64. vidusskola

²Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Pēc elektroenerģijas ir visstraujāk augošais pieprasījums. Mūsdienās liela daļa enerģijas tiek iegūta no fosilās kurināmā, kas sāk izsīkt un tā izmantošana piesārņo apkārtējo vidi. Kā alternatīva ir zināmas mikrobu baterijas, kurās mikrobu metabolisma ceļā var iegūt elektroenerģiju. Tiek meklēti jauni elektrodu materiāli, kas uzlabotu šo bateriju efektivitāti.

Darba mērķis bija salīdzināt ar slāpekli dopētu un nedopētu aktivētu ogļu elektrodus. Tika izgatavotas divas mikrobu baterijas šūnas, kuras atšķīrās ar izmantoto elektrodu uzklājumu. Viena elektroda uzklājums tika izgatavots ar slāpekli dopētu aktivētu ogli, otrs - ar slāpekli nedopētu aktivētu ogli. Šie elektrodi tika raksturoti skenējošajā elektronu mikroskopā (SEM) un veikti šūnas elektriskie mērījumi.

Tika mērīts un salīdzināts abu mikrobu baterijas šūnu elektriskais spriegums, izlādes un reģenerācijas raksturojumi, kā arī šūnas jauda atkarībā no izlādes strāvas. Pēc mērījumiem secināts, ka šūna ar slāpekli dopētu aktivās ogles elektrodu ir piemērotāka baterijas pielietojumam – spriegums uz šūnas ir ievērojami lielāks un maksimālā iegūstamā jauda ir gandrīz par kārtu lielāka. Tomēr kopumā arī labākās šūnas jauda ir neliela, tādēļ praktiskai pielietošanai jāapsver daudzu ķēdē saslēgtu mikrobu baterijas šūnu risinājumi.

Nitrogen doped and non-doped activated carbons use in microbial fuel cell's

Renars Lavins¹, Ingars Lukosevics², Zane Lanka¹, Janis Kleperis²

¹Riga 64th Secondary School

²Institute of Solid State Physics, University of Latvia

There is an increasing demand for electricity. Nowadays a large portion of energy is obtained by burning fossil fuel, but this resource is running out and creates pollution. As an alternative microbial fuel cells have been discovered. Electricity can be obtained by using microbial metabolism. To increase the efficiency of these fuel cells new electrode materials are researched.

The aim of this study was to compare activated carbon electrodes - doped with nitrogen- and non-doped. Two microorganism fuel cells were made with different anodes. One electrode coating was made with activated carbon, the other with nitrogen doped activated carbon. These electrodes were characterised by the means of scanning electron microscope (SEM), and electrical measurements were performed.

The electrical voltage of both fuel cells was compared, together with charge and discharge as well as cell power depending on discharge current. The study showed that nitrogen doped carbon electrodes are more suitable for this application – cell shows higher voltage and maximum power is almost an order of magnitude higher. It has also been observed that the available current power of a best single cell is too low, power in the range of microwatts. As a solution for practical application connecting cells in series or parallel would be an improvement.

Authors acknowledge financial support from Latvian Science Council project LZF FLPP No. LZF-2018/1-0194 and AV and GD from LS Institute of Wood Chemistry for supply of the carbon materials.

Elektroķīmiskās eksfoliācijas pielietojums grafēna funkcionalizēšanai ar slāpekli

Roberts Oliņš^{1,2}, Pēteris Lesničenoks^{1,2}, Jānis Kleperis¹, Ainārs Knoks¹, Ingars Lukoševičs¹
¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*
²*Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte*

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

Viens no grafēna sintēzes veidiem ar ražošanas un izmaksu efektivitātes palielināšanu, kas tai pat laikā varētu nodrošināt iegūtā materiāla funkcionalizēšanu ar slāpekli, ir grafīta elektroķīmiskā eksfoliācija. Mūsu darba ietvaros tiek pētīta eksfoliācijas parametru (elektrolīta sastāvs, pieliktā sprieguma polaritāte un impulsa parametri) ietekme uz iegūtā nanostrukturētā oglekļa materiālu daļiņu lielumu un biežumu (slāņu skaitu) un iespēju to funkcionalizēt ar slāpekli.

Eksfoliācija tiek veikta NaN_3 elektrolīta šķīdumā, kas nodrošina mazāku O grupu esamību vidē, kas varētu saistīties ar iegūto grafēnu, salīdzinot ar, piemēram, NH_4OH . Elektrolītā ievietoti divi grafīta elektrodi, kuriem periodiski tiek mainīts spriegums no 0-10V. Šķīdums, kas satur iegūto pulveri, tiek filtrēts caur $0,2\mu\text{m}$ filtru un žāvēts, tad tas tiek reducēts $\text{Ar}/\text{H}_2(95/5\%)$ gāzes plūsmā. Sintezētie materiāli raksturoti ar SEM, AFM, XPS un citām metodēm.

Electrochemical exfoliation – streamline method for synthesis of nitrogen functionalized graphene

Roberts Olins^{1,2}, Peteris Lesnicenoks^{1,2}, Janis Kleperis¹, Ainars Knoks¹, Ingars Lukosevics¹
¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*
²*MLKF, Riga Technical University*

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

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

The exfoliation process is done in a NaN_3 electrolyte solution which provides less quantity of oxygen groups that tend to strongly bond at defect sites on the graphene, comparing with such solvents as NH_4OH . Two graphite electrodes are inserted into the electrolyte and a pulse power of 0-10V is applied. The solution containing the obtained material is filtered through a $0,2\mu\text{m}$ filter, dried and then reduced in an tube furnace with a constant flow of Ar/H_2 (95/5%) gas. The material is characterized using SEM, AFM, XPS and other methods.

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

Grafēns, tā iegūšana un plāno kārtiņu siltumvadītspēja un efektivitāte

Pēteris Tjarve¹, Agris Zvirgzdiņš¹, Pēteris Lesničenoks^{2,3}, Roberts Oliņš^{2,3}, Jānis Kleperis²

¹*Rīgas Valsts 1. ģimnāzija*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

³*Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte*

Neizmantotais siltums un neregistrēti materiāli ir mūsdienu sabiedrībā neapgūti resursi, kuriem ir jāķīst par drosmīgu zinātnieku pētījumu mērķiem. Neizmantojamais, pārpalikušais industriālais un tehnoloģiskais siltums, galvenokārt dzesēšanas tehnoloģijās, rada dažādas papildu izmaksas. Elektronikas un tehnoloģisko procesu dzesēšanas problēmas atrisināšana ir ļoti finansiāli interesanta tēma gan priekš ražotājiem gan vides, kas šo tēmu padara vēl pievilcīgāku.

Mūsu darbā, pielietojot pieejamo izmantotā grafīta reciklēšanas metodi, ir iegūts siltumvadošu materiāls, kas pielietojams siltumvadošo pārklājumu izveidē. Ja līdzīga svāra metāla radiatora siltuma atdeves spēja atšķiras tikai no siltumvadošā pārklājuma klātesamības, tas jau dod pienesumu efektivitātes palielināšanai. Iespēja samazināt radiatoru svaru, samazinot metāla daudzumu un pielietojot siltumvadošos pārklājumus, ir noderīga tehnoloģija gan industriālajos procesos, gan jaunākajās tehnoloģijās uz zemes, gaisā un kosmosā.

Graphene, its production and thin film thermal conductivity and efficiency

Pēteris Tjarve¹, Agris Zvirgzdiņš¹, Peteris Lesnicenoks^{2,3}, Roberts Olins^{2,3}, Janis Kleperis²

¹*Riga State Gymnasium No.1*

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

³*Faculty of Materials Science and Applied Chemistry, Riga Technical University*

Waste heat and waste materials are two of the modern society plaguing elephants in the room which still need to be addressed by responsive scientists who boldly go looking for solutions. Waste heat also creates extra costs and losses in energy needed for cooling. Cooling of electronics as well as industrial processes are the problems that can save enormous funds for large companies and the environment, which makes this a good topic to investigate.

In our research work available raw graphite-recycling methodology is used to develop graphene-like material for thermally conductive coatings on metals allows us to investigate possible thermal benefits. If the same thermal properties of the radiator fins can be achieved by smaller metal fins with extra graphene coating, both weight and metal saving benefits arise. Weight of radiators can be extremely beneficial to state-of-the-art technologies on land, in air and in space.

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

Innovatīvi materiāli uz nanostrukturēta oglekļa bāzes – materiāli enerģētikai

Mareks Grižāns¹, Pēteris Lesničenoks^{2,3}, Roberts Oliņš^{2,3}, Jānis Kleperis²

¹*Edgara Kauliņa Lielvārdes vidusskola*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

³*Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte*

Mūsdienu tehnoloģijās arvien nozīmīgāku vietu ieņem formas faktors - komponentu izmēru samazināšana un efektivitātes palielināšana. Šos nozīmīgos – ražošanu palētināšos, materiālus ietaupošos un produktu svaru samazinošos nosacījumus ir vieglāk sasniegt, izmantojot efektīvākus materiālus. Bieži efektivitāti materiāliem nosaka to aktīvās virsmas laukums, uz kuras var notikt ķīmiskās reakcijas. Nanomateriāli un nanoporainas, nanostrukturētas daļiņas ļauj sasniegt īpašības, kuras nav realizējamas ar makroskopisku materiālu izmantošanu.

Pētījumā izveidoti degšūnu testa prototipi un salīdzināti dažādi degšūnu elektrodi, izmantojot grafēnu un tradicionālos degšūnu katalizatoru materiālus. Izmantojot *NAFION* polimēra saistvielu izgatavota katalizatoru tinte, kas uzklāta uz *Fuel Cell Earth* grafīta papīra elektrodiem. Izmantojot ātras salikšanas iespēju testētas Pd, Pt katalizatoru tintes ar grafēna piedevu ar mērķi uzlabot strāvas sadali pa parauga virsmu un aizvietot dārgmetālu katalizatora materiāla daudzuma nepieciešamību, kā arī *NAFION 117* un *SPEEK* membrānas.

Innovative nanostructured carbon materials for energy

Mareks Grizans¹, Peteris Lesnicenoks^{2,3}, Roberts Olins^{2,3}, Janis Kleperis²

¹*Edgars Kaulins Lielvarde secondary school*

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

³*Faculty of Materials Science and Applied Chemistry, Riga Technical University*

Nowadays modern technologies are strongly influenced by form-factor, decrease of size in components and increase of effectivity. These commercially beneficial, important and raw material saving and weight reducing points are easier to reach by using more efficient materials. Often in chemical reactions material activity is strongly influenced by the active surface area and especially its size. Nanomaterials – nonporous, nanostructured particles allow to reach reactivity and properties unachievable by macroscopic materials.

In this work multiple fuel cell prototypes have been compared. Different electrodes – using traditional catalyst materials have been used. *NAFION 117* water solution binder was used in catalyst ink formation which was later coated on *Fuel Cell Earth* graphite paper mesh electrodes. Using quick assembly method Pd, Pt catalyst inks with graphene additive has been tested. The goal of graphene additive was expected uniform current distribution over electrodes surface. Also, same type *NAFION 117* and *SPEEK* membranes were tested in Fuel Cell prototypes.

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

Karbonizēta stikla šķiedras auduma masas atjaunošanās pēc izotermiskas karsēšanas

Gunārs Bajārs, Pēteris Lesničenoks, Jānis Balodis, Ēvalds Pentjušs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Pētīts stikla šķiedras audums ar dabiski izveidojušos tronas ($\text{Na}_3\text{H}(\text{CO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) nanoizmēru, haotiski orientētu kristālu čaulu uz šķiedras. Audums rada interesi pateicoties čaulas kristālu lielai virsmai un vides pieejamībai, lai to pētītu un izmantotu. Darbā auduma paraugi izturēti 1h pie temperatūrām virs tronas brūšanas sākuma temperatūras (57°C). Analizēta masas atjaunošanās ilgtermiņā (mēneši): dabiski mainīgā istabas vidē; plus palielinātā līdz 75% RH; plus palielinātā RH un līdz 1000 ppm CO_2 koncentrācija. Izkarsētiem līdz $70\text{-}80^\circ\text{C}$ paraugiem masas pieaugums istabas vidē korelē ar vides mitruma pieauguma pīķiem. Pieaugums sastāv no neatkarīgas (dominējošas) un atkarīgas no sekojošā vides mitruma krituma daļām. Pirmā daļa skaidrojama ar iebūvētā ūdens un otrā- ar vidi līdzsvarota, fizikāli adsorbēta ūdens atjaunošanos kristālos. Karsētiem virs 80°C paraugiem atmosfērā ar palielinātu RH, laika grafikā parādās H_2O adsorbcijas pīķis, kas varētu būt saistīts ar nopietnāku kristālu virsmas porainību (piemēram, $\text{CO}_2\uparrow$), kas uz laiku palielinā ūdens adsorbciju kamēr porainā virsma izšķīst un liekais H_2O iztvaiko. Pēc pīķa pazušanas sākas laikā lineāra, lēna masas palielināšanās, saistīta ar nepārtrauktu ūdens adsorbciju un čaulas kristālu lēnu šķīšanu ūdenī līdz piesātinājumam, kas sakrīt ar teorētisku paredzējumu literatūrā.

Carbonised Glass Fibre fabric mass renewal after isothermal heating

Gunars Bajars, Peteris Lesnicenoks, Janis Balodis, Evalds Pentjuss
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

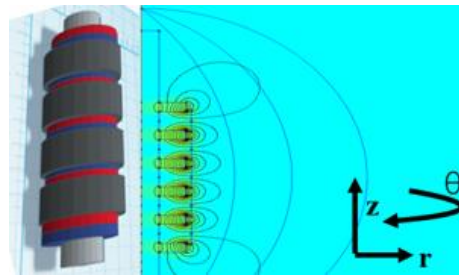
Studied glass fibre fabric with a naturally formed trona ($\text{Na}_3\text{H}(\text{CO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) nanosize and chaotic crystal shell on fibers. The fabric creates interest thanks to the large surface crystal and the availability of the environment to study and use it. At work fabric samples are aged 1h at temperatures above the trona decomposition starting temperature (57°C). Analysis of mass regeneration in the long term (months) are fulfilled: in a naturally changing room environment; plus increased to 75% RH; plus an increased RH and up to 1000 ppm of CO_2 concentration. For heated up to $70\text{-}80^\circ\text{C}$ samples, the increase in mass in the room environment correlates with the increase peaks in environmental humidity. Growth consists of independent (dominating) and dependent in the ensuing environmental drop in moisture. The first part is explained by the number of built-in water and the other-an environmentally balanced, physically adsorbed water rejuvenation in the crystals. For fired over 80°C samples in an atmosphere with an increased RH, the time schedule shows a high H_2O adsorption peak, which could be due to more serious crystal surface damage with CO_2 excretion and temporary an increase in water adsorption while the porous surface dissolve. After peak disappearance, the linear and slow weight gain of fabric is started, associated with continuous adsorption of the water and the dissolution of the crystals surface in water to a saturation that coincides with theoretical prediction in the literature

The support of Base Funding is greatly acknowledged

Lineāra pastāvīgo magnētu ģeneratora teorētiskais modelis ūdens triecē

Leo Krugļikovs¹, Ingars Lukoševičs², Vladimirs Ņemcevs², Biruta Šķēle¹, Jānis Kleperis²
1Rīgas Franču licejs
2Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Darbā izveidots teorētiskais modelis un izpētīts tā pielietojums vienkāršam pastāvīgo magnētu lineārā ģeneratora prototipam. Lineārie ģeneratori ir pielietojami mikroģenerācijā dažādos procesos, kur rodas taisnvirziena kustība, arī dabā, piemēram, tekošs ūdens. Jau gadu simtiem mehāniska hidroierīce - ūdens triecē - tiek izmantota kalnainos apvidos ūdens pacelšanai lielos augstumos, bet mūsu darbā apskatīts ūdens triecē pielietojums elektrības iegūšanai. Šādi saražota elektroenerģija nerada siltumnīcas efekta gāzu emisijas. Prototipa serdi veido ar vienādiem poliem viens otram pretī novietoti pastāvīgie magnēti, kurus atdala magnētiski mīksts tērauds (attēlā). Magnētiskā lauka modelēšanai ap serdes magnētiem un magnētiskās plūsmas skaitliskai aprēķināšanai serdei vai vijumu spolei kustoties, izmantots Galīgo elementu metodes programmas magnētisma modulis FEMM. Prototips tika testēts ar soļu dzinēju darbināmā standā, izmantojot oscilogrāfu elektrisko parametru (atvērta ķēde potenciāls, slodzes strāva) reģistrēšanai. Teorētiski izskaitļotiem parametriem novērota laba sakrīšana ar eksperimentā noteiktām līknēm, kas dod iespēju izmantot teorētisko modeli reālā prototipa konstrukcijas un elementu optimizācijai.



Theoretical Model of Linear Permanent Magnet Generator for Water Ram Pump

Leo Kruglikovs¹, Ingars Lukosevics², Vladimirs Nemcevs², Biruta Skele¹, Janis Kleperis²
¹Riga French Lyceum
²Institute of Solid State Physics, University of Latvia

In this paper a theoretical model is developed and is tested with a simple prototype of permanent magnet linear generator is investigated. Linear generators can be used in micro-generation in a variety of processes where linear motion occurs, including running water. For hundreds of years, a mechanical hydroelectric device - water ram pump - has been used to lift water to high altitudes in mountainous areas, however our work explores the use of water ram pump to generate electricity. The electricity produced this way does not emit greenhouse gases. The prototype core is made up of permanent magnets with opposite poles facing each other, separated by magnetically mild steel (Figure). For modeling the magnetic field around the core magnets and numerically calculating the magnetic flux as the core or winding coil moves, the magnetism module of the Finite Element Method Program (FEMM) is used. The prototype was tested on a step motor driven bench using an oscillograph to record electrical parameters (open-circuit potential, load current). The theoretically calculated parameters correspond with experimentally obtained curves, which make it possible to use the theoretical model for optimization of a real prototype construction and parts.

The financial support of ESF project No 8.3.2.1./16/I/002 from National Center for Education is greatly acknowledged.

WS₂ un MoS₂ plānas kartiņas sintēze uz GaN nanovadiem un GaN veiferiem

Zarina Umatova¹, Lauris Dimitrocenko², Edgars Butanovs², Boris Polyakov²

¹ *Nazarbayev University*

² *Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Pārejas metālu dichalkogenīdi (PMD), ieskaitot to heterostruktūras, ir svarīgi nākamās paaudzes ierīcēm elektroķīmijas, sensoro un fotoelektrisko elementu jomā. Lielākajā daļā publicēto darbu TMD materiāli tika sintezēti ar CVD metodi. Pievilcīga CVD metodes alternatīva un piemērotāka mērogošanai un rūpnieciskai ražošanai ir plānas oksīda kartiņas magnetrona nogulsnešana ar sekojošu pārvēršanu uz PMD.

Plāno filmu laboratorijā (ISSP) neseno tika izstrādāta metode WO₃ un MoO₃ plānu plēvju DC reaktīvajai magnetrona nogulsnešanai no atbilstošajiem metāla mērķiem un sekojoša šo oksīdu pārvēršana disulfīdos temperatūras diapazonā no 600 līdz 800 C grādiem sēra atmosfērā. Šajā darbā mēs sintezējām dažus slāņus plānas WS₂ un MoS₂ uz GaN nanovadiem un GaN veiferu virsmām. Iegūtos paraugus raksturoja ar XRD, Ramana spektroskopijas, SEM, TEM un AFM mikroskopijas metodēm.

Balstoties uz eksperimentālajiem rezultātiem, mēs secinājām, ka GaN ir ideāls substrāts WS₂ un MoS₂ kristālisko plānu kartņu audzēšanai.

Synthesis of thin film of WS₂ and MoS₂ on GaN nanowires and GaN wafers

Zarina Umatova¹, Lauris Dimitrocenko², Edgars Butanovs², Boris Polyakov²

¹ *Nazarbayev University*

² *Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Transition metal dichalcogenides (TMDs), including their heterostructures are essential for the next generation of devices in electrochemistry, sensing, and photovoltaics. In most published works TMDs materials were synthesized by CVD method. An attractive alternative of CVD method and more suitable for upscaling and industrial manufacturing is magnetron deposition of thin oxide film with subsequent conversion into TMDs.

In the Thin films laboratory (ISSP) recently was developed method of DC reactive magnetron deposition of WO₃ and MoO₃ thin films from corresponding metal targets, and subsequent conversion of these oxides into disulfides in temperature range 600-800 C degrees in sulfur atmosphere. In this work we synthesized of few layers thin WS₂ and MoS₂ on GaN nanowires and GaN wafer surfaces. Obtained samples were characterized by XRD, Raman spectroscopy, SEM, TEM and AFM microscopy methods.

Based on the experimental results we concluded that GaN is perfect substrate for growing WS₂ and MoS₂ crystalline thin films.

The financial support of Latvian Science Council grant lzp- 2018/2-0083 is greatly acknowledged.

13. februāris

**EUROfusion
UN TEORIJA**

Latvijas “EUROfusion” laboratorijas ieguldījums ceļā uz CO₂ brīvu enerģijas avotu

Andris Šternbergs

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Eiropas Zaļā kursa 2050 kontekstā īpaši aktuāls kļuvis darbs pie CO₂ brīva enerģijas avota radīšanas. Vislielākās cerības tiek liktas uz kodolsintēzi, procesu, kurā divi vieglo elementu atomu kodoli vides ekstrēmas iedarbības rezultātā reaktorā tiek mākslīgi cieši satuvināti, lai veidotu smagāka elementa kodolu un no masas starpības iegūtu enerģiju. Nākotnes enerģijas izstrāde notiek sadarbojoties 34 pasaules valstīm, tostarp Latvijai. Latvijas “EUROfusion” pētniecības vienību koordinē Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts (LU CFI). Šajā grupā ietilpst zinātnieku grupas no LU CFI, Latvijas Universitātes Ķīmiskās fizikas institūta un Latvijas Universitātes Fizikas institūta. Latvijas vienības mērķi ir izstrādāt konstrukciju un funkcionālos materiālus kodolsintēzes procesa ekstrēmajiem apstākļiem, kā arī šķidrā metāla izmantošanas izpēte dzesēšanas un siltuma aizvadīšanas procesā, tritija ķīmisko formu izvērtēšana un plazmu skarošo virsmu defektu izpēte ar lāzeru ablācijas spektroskopijas un citām metodēm. Kodolsintēzes ieviešana ir plānota trīs fāzēs- īstermiņā, vidējā termiņā un ilgtermiņā- un katra no šīm fāzēm paver iespējas Latvijas zinātniekiem.

Contribution of the Latvian “EUROfusion” Laboratory towards a CO₂ free energy source

Andris Sternbergs

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The development of a CO₂-free energy source has become particularly relevant in the context of the European Green Deal 2050. Great expectations lies in fusion, a process in which two light atomic nuclei are artificially tightly fused together in a reactor due to extreme environmental stress to produce a heavier element nucleus and release energy derived from the mass difference. Technology of the future energy is being developed in cooperation of 34 countries worldwide, including Latvia. The Latvian “EUROfusion” research unit is coordinated by the Institute of Solid State Physics, University of Latvia (ISSP UL). This laboratory includes groups of scientists from the ISSP UL, the Institute of Chemical Physics, the University of Latvia and the Institute of Physics, the University of Latvia. The aims of the Latvian laboratory are to develop structural and functional materials for the extreme conditions for the fusion reactor, as well as to investigate the use of liquid metal in cooling and heat exchange, the evaluation of chemical forms of tritium and investigation of defects in plasma-contacting surfaces with laser ablation spectroscopy and other methods. The development of fusion energy in general is planned in three phases - short, medium and long term - and each of these phases opens up opportunities for Latvian scientists.

Koaksiālie žirotroni DEMO kodolsintēzes reaktoriem

Oļģerts Dumbrājs

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Žirotroni ir lieljaudas elektromagnētisko viļņu ģeneratori GHz diapazonā. Tos izmanto kodol plazmas karsēšanai un tās stabilitātes nodrošināšanai. Mūsdienās tie darbojas daudzos kodolsintēzes pētniecības institūtos, piemēram ASDEX-Uprade tokamakā un Wendelstein 7-X stellaratorā Vācijā. Pēc dažiem gadiem tie darbosies pasaules lielākajā tokamakā ITER Francijā. Šo žirotronu jauda ir ap 1 MW un to frekvence ap 170 GHz. Nākošais posms kodolsintēzes pētniecībā ir tā saucamais DEMO – kodolsintēzes reaktors, kam jādemonstrē, ka kodolsintēzi tiešām varēs izmantot enerģijas iegūšanai rūpnieciskos mērogos. DEMO vajadzībām jākonstruē žirotrons, kura jauda ir 2 MW un kas var darboties pie trim frekvencēm: pamatfrekvence 238 GHz, divas palīg frekvences 204 GHz un 170 GHz. Tik lielu jaudu var ģenerēt tikai tā sauktie koaksiālie žirotroni – žirotroni, kura rezonatorā ievietots stienis. Šādus žirotronus pēta Karlsrūes Tehnoloģiskajā Institutā Vācijā. Referātā tiks aplūkoti šo pētījumu rezultāti un perspektīvas.

Coaxial-Cavity gyrotrons for DEMO

Oļģerts Dumbrājs

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Gyrotrons are vacuum tubes based on electron cyclotron maser instability. They are the only microwave sources that are capable of generating power at megawatt levels. Gyrotrons are used for electron cyclotron heating, current drive, and stabilization of the magnetically confined plasma in plasma experiments such as ASDEX-Upgrade tokamak and Wendelstein 7-X stellarator in Germany. In the nearest future they will be used in the world's largest tokamak ITER in France. As the next step it is planned to demonstrate that fusion power can be generated in industrial power plant (DEMO). DEMO requires 2 MW gyrotrons with the main operating frequency of 238 GHz and auxiliary frequencies at 204 GHz and 170 GHz. Such parameters can be obtained only in the so called coaxial-cavity gyrotrons whose cavities contain an insert. Such gyrotrons are studied at the Karlsruhe Institute for Technology in Germany. The present state and perspectives of these studies will be discussed.

Itrijs un titāna uzvedība ODS tērauda izgatavošanas procesā

Arturs Cintiņš¹, Andris Anspoks¹, Aleksejs Kuzmins¹, Juris Purāns¹, Nerea Ordas²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Univ Navarra, CEIT IK4*

Kodolsintēzes un tradicionālo kodoldalīšanās IV reaktoru paaudze ekspluatāciju var padarīt ekonomiski izdevīgu ODS tērauda izcilās īpašības kā radiācijas izturība, termiska stabilitāte un stiprība, kas ļauj izstūrēt ilgstošu struktūru bojājumus augstas enerģijas neitronu apstarošanas dēļ. Lai iegūtu tēraudu ar tādām īpašībām, ir nepieciešams vienmērīgi sadalīt pa visu materiālu nanoizmēra oksīdus nanodaļiņas. Tradicionāli ODS tēraudu izgatavo ar mehānisko sakausēšanu (MA), bet MA ietver vairākus trūkumus, tostarp tā laiku un izmaksu neefektivitāti, piesārņojumu no samalšanas līdzekļiem utt. CEIT-IK4 izstrādāja inovatīvu metodi, lai iegūtu ODS tēraudu, kas izvairās no mehānisko sakausēšanu – STARS [1].

Šajā darba ar rentgenabsorbcijas spektroskopijas palīdzību tika izpētītā Y un Ti lokāla struktūra ODS tēraudos, kuru izgatavoja CEIT-IK4, atkarība no dažādiem izgatavošanas parametriem. Darbā tika analizēti Y un Ti K-malas rentgenabsorbcijas spektri, kas ļāva noteikt Y un Ti valences stāvokli un lokālo struktūru, atkarībā no ražošanas posmiem un apstākļiem.

Yttrium and titanium behaviour in ODS steel manufacturing stages

Arturs Cintiņš¹, Andris Anspoks¹, Aleksejs Kuzmins¹, Juris Purāns¹, Nerea Ordas²

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

²*Univ Navarra, CEIT IK4*

The safety, reliability, economy and efficiency of generation IV fusion and fission reactors will depend on the oxide dispersion-strengthened (ODS) steel outstanding properties that are sustained under long-term crystal structure damage by high-energy neutron radiation. An important requirement is the presence of a high concentration of nanosized oxide particles in the alloy matrix. The conventional processing route of ODS steel includes mechanical alloying (MA). However, MA involves several drawbacks including its time and cost inefficiency, the contamination from the grinding media, etc. An innovative method, called STARS [1], was developed by CEIT-IK4 to obtain ODS alloys production that avoids the mechanical alloying.

In this study, we took a closer look at the local structure of Y and Ti atoms in ODS steels produced by CEIT-IK4 using X-ray absorption spectroscopy. We have studied dependencies of the local structure on different manufacturing stages.

The analysis of the Y and Ti K-edge X-ray absorption near edge structure (XANES) and extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) allowed us to reveal changes in Y and Ti oxidation state and local structure as a function of different manufacturing stages and conditions.

- [1] D. Pazos *et al.*, “ODS ferritic steels obtained from gas atomized powders through the STARS processing route: Reactive synthesis as an alternative to mechanical alloying,” *Nucl. Mater. Energy*, vol. 17, pp. 1–8, Dec. 2018.

IrO₂ ieslēgums ZnO: elektronisko defektu simulācija

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

¹*Cietvielu fizikas institūts, Latvijas Universitāte*

²*Max Planck Institute for Solid State Research*

³*Department of Physics and Astronomy, Uppsala University*

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

Cinka oksīds (ZnO), pateicoties pusvadītāju un optoelektroniskās industrijas centieniem, ir labi izpētīts materiāls, tomēr tā pētījumi joprojām spēj radīt jaunas atziņas. ZnO var viegli pārveidot par n-tipa vadošu. Veicot Zēbeka koeficienta mērījumus plānajām kārtiņām, izaudzētām no ZnO ar Ir piemaisījumu, tika parādīts, ka ZnO var būt p-tipa vadītājs, ja Ir koncentrācija pārsniedz noteiktu robežu. Šajā darbā, pielietojot uz blīvuma funkcionāla teorijas balstītus datoraprēķinus, mēs pārbaudām, vai šo parādību var izskaidrot ar skābekļa defektu veidošanos starpmezglu pozīcijās.

Šīs sistēmas modelēšanai mēs pielietojam spinu polarizācijas aprēķinus, neiekļaujot tajos kristālisko simetriju, un izmantojot hibrīdo PBE0 funkcionāli. Kontrolējot Ir koncentrāciju ar superšūnas izmēru un piešķirot superšūnai dažādu lādiņu, mēs pārlūkojam elektroniskā cauruma izveidošanas nosacījumus. Galvenais uzsvars ir piešķirts elektronisko defektu lokalizācijai. Tāpat, mēs aprakstam Ir ietekmi uz struktūras relaksāciju.

ZnO-embedded IrO₂: a first-principles approach to electronic defects

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

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

²*Max Planck Institute for Solid State Research,*

³*Department of Physics and Astronomy, Uppsala University*

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

Semiconductor and optoelectronic industries have been thoroughly studying zinc oxide (ZnO) for several decades, yet it still has capacity to offer new insights into material science. ZnO can trivially be made into n-type conductor. It has been shown by measuring the Seebeck coefficient for thin films that Ir-doped ZnO can be p-type conducting after concentration of Ir exceeds a certain threshold. In the present study using the density functional calculations we verify whether explanation for this effect can be attributed to oxygen interstitial defects.

To model this system, we have performed spin-polarized, symmetry-omitting density functional calculations employing hybrid PBE0 functional. We explore, by varying the charge of a supercell, as well as controlling Ir concentration through supercell size, the conditions for electronic hole formation. An emphasis is put on localization of electronic defects. We also discuss effects of Ir on the lattice structure relaxation.

Interfeisa-inducētās pjezoelektricitātes palielināšanās $(\text{SrTiO}_3)_m/(\text{BaTiO}_3)_{M-m}$ superrežģī

Guntars Zvejnieks, Leonīds Rusevičs, Denis Grjaznovs, Jevgēnijs Kotomins
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Mēs piedāvājam detalizētus aprēķinus no pirmiem principiem, lai pētītu pjezoelektriskās īpašības $(\text{SrTiO}_3)_m/(\text{BaTiO}_3)_{M-m}$ heterostruktūrās, izmantojot 3D $\text{STO}_m/\text{BTO}_{M-m}$ superrežģa modeli. Balstoties uz eksperimentāliem datiem un grupu teorijas analīzi, mēs atradām divas iespējamās tetragonālās simetrijas telpiskās grupas. Telpiskās grupas $P4mm$ (#99) modeļa raksturīgā īpašība ir atomu nobīdes $[001]$ virzienā, kas ļauj modelēt feroelektriskās (FE_z) nobīdes, bet $P4$ (#75) modelis bez FE_z nobīdēm atļauj skābekļa oktaedru pret fāzes rotāciju ap $[001]$ virzienu, t.i., antiferodistorsās nobīdes (AFD_z). Mūsu aprēķini demonstrē, ka priekš $m/M \leq 0.75$ slāņu attiecībām abiem modeļiem ir līdzīgas ģeometrijas un pjezoelektriskās konstantes. Abi modeļi paredz apmēram 6-kārtīgu pjezoelektriskās konstantes e_{33} palielināšanos salīdzinājumā ar BaTiO_3 tilpuma vērtību, bet pie nedaudz atšķirīgām slāņu attiecībām. Pjezoelektricitāte palielinās koordinētu kolektīvu FE_z atomu nobīžu rezultātā, kas rodas abos STO un BTO slāņos un interfeisos un sasniedz maksimālo vērtību, kad tetragonālā fāze kļūst nestabila un transformējas par pseido kubisko fāzi. Mēs analizējam arī FE_z un AFD_z mijiedarbību. Mēs parādam, ka pat viens vai divi BTO slāņi var inducēt FE_z nobīdes STO slāni attiecīgi $P4mm$ un $P4$ modeļos.

Interface-induced enhancement of piezoelectricity in the $(\text{SrTiO}_3)_m/(\text{BaTiO}_3)_{M-m}$ superlattice

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

We present the results of a detailed first principles study of the piezoelectric properties of the $(\text{SrTiO}_3)_m/(\text{BaTiO}_3)_{M-m}$ heterostructure using the 3D $\text{STO}_m/\text{BTO}_{M-m}$ superlattice model. Based on the experimental data and group theoretical analysis, we deduce two possible space groups of tetragonal symmetry. The characteristic feature of the space group $P4mm$ (#99) model is atomic displacements in the $[001]$ direction, which allows us to simulate the ferroelectric (FE_z) displacements, whereas the $P4$ (#75) model besides FE_z displacements permits oxygen octahedra antiphase rotations around the $[001]$ direction and thus antiferrodistortive (AFD_z) displacements. Our calculations demonstrate that for $m/M \leq 0.75$ layer ratios both models show similar geometries and piezoelectric constants. Both models predict an approximately 6-fold increase of the piezoelectric constant e_{33} compared to the BaTiO_3 bulk value, albeit at slightly different layer ratios. Piezoelectricity arises due to the coordinated collective FE_z displacements of atoms in both STO and BTO slabs and interfaces and reaches its maximum when the superlattice approaches the point where the tetragonal phase becomes unstable and transforms to a pseudo-cubic phase. The interplay between FE_z and AFD_z displacements is carefully analyzed. We demonstrate that even a single or double layer of BTO is sufficient to trigger FE_z displacements in the STO slab, in $P4mm$ and $P4$ models, respectively.

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

(La,Sr)MnO₃ katoda virsmas termināciju ietekme uz tā elektronisko struktūru

Jurijs Mastrikovs, Jevgēnijs Kotomins, Andrejs Česnokovs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Aprēķinātās no pirmajiem principiem skābekļa vakanču un adsorbētā skābekļa koncentrācijas tiek analizētas un salīdzinātas (La, Sr) MnO₃ kurināmā elementa katoda materiāla polārajām (La, Sr)O un MnO₂ (001) terminācijām. Abi daudzumi ir ļoti atkarīgi no vidējā Mn oksidācijas stāvokļa (La/Sr attiecība). Plānās simetriskās plātnēs svarīga loma ir arī katjonu nestehiometrijai, kura maina vidējo Mn oksidācijas stāvokli. (La, Sr) O terminācijā virsmas skābekļa vakanču koncentrācija ir vairāk nekā 5 pakāpes mazāka, salīdzinot ar MnO₂ termināciju. Tiek noteiktas vakances un adsorbētā skābekļa migrācijas enerģijas, kā arī adsorbēto molekulāro skābekļa veidu disociācijas barjeras. Adsorbētā skābekļa atoma un virsmas skābekļa vakances nejauša sastapšanās tiek identificēta kā skābekļa piesaistes reakcijas ātruma noteicošais faktors. Tā kā atomu un molekulārā skābekļa adsorbcijas koncentrācijas palielināšanos ierobežo tipiskais piesātinājuma līmenis diapazonā ap 20% uzlādētiem adsorbātiem, tiek prognozēts, ka kopējais skābekļa piesaistes ātrums (La, Sr)O terminācijai būs ievērojami mazāks.

The effect of (La,Sr)MnO₃ cathode surface *termination* on its electronic structure

Jurijs Mastrikovs, Jevgenijs Kotomins, Andrejs Chesnokovs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The results of first principles calculations of oxygen vacancy and oxygen adsorbate concentrations are analyzed and compared for the polar (La,Sr)O and MnO₂ (001) terminations of (La,Sr)MnO₃ fuel cell cathode materials. Both quantities strongly depend on the average Mn oxidation state (La/Sr ratio). In thin symmetrical slabs, the cation nonstoichiometry also plays an important role by modifying the average Mn oxidation state. The surface oxygen vacancy concentration for the (La,Sr)O termination is more than 5 orders of magnitude smaller when compared to the MnO₂ termination. The vacancy and adsorbed oxygen migration energies as well as the dissociation barriers of adsorbed molecular oxygen species are determined. The encounter of adsorbed atomic oxygen and surface oxygen vacancy is identified as the rate determining step of the oxygen incorporation reaction. Since the increase of atomic and molecular oxygen adsorbate concentration is limited by the typical saturation level in the range of 20% for charged adsorbates, the overall oxygen incorporation rate is predicted to be significantly smaller for the (La,Sr)O termination.

A		E	
Annuss P.	39	Eberliņš O.M.	68
Anspoks A.	13, 16, 91	Einbergs E.	45
Antoņuka A.	71	F	
Antuzevičs A.	17, 56	Fedotovs A.	17
Antuzevičs A.	18	Fomins S.	69, 70
Antuzevičs A.	47	G	
Antuzevičs A.	48	Gabrusenoks J.	14
Antuzevičs A.	53	Gerbreders V.	35
Antuzevičs A.	54	Gorokhova E.	59
Antuzevičs A.	55	Gostilo V.	50
Arslan H.	61	Grants R.	58
Augustovs P.	21	Grigalevicius S.	30
Āzens A.	60, 61	Grigorjeva L.	59
B		Grizāns M.	84
Bajārs G.	37, 72, 76, 85	Grīnberga L.	78
Balodis J.	85	Grjaznovs D.	65, 92, 93
Bērzina B.	51	I	
Bērziņa A.	28	Ieviņš Ģ.	50
Bērziņa B.	17, 56	J	
Bikše L.	67	Jansons J.	32
Birks Ē.	66, 67, 68	Jēkabsons L.	38
Bite I.	10, 41, 42, 43, 44, 45, 46	Jonāne I.	13, 16, 63
Bitmets O.	23	Jurjāns M.	66
Bočarovs D.	63, 64	K	
Brants K.	50	Kalinko A.	13, 16
Bundulis A.	25, 28	Kalniņa A.	52
Burve R.	49	Kaparkalējs R.	77
Butanovs E.	46, 87	Kaprāns K.	72
Butikova J.	61	Karitāns V.	34, 69, 71
C		Kleperis J.	37, 38, 72, 73, 74, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 86
Chang L.	57	Knoks A.	38, 78, 79, 82
Chizhov A.	59	Kokars V.	21, 29
Chou M.	57	Korsaks V.	51
Cintiņš A.	13, 16, 91	Kotomins J.	65, 92, 93, 94
Cīrulis J.	54	Krack M.	63, 64
Česnokovs A.	92, 94	Kriķe G.	17, 18, 48, 53, 54, 55, 56, 62, 68
Čikvaidze G.	74, 79	Kristiņš A.	39
Čipa J.	17, 51, 56	Krugļikovs L.	86
D		Krūmiņa A.	49
Dimitrocenko L.	87	Kučinskis G.	37, 72, 76, 78
Dobeļe G.	72, 80		
Doķe G.	17, 52, 53		
Dumbrājs O.	90		
Dūrena R.	44		

Kundziņš K.	23, 59, 67	Purāns J.	60, 61, 64, 91, 92
Kundziņš M.	66		
Kuzmins A. ...	13, 16, 58, 63, 64, 91, 92	R	
Ķemere M.	17, 19, 47	Rafalskis J.	64
Ķizāne G.	50	Riekstiņa D.	17, 50
		Rimša R.	27
L		Rizzieri N.	34
Laganovska K.	10, 46	Rodionovs P.	49
Lanka Z.	81	Rodnyi P.	59
Laviņš R.	81	Rogulis U.	19
Lazdoviča K.	29	Rusevičs L.	93
Leimane M.	41	Ruska R.	17, 56
Lesničenoks P. ...	38, 78, 79, 82, 83, 84, 85	Rutkis M.	24, 25
Lielbārdis M.	27		
Lisovskis O.	62	S	
Lukoševičs I.	38, 79, 80, 81, 82, 86	Seņko M.	43
		Serga V.	49
M		Shumelyuk A.	21
Manika I.	58	Skorodumova N.V.	92
Maniks J.	58	Skrypka Y.	21
Mastrikovs J.	94	Skuja L.	10, 41
Mežulis A.	73	Sniķeris J.	35
Mihailovs I.	24	Sprīģis M.	53
Millers D.	42, 43	Sprūģis E.	77
Muktepāvela F.	59	Spustaka A.	42, 43, 44
		Strautnieks N.R.	22
N		Šarakovskis A.	17, 53
Nedzinskas R.	57	Šķēle B.	86
Ņemcevs V.	86	Šmits K.	10, 43, 45, 59
Ņesterova I.	76	Šternbergs A.	9, 89
O		T	
Odoulov S.	21	Tamanis E.	35
Oliņš R.	82, 83, 84	Taranda K.	41
Ollier N.	10	Teteris J.	33
Ordas N.	91	Teterovskis J.	75
Ozoliņš M.	34, 70	Tipaldi Č.F.	14
Ozols A.	21	Tjarve P.	83
Ozols H.	48	Tokmakovs A.	23, 71
		Traskovskis K.	21
P		Trinklere L. ...	11, 17, 45, 51, 56, 57, 62
Paulsone P.	29	Truhins A.	11, 12
Pavlovska E.	18, 55	Trukša R.	70
Pentjušs Ē.	85		
Petit L.	42	U	
Piskunovs S.	38, 62, 79	Umatova A.	87
Poļakovs B.	87		
Pudžs K.	22, 23	V	
Pujāts K.	69	Vaivars G.	74, 75, 77, 79
		Veinbergs J.	39

Vembris A.....	27, 29, 30	Zāģeris D.	69, 70
Venevcevs I.	59	Zemīte L.....	73
Vilunas Ē.....	46	Ziediņš R.....	24
Vīgants E.....	37	Zolotarjovs A.	11
Vītola V.....	42	Zolotarjovs A.	45
Vītols K.....	47	Zolotarjovs A.	59
Volperts A.....	72, 80	Zommere M.A.	30
Z		Zubkins M.....	60, 61
Zariņš E.....	29	Zukuls A.	44
Zavickis D.....	65	Zvejnieks G.....	65, 93
		Zvirgzdiņš A.	83