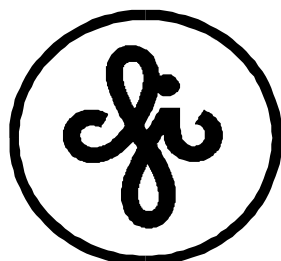


**Institute of Solid State Physics
University of Latvia**



ABSTRACTS
of the 31st Scientific Conference

**February 24 – 26, 2015
Riga**

LU Cietvielu fizikas institūta 31. zinātniskās 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 6 sekcijas:

- Optiskās īpašības un defekti materiālos
- Kodolfizika un kodolsintēze
- Ūdeņraža materiāli, enerģētika un iekārtas
- Materiālu struktūra, teorija un modelēšana
- Organiskie materiāli un fotonika
- Stenda referāti

Referātu tēzes sekcijās ir sakārtotas to nolasīšanas secībā.

Otrdiena, 24. februāris		
10:00	Anatolijs Truhins	Kristobalīta luminiscence
10:15	Mārtiņš Osis	Augšup-pārveidotā luminiscence ar erbija joniem aktivētā oksfluorīdu stiklā un stikla keramikā
10:30	Kristaps Štrāls	Augšup-pārveidotā luminiscence $\text{LaInO}_3\text{:Er}^{3+}$ materiālā
10:45	Paula Jankovska	AlN nanopulveru luminiscence un tās atkarība no apkārtējās vides
11:00	Guna Doķe	Ar skābekli saistītu defektu ietekme uz augšup-pārveidotās luminiscences īpašībām ar Er^{3+} aktivētā NaLaF_4 materiālā
11:15	Kafijas pauze	
11:45	Linarsds Skuja	Jaunas netilpina skābekļa centra luminiscences joslas kristāliskā SiO_2
12:00	Andris Fedotovs	Paramagnētiskās zondes oksfluorīdu stikla keramiku struktūras pētījumiem
12:15	Andris Antuzevičs	Gd^{3+} centrs un radiācijas defekti ScF_3
12:30	Aleksejs Zolotarjovs	Ar elektrolītisko oksidēšanu plazmā iegūtie alumīnija oksīda pārklājumi: sintēze un raksturojums
12:45	Roberts Zabels	Dislokācijas Bi jonu trekos dažādos leņķos apstarotā LiF
14:00	Andris Šternbergs	EUROfusion: Eiropas termiskās kodolsintēzes kopēja programma
14:15	Elīna Pajuste	JET vakuuma kameras putekļu struktūra un ķīmiskais sastāvs
14:30	Līga Avotiņa	Apstarotu oglekļa divertora materiālu struktūras un sastāva spektroskopiska analīze
14:45	Kafijas pauze	
15:15	Oļģerts Dumbrājs	Žirotronu izmantošana elementārdaļiņu, kodolu un cietvielu fizikā
15:30	Tamāra Krasta	Kodola formas maiņas ietekme uz nepāra-nepāra rēnija un irīdija ierosināto stāvokļu spektriem
15:45	Mihails Halitovs	Volframa pārklājumu ietekme uz tritija aktivitāti ārējās un iekšējās sienas divertora materiālos
16:00	Artūrs Zariņš	Litija ortosilikāta minilodiņu augsttemperatūras radiolīze pāātrināto elektronu ietekmē

Trešdiena, 25. februāris		
10:00	Jānis Kleperis	Ūdeņraža infrastruktūras attīstības aspekti – iegūšana, uzglabāšana, kvalitātes un drošības kontrole
10:15	Justs Dimants	Politika un standarti gāzveida degvielu uzpildes stacijām un ūdeņraža vieta tajos
10:30	Ilze Dimanta	<i>Enterobacter aerogenes</i> saražotā ūdeņraža uzglabāšanas iespējas dažādos metālhidrīdos
10:45	Pēteris Lesničenoks	Materiālu ūdeņraža uzglabāšanai pētniecības metodes Kauņā un Rīgā
11:00	Ainārs Knoks	TiO_2 nanocaurulišu augšanas īpatnības anodēšanas procesā
11:15	Kafijas pauze	
11:45	Pauls Annuss	Interesanti rezultāti impedances mērījumu gaitā
12:00	Alberts Kristiņš	IS barjeru vadības modulis
12:15	Jānis Melderis	Automātiskā starta-finiša kontroles iekārta un sacensību norises protokols Saules mašīnu un laivu sacensībām
12:30	Artis Volkovs	Gaisa un ūdens jonu ģenerators iekšdedzes dzinēju darbības uzlabošanai
14:00	Stenda referāti	

Ceturtdiena, 26. februāris			
10:00	Kārlis Lazdiņš	Dzelzs trifluorīda Fe K-malas EXAFS spektra interpretācija izmantojot molekulāras dinamikas simulācijas	Materiālu struktūra, teorija un modelēšana
10:15	Inga Jonāne	FeF ₃ struktūras modelēšana un analīze, izmantojot evolucionāros algoritmus	
10:30	Arturs Cintiņš	ODS tērauda struktūra analīze izmantojot Ti K-malas rentgenabsorbcijas spektroskopiju	
10:45	Reinis Ignatāns	Na _{1/2} Bi _{1/2} TiO ₃ -SrTiO ₃ -PbTiO ₃ cietā šķīduma struktūras atkarība no elektriskā lauka	
11:00	Kafijas pauze		
11:30	Aleksandrs Platonenko	Neitrālo punktteida defektu un frenkeļa pāru aprēķini no pirmajiem principiem korundā	
11:45	Aleksejs Gopejenko	Y, O un V _{Fe} difūziju barjeru <i>ab initio</i> aprēķini fcc-Fe režģī	Organiskie materiāli un fotonika
12:00	Andrejs Česnokovs	TiO ₂ nanocauruļu ģeometrijas un sastāva ietekme uz to elektronisko struktūru: <i>ab initio</i> modelēšana	
14:00	Andris Ozols	Atstarošanās režģi molekulāro azostiklu kārtiņās	
14:15	Raitis Gržibovskis	Limitējošie faktori enerģētisko līmeņu noteikšanai ar skenējošās Kelvina zondes metodi	
14:30	Jūlija Perveņeckā	Enerģētiskie līmeņi DMABI hromoforas saturošās molekulās	
14:45	Krista Klismeta	Fotoinducētā anizotropija azobenzolu saturošā molekulārajā stiklā	Organiskie materiāli un fotonika
15:00	Jānis Tjarve	Elektriskās vadāmības un lādiņnesēju lamatu līmeņu pētījumi tetracēna atvasinājumu plānās kārtiņās	
15:15	Kafijas pauze		

Stenda referāti		
1	Edgars Elsts	Ar terbiju, prazeodīmu, neodīmu un disproziju aktivētu stiklu un stikla keramiku pētījumi
2	Jānis Sperga	Ar Eu^{3+} un RZ joniem aktivētu oksifluorīdu stiklu un stikla keramiku luminiscences spektri
3	Larisa Grigorjeva	Ar Eu dopētu FAp un HAp keramiku luminiscence
4	Donats Millers	Skābekļa apmaiņa sistēmā metālu oksīds-atmosfēra
5	Mārtiņš Vanks	PLZT keramikas inducētās absorbcijas atkarība no temperatūras
6	Agnese Dravniece	Liofilizēta grafēna oksīda – benzola suspensija caurspīdīgu elektrodu izgatavošanai
7	Rolands Grants	Jonu enerģijas ietekme uz struktūras izmaiņām ar Xe joniem apstarotā LiF
8	Daina Riekstiņa	Dabīgo radionuklīdu koncentrācijas salīdzinājums Baltijas reģiona valstu keramikas materiālos
9	Daina Riekstiņa	Salaspils kodolreaktora dzesēšanas ūdens radioaktivitātes izmaiņas (2001.-2014.)
10	Antonija Dindune	Litija jonu vadītāji sistēmā $\text{Li}_4\text{Ti}_{1-x}\text{P}_2\text{O}_7$ ($x=0; 0,06; 0,2$)
11	Gints Kučinskis	LiFePO_4 litija jonu bateriju katodmateriāla sprieguma histerēze
12	Karīna Bikova	LiFePO_4 elektroforētiskā uznešana uz tērauda elektroda
13	Anna Dorondo	Nanoporaina oglekļa materiāla kārtiņu elektroforētiska uzklāšana no izopropanola un ūdens suspensijām
14	Mārcis Rublāns	Elektroforētiski uzklātu $\text{TiO}_2\text{-WO}_3$ kompozītu struktūra, optiskās un fotokatalītiskās īpašības
15	Andrejs Lūsis	TiO_2 nanodaļiņu pārklājuma uz stikla auduma iegūšana ar elektroforēzi
16	Olga Kiseļova	Cinka oksīdu plāno kārtiņu sintēze ar ekstrakcijas – pirolītisko metodi
17	Vilnis Dimza	Ar Mn iegūtas PLZT 8/65/35 elektrooptiskās keramikas polarizācijas īpatnības
18	Laura Stiebra	No reciklēta PET iegūtu poliuretānu putuplastu modificēšana ar oglekļa nanodaļiņām
19	Jūlija Hodakovska	Trīs komponentu membrānu pētījumi izmantošanai degvielas šūnās
20	Jānis Zemītis	Indija piejaukuma ferītā ietekmes izpēte uz struktūru, fizikālķīmiskām īpašībām un fotoaktivitāti plānās kārtiņās
21	Roberts Berķis	Elektroenerģijas savākšana no piesārņotu ūdeņu baseiniem, izmantojot mikroorganismu baterijas
22	Amanda Dolgā	Sintezēto ceolītu struktūras un sastāva raksturošana un ūdeņraža adsorbcijas pētījumi tajos
23	Gustavs Baumanis	Reciklēta grafīta vairāk-slāņu grafēna pielietojums elektrovadošas tintes izstrādē
24	Rihards Vaivods, Kārlis Lācis	TiO_2 nanostruktūru sintēze pielietojumiem ūdens attīrīšanai
25	Maksims Sokolovs	Elektronu lādiņa blīvuma integrēšanas parametru optimizācija Badera metodei
26	Mārtiņš Zubkins	Struktūra, elektriskās un optiskās īpašības ZnO:Ir plānajām kārtiņām, kas iegūtas ar reaktīvo magnetrono kopizsmidzināšanu
27	Vera Skvorcova	Irīdija jonu absorbcijas īpašības cinka-irīdija oksīda plānās kārtiņās
28	Anastasija Ivanova	Metālorganiskais svina halogenīdu perovskīta saules elements ar organiskajiem lādiņa transporta slāņiem

MUTISKIE REFERĀTI

OPTISKĀS ĪPAŠĪBAS UN DEFEKTI MATERIĀLOS

KRISTOBALĪTA LUMINESCENCE

Anatolijs Truhins, Krišjānis Šmits, Jānis Jansons, Aleksejs Kuzmins
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Kristobalīta luminiscences spektrā ir trīs galvenās luminiscences joslas. Joslai, kuras maksimums ir pie 400 nm, novērota desmitiem sekunžu ilga pēcspīdēšana. Luminiscences joslai ar maksimumu pie 270 nm ir maza intensitāte un luminiscence ātri dzīst. Abas minētās joslas ir saistāmas ar defektu luminiscenci. Trešās novērotās luminiscences joslas maksimums ir pie ~600 nm, šai joslai nav novērota pēcspīdēšana. Domājams, ka šī josla varētu būt kristobalītā autolokalizēto eksitonu (ALE) luminiscence. Kristobalīta ALE luminiscences enerģētisko iznākums novērtēts salīdzinot to ar α -kvarca luminiscenci, kurā apmēram 30% no absorbēto rentgenstaru enerģijas tiek transformēta ALE luminiscencē. Kristobalīta ALE luminiscences intensitāte izrādījās 4 reizes mazāka par tīra α -kvarca ALE luminiscences intensitāti, kas ļauj novērtēt, ka pētītajam kristobalīta paraugam ALE luminiscences enerģētiskais iznākums ir apmēram 7%.

LUMINESCENCE OF CRISTOBALITE

Anatolijs Truhins, Krišjānis Šmits, Jānis Jansons, Aleksejs Kuzmins
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The luminescence of cristobalite contains three main bands with different nature. One situated at 400 nm was also observed in afterglow during tens of seconds. Another at 270 nm is fast and is of low intensity. These two bands are ascribed to some defect. Another band at ~600 nm was not observed in afterglow and therefore could be ascribed to luminescence of self-trapped exciton (STE). The energetic yield of the cristobalite STE luminescence was determined by comparison with STE luminescence of α -quartz. The last is about 30 % of absorbed energy of x-ray. We get the luminescence intensity of cristobalite luminescence 4 times lower than pure α -quartz, therefore STE luminescence energetic yield of our cristobalite sample is ~7% as well.

The financial support of Latvian State research program IMIS² is greatly acknowledged.

AUGŠUP-PĀRVEIDOTĀ LUMINISCENCE AR ERBIJA JONIEM AKTIVĒTĀ OKSIFLUORĪDU STIKLĀ UN STIKLA KERAMIKĀ

Mārtiņš Osis, Guna Krieķe, Anatolijs Šarakovskis, Māris Springis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Darba gaitā tika iegūti oksifluorīdu stikli, kuru sastāvs ir $16\text{Na}_2\text{O}-9\text{NaF}-5\text{LaF}_3-7\text{Al}_2\text{O}_3-63\text{SiO}_2$, kam pievienots 3% ErF_3 (visi skaitļi norādīti mol%).

Termiski apstrādājot stikla paraugus dažādās temperatūrās (400-800°C), tika iegūtas NaLaF_4 nanokristālus saturošas stikla keramikas.

Paraugus ierosinot infrasarkanajā diapazonā, tika novērota augšup – pārveidotā luminiscence, ar Er^{3+} raksturīgām luminiscences joslām. Paraugiem tika izmērītas arī luminiscences dzišanas kinētikas, pēc kurām analizēti augšup-pārveidotās luminiscences mehānismi.

Balstoties uz eksperimentālajiem datiem, tiek spriests par augšup-pārveidotās luminiscences procesu dabu stikla un stikla keramikas paraugos, kā arī tiek parādīta kristāliskās fāzes ietekme uz augšup-pārveidotās luminiscences efektivitāti.

UP-CONVERSION LUMINESCENCE OF ERBIUM DOPED OXYFLUORIDE GLASS AND GLASS CERAMICS

Martins Osis, Guna Krieke, Anatolijs Sarakovskis, Maris Springis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

In this work erbium doped oxyfluoride glass samples were synthesized. The nominal composition of the glass samples was $16\text{Na}_2\text{O}-9\text{NaF}-5\text{LaF}_3-7\text{Al}_2\text{O}_3-63\text{SiO}_2$ with 3% ErF_3 .

Glass ceramics samples containing $\text{NaLaF}_4:\text{Er}^{3+}$ nanocrystals were obtained by thermal treatment of the precursor glass at different temperatures in the region of 400 – 800°C. Up-conversion luminescence spectra of both glass and glass ceramics samples were measured under excitation in the infrared spectral region. Bands typical for Er^{3+} were observed in the spectra of the up-conversion luminescence. Decay kinetics of the bands were measured and analyzed.

Based on the experimental data the nature of the mechanisms involved in the creation of the up-conversion luminescence are discussed, and the impact of the crystalline phase on the efficiency of the up-conversion luminescence is explored.

AUGŠUP-PĀRVEIDOTĀ LUMINISCENCE $\text{LaInO}_3\text{:Er}^{3+}$ MATERIĀLĀ

Kristaps Štrāls, Guna Krieķe, Anatolijs Šarakovskis, Māris Sprinģis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Augšup-pārveidotās luminiscences procesi ar augstu efektivitāti novērojami dažādos ar retzemju elementiem aktivētos materiālos.

Darba gaitā sintezēti $\text{LaInO}_3\text{:Er}^{3+}$ paraugi ar dažādām Er^{3+} koncentrācijām (0.01 – 10 mol%). Paraugiem, tos ierosinot ar starojumu infrasarkanajā spektra apgabalā, tika izmērīti augšup-pārveidotās luminiscences spektri un kinētikas.

Luminiscences spektru analīze rāda, ka, Er^{3+} koncentrācijai palielinoties, augšup-pārveidotajai luminiscences intensitātei ir novērojama koncentrācija dzēšana (sākot ar 2 mol%), savukārt no luminiscences kinētiku pētījumiem seko, ka augšup-pārveidotās luminiscences mehānisms mainās no ierosinātā stāvokļa absorbcijas uz enerģijas pārdevi starp Er^{3+} joniem.

Referātā tiks diskutēts par Er^{3+} koncentrācijas iespaidu uz materiālā notiekošajiem luminiscences procesiem.

UP-CONVERSION LUMINESCENCE IN $\text{LaInO}_3\text{:Er}^{3+}$

Kristaps Strals, Guna Krieke, Anatolijs Sarakovskis, Maris Springis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

High efficiency up-conversion luminescence processes are observed in various rare-earth doped materials. In this work $\text{LaInO}_3\text{:Er}^{3+}$ samples with different Er^{3+} concentrations (0.01 – 10 mol%) have been synthesized.

Up-conversion luminescence and luminescence decay kinetics excited in the infrared spectral region have been measured.

The analysis of the up-conversion luminescence spectra measured for the samples with different Er^{3+} content revealed presence of the concentration quenching (starting at 2 mol%). The transformation of excited state absorption mechanism to energy transfer mechanism of the up-conversion luminescence was noticed when the concentration of Er^{3+} was increased.

The impact of Er^{3+} concentration on the luminescence processes in the material is discussed in the presentation.

AlN NANOPULVERA LUMINESCENCE UN TĀS ATKARĪBA NO APKĀRTĒJĀS VIDES

Paula Jankovska¹, Valdis Korsaks¹, Laima Trinklere¹, Baiba Bērziņa¹, Jānis Grabis^{1,2}

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Neorganiskās ķīmijas institūts*

AlN ir viens no plaši pazīstamiem platzonu materiāliem, sastopams makroizmēros (monokristāli, polikristāliskie pulveri, keramikas) un dažādos nanoizmēru veidojumos (nanoadatas, nanostieņi, nanocaurules uc). AlN optiskās īpašības nosaka tā pielietojumu dažādās jomās, tādās kā gaismas starotāji, UV gaismas detektori uc. Skābekļa gāzes sensora īpašības nesen tika atklāts kādam citam materiālam – hBN, kas lielā mērā ir līdzīgs AlN. Tika konstatēts, ka, paraugam atrodoties skābekļa gāzē, samazinās tā luminiscences intensitāte.

Pētījuma mērķis ir AlN nanopulvera spektrāla raksturošana, ievietojot paraugu dažādās vidēs (vakuums, parasts gaiss, skābekļa gāze uc.).

AlN nanopulvera fotoluminiscences (PL) spektri un ierosmes (PLE) spektri tika pētīti plašā spektra rajonā un temperatūru intervālā. Tika novērots, ka zilo luminiscenci (BL), kuru veido vismaz divas joslas pie 410 nm un 480 nm, ietekmē paraugu aptverošs skābeklis. Luminiscences intensitāte ir maksimālā, ja paraugs atrodas vakuumā. Ja telpu, kurā atrodas paraugs, piepilda ar skābekli, luminiscences intensitāte krītas vismaz 2,3 reizes. Novērotais ļauj secināt, ka AlN nanopulveris ir perspektīvs materiāls skābekļa sensoriem.

LUMINESCENCE OF AlN NANOPOWDER AND ITS DEPENDENCE FROM ENVIRONMENT

Paula Jankovska¹, Valdis Korsaks¹, Laima Trinkler¹, Baiba Berzina¹, Janis Grabis^{1,2}

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

²*Institute of Inorganic Chemistry, Riga Technical University*

AlN is one of well known wide band gap materials available in macro size forms (single crystals, polycrystalline powder, and ceramics) and different nanosize formations (nanotips, nanorods, nanotubes etc). AlN is known to be prospective for several applications based on its optical properties such as light emitters, UV light detectors and others. Recently sensitivity for oxygen gas surrounding the sample based on its luminescence behavior was found for another material - hBN, which properties are very close to those of AlN.

The aim of the present investigation is spectral characterization of AlN nanopowder using different surroundings of sample (vacuum, conventional air, oxygen gas and others).

Photoluminescence (PL) spectra and its excitation (PLE) spectra were studied for AlN nanopowder within a wide spectral and temperature ranges. It was found that the blue luminescence (BL) consisting of at least two sub-bands at 410 nm and 480 nm is sensitive to oxygen gas surrounding the sample. The maximum of the BL intensity is reached when AlN sample is put into a vacuum. If a chamber where the sample is put in is filled up with an oxygen gas then the BL intensity is reduced ~2,3 times. It allows conclusion that AlN nanopowder is a prospective material for oxygen gas sensors.

AR SKĀBEKLI SAISTĪTU DEFEKTU IETEKME UZ AUGŠUP-PĀRVEIDOTĀS LUMINISCENCES ĪPAŠĪBĀM AR Er^{3+} AKTIVĒTĀ NaLaF_4 MATERIĀLĀ

Guna Doke¹, Guna Kriekse², Jurgis Grube¹, Anatolijs Šarakovskis¹, Māris Springis¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts*

Dažādi ar retzemju (RE) elementiem aktivēti fluorīdu un komplekso fluorīdu materiāli jau gadu desmitiem tiek izmantoti, lai pētītu augšup-pārveidotās (AP) luminiscences īpašības un iespējamās pielietojumus. Viena no būtiskākajām šādu materiālu problēmām ir ar skābekli saistītu defektu rašanās sintēzes procesā. Mūsu laboratorijā jau vairākus gadus tiek veikti padziļināti $\text{NaLaF}_4\text{:RE}$ pētījumi, tai skaitā ir izveidotas vairākas šī materiāla sintēzes metodes.

Darba gaitā, dažādās atmosfērās (gaisā, fluorā), tika sintezēti divi $\text{NaLaF}_4\text{:Er}^{3+}$ paraugi ar Er^{3+} koncentrāciju 2.0 mol%.

Abiem paraugiem tika veikti luminiscences, ierosmes spektru, kinētiku mērījumi ierosinot tos ar starojumu gan ultravioletajā, gan redzamajā, gan infrasarkanajā (IS) spektra apgabalā. Papildus tika veikti IS absorbcijas un ar struktūras izpēti saistīti mērījumi.

Apkopojot rezultātus, tika secināts, ka sintēze gaisā veicina ar skābekli saistītu defektu rašanos un šo defektu klātbūtne būtiski ietekmē AP luminiscences intensitāti, zaļās/sarkanās luminiscences joslu attiecību un AP luminiscences mehānismus.

IMPACT OF OXYGEN RELATED DEFECTS ON THE PROPERTIES OF UP-CONVERSION LUMINESCENCE OF Er^{3+} DOPED NaLaF_4 MATERIAL

Guna Doke¹, Guna Kriekse², Jurgis Grube¹, Anatolijs Sarakovskis¹, Maris Springis¹

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

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

Various rare earth (RE) doped fluoride and complex fluoride materials have been used for decades to study properties and possible applications of up-conversion (UC) luminescence. One of the main problems of such materials is emergence of oxygen-related defects in the process of the synthesis. In our laboratory in-depth studies of $\text{NaLaF}_4\text{:RE}$, including creation of different methods of synthesis, have been carried out for several years.

In this work, two $\text{NaLaF}_4\text{:Er}^{3+}$ samples with Er^{3+} concentration of 2.0 mol% were synthesized in different atmospheres (air, fluorine).

For both samples luminescence, excitation spectra, decay kinetics were measured by using excitation at ultraviolet, visible and infrared (IR) spectral region. In addition measurements of IR absorption and structural studies were performed.

Summarizing of the results showed that synthesis in air atmosphere stimulate formation of oxygen-related defects and the presence of these defects significantly impact intensity of UC luminescence, the green/red luminescence band ratio and UC mechanisms.

The financial support of VPP IMIS² is greatly acknowledged.

JAUNAS NETILTIŅA SKĀBEKLĀ CENTRA LUMINISCENCES JOSLAS KRISTĀLISKĀ SiO_2

Linards Skuja¹, Koichi Kajihara², Jurgis Grūbe¹, Andrejs Siliņš¹, Hideo Hosono³

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Tokijas Metropoles Universitāte*

³*Tokijas Tehnoloģiskais institūts*

Netiltiņa skābeklis (non-bridging oxygen hole centers, NBOHC) ir viens no nozīmīgākajiem defektiem stiklveida SiO_2 pielietojumos, jo tas ir galvenais optiskās absorbcijas cēlonis spektra redzamajā un tuvajā UV rajonā. Tas ir norautās saites tipa defekts, kas raksturīgs SiO_2 amorfajam stāvoklim, un tas nevar tikt radīts ar vienkāršu vakanču-starpmezglu mehānismu α -kvarcā. Tomēr tas ir novērojams ar neitroniem apstarotā α -kvarcā, kurā nanoizmēru amorfizēti apgabali veidojas gar daļiņu trekniem. Luminiscences pētījumos ir novēroti 2 NBOHC apakštipi ar kristāliski sakārotu apkārtni, kuri dod asas vienfonona līnijas (VFL) pie 1.933 (NBOHC 1) un 1.883 eV (NBOHC 2) [1]. Šajā darbā, izmantojot pārskaņojama OPO lāzera ierosmi 653-663nm rajonā un laikā izšķirtu reģistrāciju, ir atrasta trešā NBOHC luminiscences VFL pie 1.879 eV. Uz tās saistību ar NBOHC norāda tās līdzīgā ar NBOHC 1,2 enerģija un dzišanas laika konstante, un - vispārliciecinot – tās mijiedarbība ar raksturīgo 895 cm^{-1} Si-O saites stiepšanas svārstību. Šis centrs (NBOHC3) krasi atšķiras no NBOHC(1,2) ar stipru saistību ar zemas frekvences ($\approx 66\text{ cm}^{-1}$) svārstību modu. Tuvāka izpēte rāda, ka NBOHC(1,2) arī –taču vāji– mijiedarbojas ar šo modu. Domājams, ka šī moda ir saistīta ar netiltiņa skābekļa librācijas kustību.

NEW LUMINESCENCE BANDS OF NON-BRIDGING OXYGENS HOLE CENTER IN CRYSTALLINE SiO_2

Linards Skuja¹, Koichi Kajihara², Jurgis Grube¹, Andrejs Silins¹, Hideo Hosono³

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

²*Tokyo Metropolitan University*

³*Tokyo Institute of Technology*

Non-bridging oxygen hole center (NBOHC) is the most important intrinsic defect in many applications of glassy SiO_2 since it dominates the visible and UV optical absorption. It is a dangling-bond type defect, characteristic to amorphous form of SiO_2 . It cannot be created by a simple vacancy-interstitial mechanism in α -quartz. However, it is observed in neutron-irradiated α -quartz, where nano-sized amorphous regions form at the particle tracks. In luminescence studies, highly ordered NBOHC's showing two subtypes with sharp zero-phonon lines (ZPLs) at 1.933 (NBOHC 1) and 1.883 eV (NBOHC 2) were reported. In the present work, a third distinct NBOHC luminescence line at 1.879 eV was discovered by using tuned OPO laser near-resonance excitation scanned over 663-653nm region and time-resolved registration. The attribution of this line to NBOHC is based on the similarity of its spectral position and decay kinetics to other two lines and, most selectively, on its coupling to 895 cm^{-1} Si-O stretching vibration of NBOHC. This center (NBOHC 3) is distinct from NBOHC(1,2) by a strong interaction with low-energy ($\approx 66\text{ cm}^{-1}$) vibrational mode. A closer scrutiny shows that this mode is weakly coupled also to NBOHC(1,2). It is tentatively attributed to libration movement of terminal oxygen atom in NBOHC.

This study was in part supported by Latvian Science Council grant 302/2012.

PARAMAGNĒTISKĀS ZONDES OKSIFLUORĪDU STIKLA KERAMIKU STRUKTŪRAS PĒTĪJUMIEM

Andris Fedotovs, Uldis Rogulis, Andris Antuzevičs, Meldra Ķemere, Dzintars Bērziņš
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Izmantojot paramagnētiskus piejaukumjonus jeb tā saucamās paramagnētiskās zondes un elektronu paramagnētiskās rezonanses (EPR) spektroskopijas metodes, pēc paramagnētisko zonžu EPR spektriem ir iespējams konstatēt kristālisko fāžu klātbūtni un to kristalogrāfisko struktūru oksifluorīdu stikla keramiku materiālos.

Mūsu darbā tika veikti eksperimentālie kristālisko fāžu struktūru veidošanās pētījumi CaF_2 , BaF_2 , SrF_2 , LaF_3 saturošos oksifluorīdu stikla keramiku paraugos. Kā paramagnētiskie piejaukumi tika izmantoti pārejas metālu elementi Mn^{2+} , Fe^{3+} , Cr^{3+} , Cu^{2+} , kā arī retzemju elementi - Gd^{3+} , Eu^{3+} . Pamatojoties uz to, ka katrai kristāliskai struktūrai ir savas ķīmiskās un fizikālās īpatnības, t. i., kā piejaukumjoni spēj iebūvēties attiecīgajā kristāliskajā struktūrā un kā tie mijiedarbojas ar apkārtesošiem režģa atomiem, tika noskaidrots, ka tādos fluorīdos kā CaF_2 , BaF_2 , SrF_2 piemērotākās zondes ir Mn^{2+} , savukārt, kompleksas struktūras fluorīdos piemērotāki ir trīsvērtīgie pārejas elementu joni Fe^{3+} , kā arī retzemju elementi Gd^{3+} , Eu^{3+} . Darbā iegūtie rezultāti tiek salīdzināti ar EPR spektru teorētiskajiem aprēķiniem.

PARAMAGNETIC PROBES FOR OXYFLUORIDE GLASS CERAMICS STRUCTURE STUDIES

Andris Fedotovs, Uldis Rogulis, Andris Antuzevičs, Meldra Ķemere, Dzintars Bērziņš
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

By using paramagnetic impurity ions or so-called paramagnetic probes and electron paramagnetic spectroscopy (EPR) methods it is possible to study crystalline phases and their crystallographic structure in the oxyfluoride glass-ceramics materials.

In our work, the experimental studies of creation of the crystalline phases in the oxyfluoride glass-ceramics materials containing CaF_2 , BaF_2 , SrF_2 and LaF_3 have been carried out. The transition metal impurity ions Mn^{2+} , Fe^{3+} , Cr^{3+} , Cu^{2+} and also rare earth ions - Gd^{3+} , Eu^{3+} have been used as paramagnetic probes. Each crystalline environment has its specific physical and chemical characteristics and thus ability to host impurity ions. The most suitable impurity for simple binary structures is Mn^{2+} , while trivalent transition metal ions (Fe^{3+}) and rare earth elements Gd^{3+} , Eu^{3+} could be used in more complex fluorid structures. Obtained experimental results are compared with theoretical calculations of the EPR spectra.

Gd³⁺ CENTRS UN RADIĀCIJAS DEFEKTI ScF₃

Andris Antuzevičs, Uldis Rogulis, Juris Purāns
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Skandija fluorīds (ScF₃) ir perovskita tipa materiāls ar negatīvu termiskās izplešanās (NTE) koeficientu. Lai noskaidrotu NTE ietekmi uz elektronu paramagnētiskās rezonanses (EPR) spektru parametriem, veikti EPR mērījumi pie dažādām temperatūrām monokristāliskos un polikristāliskos ScF₃ paraugos.

Gd³⁺ centrs jons kristālā iebūvējas Sc³⁺ pozīcijā un atrodas kubiskā kristāliskajā laukā ar $g = 1,992$. EPR spektru parametru temperatūras atkarība liecina, ka Gd³⁺ centra lokālā apkārte izplešas pozitīvi ar temperatūru.

Pēc apstarošanas ar rentgenstariem polikristāliskos ScF₃ paraugos parādās jauni paramagnētiski centri, kas varētu būt saistīti ar skābekļa piejaukumiem kristālā.

Gd³⁺ CENTRE AND RADIATION DEFECTS IN ScF₃

Andris Antuzevics, Uldis Rogulis, Juris Purans
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Scandium fluoride (ScF₃) is a perovskite type material with a negative thermal expansion (NTE) coefficient. In order to investigate the effect of NTE on electron paramagnetic resonance (EPR) spectra parameters, EPR measurements have been made at different temperatures for single crystal and polycrystalline samples.

Gd³⁺ replaces Sc³⁺ ion in the crystal and is surrounded by a cubic crystal field with $g = 1.992$. Temperature dependence of EPR spectra parameters indicates that the local environment of Gd³⁺ centre expands positively with temperature.

Irradiation with x-rays creates new paramagnetic defects in polycrystalline ScF₃ samples that could be associated with oxygen impurities in the crystal.

AR ELEKTROLĪTISKO OKSIDĒŠANU PLAZMĀ IEGŪTIE ALUMĪNIJA OKSĪDA PĀRKLĀJUMI: SINTĒZE UN RAKSTUROJUMS

Aleksejs Zolotarjovs¹, Krišjānis Šmits¹, Donats Millers¹, Mārtiņš Vanks¹, Larisa Grigorjeva¹,
Reinis Drunka², Reinis Ignatāns¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskās Universitātes Neorganiskās ķīmijas institūts*

Elektrolītiskā oksidēšana plazmā (PEO) ir viena no virsmas oksidēšanas metodēm, kurā iegūtie metālu oksīdu pārklājumi uz metāliem raksturojas ar izcilām mehāniskām (ciētība un nodiluma izturība) un ķīmiskām īpašībām.

Šī pētījuma ietvaros veikti morfoloģijas, struktūras, sastāva kā arī optisko īpašību mērījumi (EDX, XRD, SEM, mikrociētības, pārklājumu luminiscence, plazmas emisijas spektroskopija) gan PEO procesā, gan anodizācijas procesā iegūtiem alumīnija oksīdu pārklājumiem. Pētījuma mērķis ir izveidot efektīvu un drošu pārklājumu izveides metodi.

Pārsvārā iegūtos pārklājumus uz alumīnija virsmas veido Al₂O₃, kaut gan ir iespējams izveidot sarežģītākus pārklājumus mainot PEO parametrus un procesā izmantoto elektrolītu. Parādīts, ka atkarībā no PEO parametriem ir iespējams izveidot alumīnija oksīda pārklājumus ar Eu jonu piemaisījumu, kurā novērojama Eu²⁺ vai Eu³⁺ luminiscence. Šādi ar retzemju joniem dopētie alumīnija oksīdi var tikt izmantoti dažādos luminiscentajos pielietojumos, tādejādi atverot jaunas PEO procesa un pārklājumu izmantošanas iespējas. Pētījums veikts sadarbībā ar Elgootech Ltd.

ALUMINA COATINGS OBTAINED BY PLASMA ELECTROLYTIC OXIDATION: SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION

Aleksejs Zolotarjovs¹, Krišjānis Šmits¹, Donats Millers¹, Martins Vanks¹, Larisa Grigorjeva¹,
Reinis Drunka², Reinis Ignatāns¹

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

²*Institute of Inorganic Chemistry, Riga Technical University*

Plasma electrolytic oxidation (PEO) is one of advanced surface oxidation methods used for producing oxide coatings on metals with great mechanical (wear resistance and hardness) as well as chemical (corrosion resistance, chemical stability) properties.

During this research coatings acquired in both PEO process and anodization on aluminium were studied using a variety of approaches: morphology and structure measurements (EDX, XRD, SEM, microhardness) and optical measurements (coating luminescence, plasma optical emission spectroscopy) to develop a method for reliable and efficient coating production.

Typically Al₂O₃ coatings on aluminium are formed; however, more complex coatings can be produced by changing electrolyte type or discharge rate parameters. For example, it was discovered that by changing PEO parameters, preparation of alumina coatings doped with Eu ions with Eu²⁺ or Eu³⁺ luminescence is possible, which opens wide variety of new applications for PEO method itself and coatings prepared by it as rare earth ion doped aluminium oxides can be used as luminescent materials. This research was done in collaboration with Elgootech Ltd

DISLOKĀCIJAS BI JONU TREKOS DAŽĀDOS LENĶOS APSTAROTĀ LiF

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

Izpētīta ar GeV enerģijas kompleksus serdi saturošus trekus veidojošiem Bi joniem apstarota LiF dislokāciju struktūra. Pētījumiem izmantota ķīmiskā kodināšana apvienojumā ar atomspēku mikroskopiju un nanoindentēšanu. Apstarošana veikta normālā un slīpā leņķī (no 90° līdz 30° attiecībā pret apstaroto virsmu) fluencu diapazonā no 10^9 līdz 10^{12} joni/cm², kas nodrošina gan atsevišķi stāvošus trekus, gan treku pārklāšanos. Visiem apstarošanas leņķiem tika novērotas dislokāciju rindas gar individuāliem trekiem. Tiek uzskatīts, ka veidojas starpmezglu tipa dislokāciju cilpas. Salīdzinot normālā leņķī un slīpos leņķos apstarotus paraugus var redzēt, ka dislokāciju skaits uz treka garuma vienību slīpo leņķu gadījumā ir lielāks. Šo novērojumu var izskaidrot ar Šmida likumu un ar kritiskā bīdes spriegumu projekciju, kas nepieciešama dislokāciju cilpu emitēšanai, un kas atkarīga no jonu kūļa leņķa pret dislokāciju vieglās slīdēšanas virzienu. Treku pārklāšanās stadijā jonu izraisīto dislokāciju blīvums pieaug. Būtiska cietināšanās apstiprina jonu izraisīto dislokāciju uzkrāšanos. Kopumā, rezultāti ļauj secināt, ka dislokāciju veidošanās jonu trekos ir būtiska treku uzbūves sastāvdaļa.

DISLOCATIONS IN Bi TRACKS IN LiF IRRADIATED AT VARIOUS BEAM INCIDENCE ANGLES

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

Dislocation structure in LiF crystals created by irradiation with GeV-energy Bi ions, which produce complex tracks exhibiting core damage has been studied. Chemical etching combined with AFM and nanoindentation have been used as investigation methods. Irradiations were performed at normal and oblique incidences of the ion beam (from 90° to 30° in respect to the irradiated surface) at fluences ranging from 10^9 to 10^{12} ions/cm² ensuring formation of separate as well as overlapping tracks. For all investigated beam incidence angles results show rows of dislocation loops along individual ion tracks. Formation of interstitial type prismatic dislocations is suggested. When samples irradiated at normal and oblique incidences are compared, it can be seen that a number of dislocations per length of a track is higher in the case of oblique irradiation angle. This observation could be explained by the Schmid's law and the projection of a necessary critical shear stress required for the emission of dislocation loops, which depends on the angle of incident ion beam in respect to the direction of easy glide of dislocations. At the stage of track overlapping the density of ion-induced dislocations increases. Substantial hardening confirms accumulation of ion-induced dislocations.

In summary, the result allows to conclude that creation of dislocations along ion path is an essential feature of the track damage.

KODOLFIZIKA UN KODOLSINTĒZE

EUROFUSION: EIROPAS TERMISKĀS KODOLSINTĒZES KOPEĀJA PROGRAMMA

Andris Šternbergs

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Kopš 1970-tajiem gadiem, kad Eiropas kodolsintēzes laboratorijas apvienoja spēkus, lai veidotu un darbotos Kopīgajā Eiropas Torā (JET), tās nepārtraukti attīstīja savstarpējo sadarbību. Pētniecības pasākumu koordinēšanai ārpus JET, Asociācijas 1999. gadā apvienojās Eiropas Kodolsintēzes attīstības nolīgumā EFDA.

EUROfusion konsorcijs tika izveidots 2014. gadā, kā nākošais resursu koncentrācijas un sadarbības attīstības solis. EUROfusion finansē kodolsintēzes pētniecības darbību saskaņā ar "Kodolsintēzes enerģijas attīstības plānu" un Programmu, atbilstoši lokālās EUROfusion organizācijas konkursā iegūtajiem projektiem tematiski orientētās Programmas darba paketēs. Programmai ir divi pamatmērķi: gatavoties ITER palaišanai un attiecīgajiem eksperimentiem tajā, un izstrādāt koncepciju kodolsintēzes spēkstacijas demonstrācijas modelim DEMO.

Latvijas EUROfusion organizācijas „Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts” (ISSP UL) ietvaros sadarbojas laboratorijas no trīs Latvijas Universitātes institūtiem: LU CFI, LU FI un LU NĶI.



EUROFUSION: EUROPEAN FUSION JOINT PROGRAMME

Andris Sternberg

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Since the 1970s, when Europe's fusion laboratories joined forces to build and operate the Joint European Torus (JET), they continuously developed their collaboration. To coordinate research activities beyond JET, the Associates formed the European Fusion Development Agreement, EFDA, in 1999. The EUROfusion consortium being established in 2014, takes this development another step further. EUROfusion funds all fusion research activities in accordance with the "Roadmap to the realisation of fusion energy". EUROfusion funds the Research Units in accordance with their participation to the mission-oriented Work Packages outlined in the Consortium Work Plan. In general the Programme has two aims: preparing for ITER experiments and developing concepts for the fusion power demonstration plant DEMO.

The Latvian EUROfusion organization Institute of Solid State Physics, University of Latvia (ISSP UL) incorporate laboratories from three Latvian University institutes: ISSP, IPUL and ICP UL.

JET VAKUUMA KAMERAS PUTEKĻU STRUKTŪRA UN ĶĪMISKAIS SASTĀVS

Eļina Pajuste¹, Gunta Ķizāne¹, Līga Avotiņa¹, Zane Ozoliņa², Anna Widdowson³, JET contributors^{3*}

EUROfusion konsorcijs, JET, Kalemas zinātniskais centrs

¹*Ķīmiskās fizikas institūts, Latvijas Universitāte*

²*Ķīmijas fakultāte, Latvijas Universitāte*

³*CCFE, Kalemas zinātniskais centrs*

Plazmai mijiedarbojoties ar vakuuma kameras sienu materiāliem, kodolsintēzes iekārtās var veidoties putekļi [1]. Putekļi var būt radioaktīvi tritija satura dēļ, kā arī ķīmiski aktīvi un toksiski. Vēl jo vairāk, tie negatīvi ietekmē kodolsintēzes plazmas darbību.

Dotajā pētījumā analizēti putekļi, kas iegūti 2010. gadā no JET vakuuma kameras iekšējā divertora. Putekļu izmērs, struktūra un elementu sastāvs noteikts izmantojot SEM un EDX metodes. Pēc to struktūras, ķīmiskā sastāva un iespējamā veidošanās mehānisma putekļu daļiņas var tikt iedalītas sekojošās grupās: slāņainas pārslas, kas veidojušās atslāņojoties nosēdumu slānim, šķiedru fragmenti, kas atdalījušies mehāniski apstrādājot sienas, neregulāras formas daļiņas ar augstu metālu koncentrāciju, kas varētu būt veidojušās, kondensējoties iztvaikojušam/izkusušam sienu materiālam, kā arī daļiņas ar gludu virsmu un augstu oglekļa saturu, kas varētu būt veidojušās no atomāriem prekursoriem plazmā [2]. Analizētajā paraugā lielākā daļa putekļu daļiņu atbilst pārslveida nosēdumu slāņa un šķiedru fragmentiem. Līdz ar to var secināt, ka nosēdumu slāņa atslāņošanās ir galvenais putekļu veidošanas mehānisms JET vakuuma kameras divertorā. Tas sakrīt arī ar agrāk veiktu pētījumu rezultātiem, kuros noskaidrots, ka nosēdumu slānis ir galvenais putekļu avots [3].

STRUCTURE AND CHEMICAL COMPOSITION OF THE DUST RETRIEVED FROM JET VACUUM VESSEL

Eļina Pajuste¹, Gunta Ķizāne¹, Līga Avotiņa¹, Zane Ozoliņa², Anna Widdowson³, JET contributors^{3*}

EUROfusion Consortium, JET, Culham Science Centre

¹*Institute of Chemical Physics, University of Latvia*

²*Faculty of Chemistry, University of Latvia*

³*CCFE, Culham Science Centre*

Dust can be produced in the fusion devices as a result of plasma – first wall materials interactions [1] and it is considered as an important safety and operational issue. This dust can be radioactive due to tritium inventory, chemically reactive and toxic. Moreover, it may adversely impact fusion plasma performance.

In this study, dusts collected from JET vacuum vessel inner divertor before installation of ITER-like wall, in 2010 have been analysed. Size, structure and the elemental composition have been measured of the dust particles by the means of SEM and EDX methods. Analysed dust particles can be categorized according to their structure, chemical composition and possible formation mechanism as follows: laminar, layered flakes formed as a result of deposition layer delamination, fragments of the fibres formed mechanically during maintenance, irregular shaped particles with higher content of metals possibly formed during plasma instabilities by condensation of vaporized/melted wall materials, and particles with smooth surface and high carbon content that might be formed in the plasma edge by growth from atomic precursors as described in the literature [2]. In the analysed sample dominant fraction of the particles correspond to the fragments of the fibres and deposition layer flakes. Therefore it can be assumed that flaking of the deposition layer is the main mechanism of dust formation in the inner divertor of the JET vacuum vessel. It corresponds well to the results of earlier studies where it was found that the re-deposited material is a major source of dust [3].

[1] Widdowson et al., *Journal of Nuclear Materials*, 2013. 438: p. S827-S832.

[2] Rosanvallon et al, *Fusion Engineering and Design*, 2008. 83(10–12): p. 1701-1705.

[3] Widdowson, A., 2008, IAEA-CRP Meeting: Vienna.

See the Appendix of F. Romanelli et al., Proceedings of the 25th IAEA Fusion Energy Conference 2014, Saint Petersburg, Russia

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

APSTAROTU OGLEKĻA DIVERTORA MATERIĀLU STRUKTŪRAS UN SASTĀVA SPEKTROSKOPISKA ANALĪZE

Līga Avotina^{1,2,5}, Elīna Pajuste¹, Mihails Halitovs¹, Gunta Kizāne¹, Aurelian Marcu², Mihail Lungu³
Corneliu Porosnicu², Cristiana Grigorescu⁴, Cristian P. Lungu², Stefan Antohe⁵

¹*Latvijas Universitātes Ķīmiskās fizikas institūts*

²*Nacionālais Lāzeru, plazmas un radiācijas fizikas institūts*

³*Materiālu izpētes institūts*

⁴*Nacionālais Optoelektronikas pētniecības un attīstības institūts*

⁵*Bukarestes Universitātes Fizikas fakultāte*

Oglekļa materiālus lieto kodolsintēzes reaktoros kā divertora materiālus to zemā atomskaitļa un labās siltumvadītspējas (līdz $\sim 250 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$) dēļ. Kodolsintēzes reakciju laikā notiek materiālu erozija, putekļu veidošanās un daļēja to nosēšanās, kodoldegvielas uzkrāšanās nosēduma slānī, var veidoties fullerēni, garu ķēžu ogļūdeņraži, rezultātā samazinot divertora materiālu izmantošanas laiku un traucējot kodolsintēzes reakcijas norisei.

Augstas enerģijas plūsmu ($10\text{-}100\text{MWm}^{-2}$), kāda iespējamās tokamaka veida reaktoros, modelē, apstarojot ar lāzeri ($\lambda=800 \text{ nm}$) oglekļa divertora materiālus, un novērtē viena un vairāku impulsu starojuma ietekmi.

Divertora materiālus pirms un pēc apstarošanas analizēja ar Ramana spektroskopijas metodi. Labākai fotonu absorbcijas mehānismu un fotonu ierosināto pārvērtību izpratnei darbā izmantoja atšķirīgus viļņu garumus (488, 514 un 633 nm) ar dažādiem stara iespiešanās dziļumiem.

Femto- un nanosekunžu lāzera apstarošanas laikā radītas izmaiņas grafitā kristālu izmēros, sp^2 hibridizētu atomu konfigurācijā un sp^3 hibridizētu oglekļa atomu koncentrācijā.

Izpratne par reakciju mehānismiem femto- un nanosekunžu apstarošanas laikā ļaus labāk saprast tritija uzkrāšanās, kā arī putekļu un plēkšņu veidošanās procesus kodolsintēzes reaktorā.

SPECTROSCOPIC INVESTIGATIONS ON STRUCTURAL PROPERTIES OF IRRADIATED CARBON BASED DIVERTOR MATERIALS

Līga Avotina^{1,2,5}, Elīna Pajuste¹, Mihails Halitovs¹, Gunta Kizane¹, Aurelian Marcu², Mihail Lungu³,
Corneliu Porosnicu², Cristiana Grigorescu⁴, Cristian P. Lungu², Stefan Antohe⁵

¹*Institute of Chemical Physics, University of Latvia*

²*National Institute for Laser, Plasma and Radiation Physics*

³*Institute for Material Research*

⁴*National Institute R&D for Optoelectronics*

⁵*University of Bucharest, Faculty of Physics*

Carbon based materials are used as divertor materials for fusion reactors due to low Z and good thermal conductivity (up to $\sim 250 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$). However, during plasma reactions, plasma-wall interactions like: erosion, formation and deposition of dust, fuel retention in redeposited layer, formation of fullerenes, long-chain hydrocarbons, can take place, decreasing lifetime of divertor materials and efficiency of fusion reaction.

In order to simulate effects of the high-energy fluxes possible in the tokamak reactors ($10\text{-}100\text{MWm}^{-2}$), carbon based divertor materials were irradiated with single and multiple laser ($\lambda=800 \text{ nm}$) pulses.

Targets were characterized before and after laser irradiation by Raman spectroscopy. Different wavelengths (488, 514 and 633 nm) with different penetration depth were used for a better understanding of the photon absorption and photo-induced transformations.

Changes in graphite crystallite sizes, configuration of sp^2 and content of sp^3 hybridized carbon are observed after femto- and nanosecond laser pulses interaction with the carbon materials

Understanding of reaction mechanisms taking place during femto- and nanosecond irradiation will allow a better understanding of dust and flakes formation and tritium accumulation in fusion reactor.

The financial support of Ministry of Education and Science of Latvia and Romanian National Authority for Scientific Research is greatly acknowledged.

ŽIROTRONU IZMANTOŠANA ELEMENTĀRDAĻIŅU, KODOLU UN CIETVIELU FIZIKĀ

Olģerts Dumbrājs

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Žirotrons ir īpaša radio lampa, kas ģenerē radio viļņus milimetru diapazonā. Žirotroni galvenokārt tiek izmantoti kodolplazmas karsēšanai, lai izraisītu kontrolētas kodoltermiskās reakcijas uz Zemes, taču pēdējā laikā žirotronus sāk plaši izmantot arī elementārdaļiņu, kodolu un cietvielu fizikā.

Nesen tika izmērīta hipersmalka pāreja pozitronija (elektrona un pozitrona saistīts stāvoklis) pamatstāvoklī. Hipersmalka struktūra starp orto-pozitroniju un para-pozitroniju ir apmēram 203 GHz plata. Mērījums tika veikts ar žirotronu, kas ģenerē viļņus ar frekvenci 202.89 GHz. Izmērītā pārejas varbūtība labi saskan ar teorētisko vērtību, ko paredz kvantu elektrodinamika.

Liela ātruma frekvences modulācija 460 GHz žirotronā tika izmantota, lai pārnestu elektronu spinu magnetizāciju uz kodolu spiniem, tādējādi palielinot dinamiskās kodolu polarizācijas pastiprināšanas faktoru kodolu magnētiskās rezonances spektroskopijā.

Zemāku frekvenču (15-50 GHz) žirotroni paver jaunas perspektīvas jaunu keramisku un kompozīto materiālu radīšanas tehnoloģijā. Pie šīm jaunām tehnoloģijām pieder ultraizkliedētu un nanostrukturēt keramisku materiālu apdedzināšana, keramisku materiālu sakausēšana ar keramiskiem materiāliem un ar metāliem, ātra pusvadītāju un dielektrisko materiālu rūdīšana, dažādu pārklājumu radīšana.

APPLICATIONS OF GYROTRONS IN PARTICLE, NUCLEAR AND SOLID STATE PHYSICS

Olģerts Dumbrājs

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

A gyrotron is a special tube generating radio waves in the millimeter wave range. Gyrotrons are mainly used to heat nuclear fusion plasma, in order to induce controlled thermonuclear reactions on Earth. However, they have found a wide utility also in particle, nuclear and solid state physics.

The first direct measurement of the hyperfine transition of the ground state positronium (a bound state of an electron and a positron) was performed recently. The hyperfine structure between ortho-positronium and para-positronium is about 203 GHz. This was measured by means of a gyrotron which produces 202.89 GHz radiation. The measured transition probability is in good agreement with the theoretical value predicted by quantum electrodynamics.

The high speed frequency modulation of a 460 GHz gyrotron was used to transfer magnetization of electron spins nuclear spins increasing the enhancement factor of the Dynamic Nuclear Polarization in Nuclear Magnetic Resonance spectroscopy. Use of lower frequency (15-50 GHz) gyrotrons opens new perspectives for the technology of creating novel ceramic and composition materials. Baking of ultra-disperse and nanostructured ceramic materials, joining ceramic materials and ceramics with metals, rapid annealing of semiconducting and dielectric materials, creating coatings with various functionality, etc. are among these novel techniques.

KODOLA FORMAS MAIŅAS IETEKME UZ NEPĀRA-NEPĀRA RĒNIJA UN IRĪDIJA IEROSINĀTO STĀVOKĻU SPEKTRIEM

Tamāra Krasta, Jānis Bērziņš, Ļubova Simonova
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Izmantojot ģeometrisku rotatora plus divas kvazidaļiņas modeli ar modificēto oscilatora potenciālu [1] tika veikti ierosināto stāvokļu enerģiju un viļņu funkciju sajaukšanās amplitūdu aprēķini nepāra-nepāra kodoliem $^{186,188}\text{Re}$ ($Z=75$) un $^{190,192,194}\text{Ir}$ ($Z=77$). Iegūtie rezultāti tika salīdzināti ar šo kodolu eksperimentāli novērotajiem ierosināto stāvokļu spektriem. Tika konstatēts, ka, kamēr ^{186}Re ($N=111$) kodoliem piemīt stabila aksiāli-simetriska deformācija ($\varepsilon_2=0.2$, $\varepsilon_4=0.065$), tā kaimiņu nepāra-nepāra kodolam ^{188}Re ($N=113$) spektrā ir novērojamas atsevišķas neaksialitātes pazīmes divu kvazidaļiņu stāvokļiem, kas saistīti ar augstas j vērtības daļiņu orbītām. Lai aprakstītu ^{188}Re eksperimentāli novērojamo augsto pozitīvās pāriības līmeņu blīvumu, šiem stāvokļiem ir jāizmanto deformācijas parametri $\varepsilon_2=0.18$, $\varepsilon_4=0.05$, $\gamma=20^\circ$. Irīdija kodolu ar $N=113\div 117$ ierosināto enerģijas līmeņu interpretācijai tika izmantots divu kvazidaļiņu plus triaksiālā rotatora modelis ar $\gamma>15^\circ$. Tomēr aprēķinu rezultāti neļāva iegūt labu kvantitatīvu saskaņu ar eksperimentālajiem $^{190,192,194}\text{Ir}$ spektriem. Analīze rāda, ka šīs nesaskaņas iespējamākais iemesls ir nepietiekama spin-orbitālās mijiedarbības ievērošana izmantotajā kodola modelī.

EFFECTS OF NUCLEAR SHAPE CHANGE OBSERVED IN THE SPECTRA OF ODD-ODD RHENIUM AND IRIDIUM EXCITED STATES

Tamara Krasta, Janis Berzins, Lubova Simonova
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Energies and mixing amplitudes of excited states of odd-odd $^{186,188}\text{Re}$ ($Z=75$) and $^{190,192,194}\text{Ir}$ ($Z=77$) nuclei have been calculated using geometrical rotor plus two quasiparticles model with modified oscillator potential [1]. Obtained results have been compared with the observed experimental excited state spectra. It has been found that, while ^{186}Re ($N=111$) nuclei have stable axially-symmetric deformation ($\varepsilon_2=0.2$, $\varepsilon_4=0.065$), in the spectra of its neighbor odd-odd nucleus ^{188}Re ($N=113$), one observes some indications of non-axiality for two quasiparticle states involving high j value particle orbitals. In order to describe experimentally observed high density of positive parity levels in ^{188}Re , one should apply for these states deformation parameters $\varepsilon_2=0.18$, $\varepsilon_4=0.05$, $\gamma=20^\circ$. The excited energy levels of iridium nuclei with $N=113\div 117$ have been interpreted in terms of two quasiparticle plus triaxial rotor model with $\gamma>15^\circ$. However, the results of calculations failed to give good quantitative agreement with experimental $^{190,192,194}\text{Ir}$ spectra. Analysis shows that the most probable cause of this failure is the insufficient accounting for spin-orbital interaction in the used nuclear model.

[1] S.E. Larsson, G. Leander, I. Ragnarsson, Nucl. Phys. A307, 189 (1978)

VOLFRAMA PĀRKLĀJUMU IETEKME UZ TRITIJA AKTIVITĀTI ĀRĒJĀS UN IEKŠĒJĀS SIENAS DIVERTORA MATERIĀLOS

Mihails Halitovs¹, Gunta Ķizāne¹, Līga Avotiņa¹, Jari Likonen², Nicolas Bekris³,
Catalin Stan-Sion⁴, JET līdzstrādnieki^{5*}

¹Latvijas Universitātes Ķīmiskās fizikas institūts; ²VTT Technical Research Centre of Finland, Finland;

³Karlsruhe Institute of Technology, Germany; ⁴Horia Hulubei National Institute of Physics and
Nuclear Engineering, Romania; ⁵CCFE, Culham Science Centre, Abingdon, OX14 3DB, UK

Volframs ir pamatmateriāls Starptautiskā kodolsintēzes eksperimentālā reaktora (ITER) divertora daļā. Galvenokārt dēļ tā augstās mehāniskās un termiskās izturības un zemās tritija caurlaidības spējas. Pētījuma mērķis ir izvērtēt volframa pārklājuma efektivitāti uzkrātā tritija samazināšanā uz dažādu Apvienotā Eiropas tora (JET) kodolsintēzes reaktora divertora ķieģeļu virsmas.

Pētījumā veikta 2005.-2007. un 2010.-2012. gada JET kampaņās izmantoto divertora ķieģeļu virsmas paraugu analīze. Divertora ķieģeļu pozīcijās 1 un 3 (iekšējā siena), kā arī pozīcijās 7 un 8 (ārējā siena) analīze veikta ar pilnīgas oksidēšanas un šķidrās scintilācijas metožu izmantošanu.

Iekšējās divertora sienas virsmas paraugu pētījumu rezultāti norāda uz ievērojamu tritija aktivitātes samazināšanos salīdzinājumā ar tās pašas pozīcijas nepārklātiem oglekļa kompozītmateriālu (CFC) virsmas paraugiem. Nepārklāto divertora pozīcijas 3 ķieģeļa paraugu vidējā virsmas aktivitāte ir $10^6 \text{ Bq} \cdot \text{g}^{-1}$. Vienlaikus W-pārklāto virsmas paraugu aktivitāte analogiskās pozīcijās ir vien ap $10^4 \text{ Bq} \cdot \text{g}^{-1}$. Ārējās divertora sienas paraugu analīze nenorāda uz ievērojamām izmaiņām tritija aktivitātē starp nepārklātiem un W-pārklātiem virsmas paraugiem. Vidējā aktivitāte abu veidu divertora ķieģeļu virsmas paraugiem ir vidēji $5 \cdot 10^4 \text{ Bq} \cdot \text{g}^{-1}$.

Pētījums apstiprina pieņēmumus, ka metālisko plazmas saskares materiālu izmantošana JET kodolsintēzes reaktora vakuuma kamerā ievērojami samazina kodolsintēzes degvielas uzkrāšanos. Tā rezultātā tiek samazināta arī tritija īpatnējā aktivitāte uz materiālu virsmas. Rezultāti norāda uz to, ka lielākā efektivitāte tritija aktivitātes samazināšanā tiktu panākta divertora iekšējās sienas apgabalā, kas pakļauta lielākai enerģijas un daļiņu plūsmas iedarbībai. Divertora ārējās sienas apgabalā ar mazāku materiālu tiešu mijiedarbību ar plazmu tritija aktivitātes samazinājums uz virsmas ir nenozīmīgs salīdzinājumā ar nepārklātiem materiāliem un ievērojamas virsmas aktivitātes izmaiņas nav novērotas.

THE INFLUENCE OF TUNGSTEN COATINGS ON TRITIUM ACTIVITY IN THE OUTER AND INNER WALL DIVERTOR MATERIALS

Mihails Halitovs¹, Gunta Ķizāne¹, Līga Avotiņa¹, Jari Likonen², Nicolas Bekris³,
Catalin Stan-Sion⁴, JET contributors^{5*}

¹University of Latvia, Institute of chemical physics; ²VTT Technical Research Centre of Finland,
Finland; ³Karlsruhe Institute of Technology, Germany; ⁴Horia Hulubei National Institute of Physics
and Nuclear Engineering, Romania; ⁵CCFE, Culham Science Centre, Abingdon, OX14 3DB, UK

Tungsten is the material of choice for the International Thermonuclear Experimental Reactor (ITER) divertor region due to its thermal and mechanical stability and low tritium permeability. The research focuses on tungsten coating efficiency at reducing the accumulated amount of tritium on the surface of various Joint European Torus (JET) divertor tiles.

A post-mortem analysis of JET 2005-2007 and 2010-2012 campaign divertor tile surface samples was done. A method of full combustion and liquid scintillation analysis was performed on samples of divertor tiles 1 and 3 (inner wall) and tiles 7 and 8 (outer wall).

The results of inner divertor wall tile surface samples show gradual decrease in tritium activity comparing to uncoated carbon fibre composite (CFC). Tile 3 uncoated samples have average tritium surface activity at $10^6 \text{ Bq} \cdot \text{g}^{-1}$ while W-coated tile surface samples have surface activity at the order of $10^4 \text{ Bq} \cdot \text{g}^{-1}$. The analysis of outer divertor wall samples does not show distinct difference between uncoated CFC tile and W-coated tile tritium activity on the surface. The average surface activity of both types of samples is at $5 \cdot 10^4 \text{ Bq} \cdot \text{g}^{-1}$ with no distinct variation between the two types of tiles.

The research confirms that the operation with the metal wall in JET efficiently reduces fuel inventory in PFC. As a result, the tritium surface activity is also reduced. The results show that the highest efficiency of tritium activity decrease could be achieved at the inner divertor wall region that has higher heat loads and particle flux. While in the outer divertor wall region with less direct plasma-surface interaction the decrease of surface activity comparing to uncoated tile samples is minimal and a gradual difference of surface activity changes was not observed.

* See the Appendix of F. Romanelli et al., Proceedings of the 25th IAEA Fusion Energy Conference 2014, Saint Petersburg, Russia
This work has been carried out within the framework of the EUROfusion Consortium and has received funding from the Euratom research and training programme 2014-2018 under grant agreement No 633053. The views and opinions expressed herein do not necessarily reflect those of the European Commission.

LITIJA ORTOSILIKĀTA MINILODĪŠU AUGSTTEMPERATŪRAS RADIOLĪZE PAĀTRINĀTO ELEKTRONU IETEKMĒ

Artūrs Zariņš¹, Gunta Kizāne¹, Arnis Supe¹, Larisa Baumanē², Regina Knitter³,
Matthias Kolb³, Oskars Valtenbergs¹

¹ *Latvijas Universitātes Ķīmiskās fizikas institūts*

² *Latvijas Organiskās sintēzes institūts*

³ *Karlsruhes Tehnoloģiju institūts*

Litija ortosilikāta (Li_4SiO_4) minilodītes ar 2,5% silīcija dioksīda (SiO_2) piedevu ($\varnothing=0,25-0,63$ mm), kas ir sintezētas ar *standarta* kausējuma-izsmidzināšanas metodi, ir akceptētas kā tritiju ģenerējošā keramika Eiropas Savienības izvirzītajā Hēlija dzesētajā lodīšu slāņu jeb HCPB (Helium Cooled Pebble Bed) moduļa koncepcijā. Pašlaik standarta Li_4SiO_4 minilodītēm ir aktuālas dažas funkcionālas un tehnoloģiskās problēmas: relatīvi zema mehāniskā stabilitāte, ražošanas metodes relatīvi zemā efektivitāte u.c. Finansiālu un ekoloģisku apsvērumu dēļ ir būtiski novērtēt ar dažādām sintēzes metodēm izgatavotas un sagatavotas tritiju ģenerējošās keramikas radiācijas stabilitāti, kā arī noteikt un novērst radiācijas stabilitātes samazināšanas cēloņus. Dažādi sintezētu un sagatavotu Li_4SiO_4 minilodīšu radiācijas stabilitāte ir novērtēta pēc to apstarošanas ar paātrinātajiem elektroniem ($E=5$ MeV) līdz pat 11 GGy absorbētai dozai paaugstinātā temperatūrā ($T=380-670$ K) argona un gaisa atmosfērā. Iegūtie rezultāti liecina, ka Li_4SiO_4 minilodīšu radiācijas stabilitāte ir atkarīga no vairākiem parametriem - no minilodīšu mikrostruktūras un graudu diametra, sagatavošanas apstākļiem un ķīmiskā sastāva.

HIGH-TEMPERATURE RADIOLYSIS OF LITHIUM ORTHOSILICATE PEBBLES UNDER ACTION OF ACCELERATED ELECTRONS

Arturs Zarins¹, Gunta Kizane¹, Arnis Supe¹, Larisa Baumanē², Regina Knitter³,
Matthias Kolb³, Oskars Valtenbergs¹

¹ *University of Latvia, Institute of Chemical Physics*

² *Latvian Institute of Organic Synthesis*

³ *Karlsruhe Institute of Technology*

Lithium orthosilicate (Li_4SiO_4) pebbles with 2.5% silicon dioxide (SiO_2) additions ($\varnothing=0.25-0.63$ mm), which are synthesised with *standard* melt-spraying method, are accepted as tritium breeding ceramic in European Union proposed Helium cooled pebble bed or HCPB module conception. Presently, the *standard* Li_4SiO_4 pebbles have few functional and technological problems: low mechanical stability, low efficiency of synthesis methods. From financial and ecological reasons it is vital to compare radiation stability of the tritium breeding ceramics, which are synthesised and pre-treated with differently methods, as well as establish and prevent reasons of decrease of radiation stability. The radiation stability of the differently synthesized and pre-treated Li_4SiO_4 pebbles was compared after irradiation with accelerated electrons ($E=5$ MeV) up to 11 GGy absorbed dose at elevated temperature ($T=380-670$ K) in dry argon and air. Obtained results suggested, that the radiation stability of the Li_4SiO_4 pebbles depends on microstructure and grain size of the pebbles, preparation conditions and chemical composition.

Research was financed by Republic of Latvia, Ministry of Education and Science (project EURATOM No. 11-11/ES12) and The Baltic-German University Liaison Office.

ŪDENRAŽA MATERIĀLI, ENERĢĒTIKA UN IEKĀRTAS

ŪDEŅRAŽA INFRASTRUKTŪRAS ATTĪSTĪBAS ASPEKTI – IEGŪŠANA, UZGLABĀŠANA, KVALITĀTES UN DROŠĪBAS KONTROLE

Jānis Kleperis¹, Pēteris Lesničenoks¹, Ilze Dimanta^{1,2}, Līga Grīnberga¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts;*

²*Latvijas Universitātes Bioloģijas fakultāte*

Ūdeņradis nākotnē būs neaizvietoājams energonesējs pasaules valstu enerģētikas bilancēs, jo spēj nodrošināt nulles emisijas transporta sektorā un zemas emisijas vai pat nulles emisijas (ja CO₂ tiek savākts un reformēts par metānu) enerģijas ražošanas sektorā. Turklāt ūdeņradis praktiski jebkurā vietā uz Zemes ir iegūstams no lokāliem resursiem, gan fosiliem, gan atjaunojamiem.

Mūsu darbā tiek analizēti ūdeņraža infrastruktūras aspekti – iegūšana, uzglabāšana un drošības kontrole – Latvijas piemērā, vadoties no savas un Eiropas valstu pieredzes un direktīvām. Atkarībā no pieejamā resursa un izmantošanas tehnoloģijas iespējams ūdeņradi iegūt uzreiz lietošanai pēc nepieciešamības, apejot iegūšanu un uzglabāšanu lielos apjomos, kas stipri atvieglo drošības kontroli. Tādā gadījumā ir apgrūtināta ūdeņraža kvalitātes kontrole, un iespējams, katrai tehnoloģijai un resursam tiks meklēts savs risinājums. Eiropas valstu pieredze ūdeņraža uzpildes staciju veidošanā transportam rāda, ka vispirms tiek izvērtēts pieprasījums konkrētajā vietā, pieejamie resursi ūdeņraža iegūšanai. Pēc tam atkarībā no transportlīdzekļiem (autobuss vai vieglās mašīnas) un plānoto uzpildžu skaita diennaktī tiek novērtēts maksimālais stacijā uz vietas glabājamā ūdeņraža apjoms.

Autori pateicas Valsts Pētījumu programmai enerģētikā LATENERGI 2014-2017 par finansiālu atbalstu.

HYDROGEN INFRASTRUCTURE DEVELOPMENT ASPECTS - PRODUCTION, STORAGE, QUALITY AND SAFETY CONTROL

Jānis Kleperis¹, Pēteris Lesničenoks¹, Ilze Dimanta^{1,2}, Līga Grīnberga¹

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

²*Faculty of Biology, University of Latvia*

In the world's national energy balance the hydrogen will be an indispensable energy-carrier in the future because of its ability to provide zero emissions in the transport sector and low-emission or even zero emissions (if CO₂ is collected and reformed to methane) in power generation sector. In addition, the hydrogen practically anywhere on Earth can be obtained from local resources, both fossil and renewable.

Our work analyzes the hydrogen infrastructure aspects - the production, storage, and quality and security control on the basis of their European and local experiences and directives. Depending on the available resources and applied technology, it is possible obtain hydrogen on site so as needed, bypassing the storage in large volumes, what highly facilitates security control. However in this case, is difficult to perform the quality control of hydrogen, and possibly, each technology and resource will be sought for its own solution. European experience in building hydrogen filling stations for vehicles show that demand is evaluated together with available resources, and maximum hydrogen to be stored calculated in dependence from amount of vehicles (busses, cars) and the planned filling times per day.

POLITIKA UN STANDARTI GĀZVEIDA DEGVIELU UZPILDES STACIJĀM UN ŪDEŅRAŽA VIETA TAJOS

Justs Dimants¹, Ilze Dimanta^{1, 2}, Biruta Sloka^{1, 3}, Jānis Kleperis¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts;*

²*Latvijas Universitātes Bioloģija fakultāte;*

³*Latvijas Universitātes Ekonomikas un vadības fakultāte*

Šobrīd 94% autotransporta ES izmanto naftas degvielu, no kuras 84% tiek importēti. ES direktīvas rekomendē dalībvalstīm līdz minimumam samazināt atkarību no naftas un mazināt transporta ietekmi uz vidi. Lai šīs abas prasības izpildītu, vienīgais ceļš ir pāreja uz nulles emisiju - elektrisko un ūdeņraža transportu. Ja elektriskās mašīnas ir komercializētas vairākkārt pēdējos simts gados (sākot no 1907.g.) un lielākais pārdošanas apjoms sasniegts tieši pēdējos gados (ASV 2008.-2014. gados vien pārdots 250 000 vienību), tad ūdeņraža mašīnu komercializācija uzsāka šogad (Toyota, Hyundai). Darbā apkopota informācija par likumdošanu un standartiem saistībā ar ūdeņraža transporta ieviešanu un uzpildes stacijām Eiropas Savienībā, un analizēta Latvijas politika un esošie noteikumi. Dažādi alternatīvo degvielu veidi (elektroenerģija, ūdeņradis, biodegvielas, biogāze) ilgtermiņā potenciāli varētu aizstāt naftas produktus. ES dokumenti uzsver, ka valstij jāizstrādā standarti un tiesību akti, nedodot priekšroku kāda konkrēta veida tehnoloģijai, lai neaizkavētu alternatīvo degvielu un energonesēju turpmāko attīstību.

Autori pateicas Valsts Pētījumu programmai enerģētikā LATENERGI 2014-2017 par finansiālu atbalstu.

POLICY AND STANDARDS OF GASEOUS FUEL FILLING STATIONS AND THE PLACE OF HYDROGEN THEREIN

Justs Dimants¹, Ilze Dimanta^{1,2}, Biruta Sloka^{1,3}, Jānis Kleperis¹

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

²*Faculty of Biology, University of Latvia;*

³*Faculty of Economics and Management, University of Latvia*

Currently, 94% of EU road transport is using oil, from which 84% is imported. EU Directive recommends Member States to minimize the dependence on oil and reduce the environmental impact of transport. In order to meet these two requirements, the only way is shift to zero emission vehicles - electric and electric/hydrogen. If the electrical cars are commercialized several times over the last hundred years (for the first time in 1907) and the largest volume of sales are achieved in the last few years (250 000 units are sold in the US from 2008 to 2014), then the hydrogen car commercialization is launched this year (Toyota, Hyundai).

Our work summarizes information on the legislation and standards in relation to the introduction of hydrogen vehicles and refueling stations in the European Union and in this context analyzes policy and regulations in Latvia. Various types of alternative fuels (electricity, hydrogen, biofuels and biogas) in the long term could potentially replace petroleum products. EU documents highlights to develop national standards and legislation, without giving preference to any particular type of technology, in order not to delay the future development of alternative fuels and energy carriers.

ENTEROBACTER AEROGENES SARAŽOTĀ ŪDEŅRAŽA UZGLABĀŠANAS IESPĒJAS DAŽĀDOS METĀLHIDRĪDOS

Ilze Dimanta^{1,2}, Sintija Valucka¹, Vizma Nikolajeva¹, Jūlija Hodakovska²,
Indriķis Muižnieks¹, Jānis Kleperis²

¹*Latvijas Universitātes Bioloģijas fakultāte*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Fakultatīvi anaerobās baktērijas *Enterobacter aerogenes* ir optimāli producenti rūpniecisko atkritumu (glicerīna un laktozes) fermentatīvai izmantošanai bio-ūdeņraža ieguves sistēmām. Tumsas fermentācijas procesā baktēriju radītais ūdeņradis daļēji pāriet gāzveida fāzē, bet daļa paliek saistīta pārsātinātā šķīdumā. Ūdeņraža sintēzi iespējams aktivēt, fermentācijas šķīdumu maisot un/vai nepārtraukti burbuļojot ar inerti gāzi. Hidrīdus veidojošu metālu klātbūtne fermentācijas šķīdumā aktivizē *E.aerogenes* ūdeņraža sintēzi, absorbējot daļu izšķīdušā ūdeņraža. Apkopojot rezultātus, tika izdarīti secinājumi par ūdeņraža uzkrāšanas iespējām dažādos materiālos (Pd, LaNi₅, AB₅, AB₂) un *E.aerogenes* ūdeņraža producēšanu fermentācijas barotnē ar metālhidrīdiem. Pētījums finansēts no Latvijas Zinātnes padomes Sadarbības projekta No. 666/2014. Pateicība ESF projektam „Atbalsts doktora studijām Latvijas Universitātē” par stipendiju I.Dimantai.

ENTEROBACTER AEROGENES PRODUCED HYDROGEN STORING POSSIBILITIES IN VARIOUS METAL HYDRIDE ALLOYS

Ilze Dimanta^{1,2}, Sintija Valucka¹, Vizma Nikolajeva¹, Jūlija Hodakovska²,
Indriķis Muižnieks¹, Jānis Kleperis²

¹*Latvijas Universitātes Bioloģijas fakultāte*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Hydrogen gas is produced during the fermentation process of bacteria in anaerobic conditions. Bacteria *Enterobacter aerogenes* are producing hydrogen in the liquid phase and when thermodynamic equilibrium is reached, hydrogen is diffusing from liquid to gaseous phase. Constant stirring do increase the overall hydrogen concentration and when it is turned off, the hydrogen concentration slowly decreases in overall fermentation process. It was proved that hydrogen over-saturation phenomena in liquid phase during dark fermentation process occur. The task is to remove hydrogen from liquid phase. We used powdered metals and alloys (Pd, LaNi₅, AB₅, AB₂) forming hydrides to test for their facility to remove hydrogen from liquid phase in dark fermentation process. Differential thermogravimetric method was used to measure amount of adsorbed hydrogen in alloy – before and after the contact with microorganisms. Results in the report will be discussed in detail.

The financial support Latvian Council of Science Cooperation Project No. 666/2014 and European Social Fund for the scholarship to Ilze Dimanta is greatly acknowledged.

MATERIĀLU ŪDEŅRAŽA UZGLABĀŠANAI PĒTNIECĪBAS METODES KAUNĀ UN RĪGĀ

Pēteris Lesničenoks¹, Līga Grīnberga², Jānis Kleperis²

¹*Rīgas Tehniskās Universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

XPS Fotoelektronu spektroskopija, Ožē spektroskopija, FTIR Furje caurlaidības infrasarkanā spektroskopija, (O/N/H) gāzu analīze- līdz 100s, SEM/EDS, PCT-Pro 2000 tilpuma izmaiņas gāzu sorbcijas mērījumi, Masspektroskopija (kvadrupola) un termogravimetrija - šīs ir galvenās metodes, kuras iespējams pielietot ūdeņraža sorbcijas pētījumiem un materiālu klasifikācijai. Pārskats par metodēm, kuras pieejamas LU CFI, Lietuvas Enerģētikas institūtā (LEI) un draudzīgs aicinājums atcerēties arī par saistošiem pētījumiem Kauņas Tehnoloģiskajā Universitātē (KTU) institūtos un iespējamu sadarbību.

Iegūti jauni rezultāti par ūdeņraža sorbciju materiālos, izmantojot O/N/H gāzu analizatoru, kas ļauj precīzāk spriest par iepriekšējos gados LU CFI veiktajiem termogravimetrijas mērījumiem un veikt korekcijas rezultātu interpretācijā, kā arī novērtēt materiālu struktūrā esošā ūdens daudzumu.

Pateicība LZZP Pētnieciskajam Sadarbības projektam Nr.666 (2014.-2017.) un ES COST MP 1106 akcijai.

MATERIALS FOR HYDROGEN STORAGE – METHODS AVAILABLE IN KAUNAS (LT) AND RIGA (LV)

Pēteris Lesnichenoks¹, Līga Grinberga², Janis Kleperis²

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

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

XPS, Auger Spectroscopy, FTIR, (O/H/N) Oxygen hydrogen nitrogen gas analysis - capable of detecting hydrogen in measurements up to 100 seconds, SEM/EDS, PCT - Pro 2000 volumetric sorption measurements, quadrupole mass spectroscopy and thermo-gravimetric are the main methods for detecting hydrogen and classifying materials intended for hydrogen sorption. Overview about methods available in ISSP of UL (Latvia), Lithuanian Institute of Energetic (Lithuania) and related topics of research in Kaunas University of Technology (Lithuania) and remainder of possible collaboration. What we obtained are new sorption results and better understanding about our earlier results with Thermogravimetric method, as well as more precise interpretation for molecular water in synthesized materials.

Authors acknowledge financial support from Project No 666 (2014-2017) of Latvian Council of Science as well as EU COST Action No 1106

TiO₂ NANOCAURULĪŠU AUGŠANAS ĪPATNĪBAS ANODĒŠANAS PROCESĀ

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

TiO₂ nanocaurulītes iespējams iegūt, izmantojot dažādas sintēzes metodes: hidrotermālo tvaiku nogulsnešanu, sol-gel sintēzi, kā arī elektroķīmisko anodēšanu. Orientētas TiO₂ nanostruktūras gūst lielu interesi dažādās zinātniskās aprindās, to maināmo īpašību un dažādā pielietojuma dēļ. Lietojot elektroķīmisku anodēšanu iespējams iegūt pašorientētas TiO₂ nanocaurulītes ar dažādu morfoloģiju un struktūru atkarībā no anodēšanas parametriem. Šīs metodes galvenās priekšrocības ir vienkārša audzēšanas parametru maiņa, nanocaurulīšu augstā organizācija, orientācija un kvalitāte.

Darba gaitā tika sintezētas TiO₂ pašorientētas nanostruktūras, izmantojot dažādus pievadītos anodēšanas spriegumus 15V, 20V, 25V un 30V. Sintēzē tika lietots NaF/H₃PO₄/H₂O elektrolīts ar dažādu fluorīda jonu koncentrāciju 0.14, 0.18 un 0.2 svāra %. Analizējot iegūto paraugu struktūru un morfoloģiju, tika pētīta sākotnējo anodēšanas parametru un fluorīda jonu koncentrācijas ietekme uz nanocaurulīšu augšanas procesu un tā īpatnībām.

Autori pateicas Valsts pētījumu programmas IMIS² 2. projektam par finansiālo atbalstu.

FEATURES OF ANODIZED TiO₂ NANOTUBE GROWTH PROCESS

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

There are several techniques to obtain TiO₂ nanotubes (NT) such as hydrothermal chemical vapour deposition, sol-gel synthesis, and electrochemical anodization. Electrochemical anodization is method with highly controllable parameters to grow ordered self-oriented nanotube arrays. In this work potentiostatic mode is used during the anodization process.

Investigations of applied anodization voltage and fluorine ion concentration influence on growth of titanium nanotubes are described in this work.

Structural analysis of gained NT were performed using X-ray diffraction and Raman spectroscopy methods. Morphological differences were observed and compared by SEM. Studies of acquired results indicates initial parameter influence on growth process.

The financial support of State research program IMIS² project No. 2 is greatly acknowledged.

INTERESANTI REZULTĀTI IMPEDANCES MĒRĪJUMU GAITĀ

Raul Land¹, Paul Annus¹, Mart Min¹, Alberts Kristiņš²

¹ Tallinas Tehnoloģiskās universitātes Tomasa Johana Zēbeka elektronikas nodaļa

² Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Ir labi zināms, ka rezistors, kondensators, induktivitāte, un pēdējā laikā arī memristors ir pasīvās ķēdes četri pamatelementi. Šis sadalījums ir balstīts uz attiecībām starp spriegumu, strāvu, lādiņu un magnētisko plūsmu. Reālajā pasaulē šie elementi parasti savienoti dažādos veidos. Lai vienkāršotu analīzi sarežģītās pasīvajās ķēdēs dažkārt lieto dažas vairāk eksotiskas komponentes, piemēram, Warburga impedanci vai pastāvīgas fāzes elementu (CPE).

Ķēžu pretestības uzvedība bieži atainojama kompleksajā plaknē (Arganda, Vesseļa vai Naikvista), tad pārsvarā kapacitatīvā rakstura ķēdei ir negatīvā imaginārā daļa, bet induktīvā rakstura ķēdei – pozitīva imaginārā daļa.

Jebkurā gadījumā, ja ķēde ir patiešām pasīva, tad impedances vērtības ir kompleksās plaknes labajā pusē ar pozitīvu reālo daļu un fāzes leņķi starp $+90^\circ$ un -90° grādiem.

Praktiskie mērījumi tika veikti uz vienkāršas stieples spoles (pilnās pretestības precizitātes mērītājs Wayne Kerr 6500P diapazonā no 20 Hz līdz 120 MHz). Teorija liecina, ka pie ļoti zemām frekvencēm dominē vada pretestība. Pie augstākām frekvencēm dominē induktīvā pretestība ar fāzes leņķi līdz 90° un kapacitatīvā pretestība (šajā gadījumā starpvijumu kapacitāte) ar fāzes leņķi līdz -90° . Pārejot rezonanses frekvenci, notiek fāzes lēcienveidīga izmaiņa par 180° .

Tomēr praksē dažos gadījumos bija iespējams iegūt rezultātu, kad fāzes lēcienis var sasniegt 360° . Lai izpētītu iespējamās mērījumu kļūdas, tika veikts atkārtots tests ar parasto signālu ģeneratoru un osciloskopu, kurš deva ļoti līdzīgus rezultātus. Šādus novērojumu netipiskus rezultātus citi pētnieki tika konstatējuši arī agrāk. Tomēr tādi rezultāti parasti tika vienkārši noraidīti kā kļūdaini, bez jebkādas tālākas analīzes vai pētījumiem.

INTERESTING RESULTS DURING IMPEDANCE MEASUREMENT

Raul Land¹, Paul Annus¹, Mart Min¹, Alberts Kristins²

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

² Institute of Solid State Physics, University of Latvia

It is well known that resistor, capacitor, inductor, and lately also the memristor are the four fundamental passive circuit elements. This division is based on relationships between voltage, current, charge, and magnetic flux. In real world these elements are typically spread and connected in many different ways. To simplify analysis of the more sophisticated passive circuits few more exotic components are sometimes introduced, such as Warburg impedance or constant phase element (CPE).

Behaviour of the impedance of circuits is often depicted on complex plane (Argand, Wessel or Nyquist plot), whereas predominantly capacitive circuits have negative imaginary part, and inductive circuits positive.

In any case, if the circuit is truly passive, then the impedance values are on the right side of the complex plane, having positive real part, and phase angle between $+90^\circ$ and -90° degrees.

Practical measurements were carried out on simple wirewound inductor (Wayne Kerr 6500P precision impedance meter; 20Hz to 120MHz). It is clear from the theory that at very low frequencies series resistance of the wire will dominate. At higher frequencies mostly inductive behavior is following with phase angle up to 90° and capacitive section caused by parasitic capacitance between the turns becomes visible with phase angle up to -90° . Then at the resonant frequency 180° phase jump to -90° happens.

In practice however it was possible to change the picture fundamentally, whereas phase jump could reach 360° in some cases. In order to investigate possible measurement error the same test was repeated with ordinary signal generator and oscilloscope with very similar results. After discussions and search it became evident that similar behaviour has been observed before and by different groups. Results were typically simply rejected as erroneous, without any further analysis or investigation.

IS BARJERU VADĪBAS MODULIS

Alberts Kristiņš

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Infrasarkano barjeru (IS) vadības modulis paredzēts darbam komplektā ar firmas *VISHAY* TSOP48xx tipa infrasarkanā signāla uztvērējiem un izmantojams attālinātas kontroles sistēmās.

Modulis izstrādāts uz CMOS mikroshēmas CD4093BCN, sastāvošas no četriem Šmita triggeriem. Uz viena izveidots nesošās frekvences ģenerators, uz otra impulsu pakešu veidošanas ģenerators, bet uz trešā un ceturtā izveidoti impulsu garuma selektori.

Pirmā triggera izejai pieslēgtas IS starojošās diodes. Uz selektoru ieejām tiek padoti signāli no IS uztvērēju izejām. Selektoru izejas vada staru šķērsošanas indikatorus un nodod informāciju attālinātas kontroles sistēmas kontrolierim.

Modulis tādā veidā var nodrošināt divu IS barjeru darbību.

Modulis paredzēts darbam ar IS uztvērējiem ar nesošo frekvenci diapazonā no 30 līdz 56 kHz, bet var tikt pielāgots arī citam frekvenču diapazonam.

IR BARRIERS CONTROL MODULE

Alberts Kristins

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Barriers infrared (IR) control module is designed to work with the TSOP48xx type infrared signal receivers of the company *VISHAY* and is applicable in remote control systems.

The module is designed on CMOS chips CD4093BCN composed of four Schmitt triggers. On first trigger is built carrier frequency generator, on the second trigger – pulse packet generator, on the third and fourth are made pulse lengths up selectors.

The output of the first trigger is connected to the IR emitting diodes. The selector inputs are fed by signals from the IR receiver outputs. The selector outputs manage beam crossing indicators and transmit information to a remote controller control systems.

In this way, the module can provide two-IS barrier function.

Module is designed to work with IR receiver with carrier frequencies ranging from 30 to 56 kHz, but can be adapted for another frequency range.

AUTOMĀTISKĀ STARTA-FINIŠA KONTROLES IEKĀRTA UN SACENSĪBU NORISES PROTOKOLS SAULES MAŠĪNU UN LAIVU SACENSĪBĀM

Alberts Kristiņš, Irina Gvardina, Jānis Melderis, Jānis Straumēns, Jānis Kleperis,
Pēteris Lesničenoks, Jānis Zemītis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Izstrādāta un izveidota automātiskā starta-finiša iekārta ar Saules enerģiju darbināmu mašīnu un laivu sacensībām paralēli 2 ceļos (ceļa garums līdz 8 m).

Sistēma sastāv no perifērijas vadības kontroliera, pie kura tiek pieslēgtas 2 starta un 2 finiša infrasarkanā staru barjeras, ārējā vadības pults un dators caur RS-232 portu.

Uzrakstītā speciālā datorprogramma

- apstrādā no kontroliera pienākošo informāciju
- fiksē komandu dalībnieku rezultātus
- pēc atlases sacensību rezultātiem sadala komandas astotdaļfinālam, ceturtdaļfinālam, pusfinālam un finālam.

Rezultātus iespējams attēlot uz displeja jebkurā sacensību posmā, kā arī izdrukāt sacensību protokola veidā. Starta/finiša laiks tiek reģistrēts ar precizitāti līdz 0,002 s.

Iekārta pārbaudīta pasākumā „Saules Kauss 2014”, kurš norisinājās Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūtā 2014. gada 17. maijā.

AUTOMATIC START-FINISH CONTROL UNIT AND THE VENUES PROTOCOL-SOFTWARE FOR RACE COMPETITIONS OF SOLAR CARS AND BOATS

Alberts Kristins, Irina Gvardina, Janis Melderis, Janis Straumēns, Janis Kleperis,
Peteris Lesnichenoks, Janis Zemitis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The automatic start-finish control equipment is developed and set up for the solar-powered car and boat races in two parallel paths (path length up to 8 m).

The system consists of peripheral management controller, which is connected to the two start and two finish infrared barriers, external control panel and through RS-232 port to computer. Special developed software provides:

- Processing of information received from controller,
- Recording racing results of team members
- Qualification of teams for eighth-final in accordance with the selection race results, and then for quarter-final, semi-final and final.

The results can be displayed on the display at any stage, as well as printed in the forms of racing protocols. Start and finish time is registered with an accuracy of 0.002 sec.

The equipment is tested in the competition "Solar Cup 2014", which took place in the Institute of Solid State Physics, University of Latvia on May17, 2014.

GAISA UN ŪDENS JONU ĢENERATORS IEKŠDEDZES DZINĒJU DARBĪBAS UZLABOŠANAI

Artis Volkovs¹, Mārtiņš Vanags², Jānis Kleperis²

¹ *Latvijas Universitātes Fizikas un matemātikas fakultāte;*

² *Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Gaisa un ūdens jonu ģenerators ir iekārta, kas izmantojot augstsprieguma koronizlādi, sašķeļ gaisa un ūdens molekulas jonus. Šī iekārta domāta iekšdedzes dzinēju darbības uzlabošanai un tiek ievietota gaisa ieplūdes kanālā, vai nu aizvietojot gaisa filtru vai pirms tā. Iekārtas mērķis ir bagātināt degvielas/gaisa maisījumu ar citādiem gāzveida savienojumiem, kas sadegšanas procesā ir efektīvāki par gaisu. Jonu ģeneratorā skābekļa molekulas tiek sašķeltas skābekļa jonus, kas savienojoties ar parastu skābekļa molekulu veido ozonu - augstākas enerģijas nestabilu savienojumu O_3 , ar kura palīdzību ir iespējams piegādāt daudz vairāk skābekli oksidēšanas reakcijām sadegšanas kamerā. Jonizējot atmosfēras gaisu veidojas N_2O molekulas, kas darbojas, kā papildus degviela. Arī no ūdens molekulas un koronizlādē sašķeltas molekulas veidojies H^+ jons, kas darbojas kā papildus degviela un uzlabo ogļūdeņražu sadegšanu. Praksē ir zināms, ka mitrā gaisā iekšdedzes dzinējs strādā labāk, turklāt degvielas ietaupīšanai tiek lietoti elektrolīzes gāzu ģeneratori vai jonu ģeneratori atsevišķi. Mūsu darbā visi trīs iekšdedzes dzinēja darbības uzlabošanas principi apvienoti vienā iekārtā, un pētīts, kādas gāzveida vielas rodas koronizlādē mitrinātā un ar elektrolīzes gāzi bagātinātā gaisā, kā arī šādas kombinētas iekārtas ietekme uz iekšdedzes dzinēja darbību dažādos braukšanas režīmos.

AIR AND WATER ION GENERATOR FOR INTERNAL COMBUSTION ENGINE PERFORMANCE IMPROVEMENT

Artis Volkovs¹, Mārtiņš Vanags², Jānis Kleperis²

¹ *Faculty of Physics and Mathematics, University of Latvia;*

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

Air and water ion generator is a device which uses high voltage corona discharge to split air and water molecules into ions. This device is intended to improve the operation of the internal combustion engine, and is inserted into the air intake channel, either by replacing the air filter, or before the air filter.

Device aims to enrich the fuel/air mixture with other gaseous compounds which are more efficient in the combustion process than just simple air. In the ion generator, oxygen molecules are split into oxygen ions, which connect to normal oxygen molecules forming ozone - " O_3 " an unstable compound with higher energy, by which it is possible to deliver more oxygen to the oxidation reactions taking place in the combustion chamber. By ionizing atmospheric air, " N_2O " molecules are formed which work as an additional fuel. Water molecules and the water molecules split by corona discharge form H^+ ions, which act as additional fuel too and improve combustion of hydrocarbons.

From practice, it is known that with moist air the internal combustion engines work better, and for the fuel savings, electrolysis gas generators or ion generators are used. In our work, all three performance principles of internal combustion engine are combined in one device. Research is done what kind of gaseous substances are formed by the corona discharge device using humidified and enriched with electrolysis gases intake air, as well as effect of such combined device on internal combustion engines performance in various driving modes.

MATERIĀLU STRUKTŪRA, TEORIJA UN MODELĒŠANA

DZELZS TRIFLUORĪDA Fe K-MALAS EXAFS SPEKTRA INTERPRETĀCIJA IZMANTOJOT MOLEKULĀRAS DINAMIKAS SIMULĀCIJAS

Kārlis Lazdiņš, Aleksejs Kuzmins
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Dzelza trifluorīdam (FeF_3) ir perovskita tipa struktūra, to veido FeF_6 oktaedri ar dzelzi centrā un fluoru virsotnēs, kas savstarpēji novietojušies tā, ka saite Fe-F-Fe veido 153° leņķi. Šāds novietojums ir tuvs kubiski simetriskai kristāliskai struktūrai, bet novirze no izstiepta leņķa samazina FeF_3 simetriju līdz romboedriskai $R\text{-}3c$.

Šajā darbā tiek izstrādāts un pielietots vienkāršs spēka lauka modelis klasiskās molekulāras dinamikas stimulācijām, ar mērķi aprakstīt FeF_3 statisko struktūru un dinamiskos procesus istabas temperatūrā. Aprēķinātais konfigurāciju vidējais EXAFS spektrs tika salīdzināts ar eksperimentālu dzelzs fluorīda K-malas EXAFS spektru [1], kas satur informāciju par kristāla struktūru un dinamiku. FeF_3 spēka lauka modeļa kvalitāti un apskatīti nesakritību cēloņi tiks diskutēti.

INTERPRETATION OF THE Fe K-EDGE EXAFS SPECTRUM FOR IRON TRIFLUORIDE USING MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS

Kārlis Lazdiņš, Alexei Kuzmin
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Iron trifluoride (FeF_3) has perovskite type crystal structure, built up of FeF_6 octahedra with iron atoms at the center and fluorine atoms at the vertices. The bonding angle Fe-F-Fe between two octahedra is about 153° . The deviation of fluorine atoms from linear chains reduces the symmetry of the crystal from cubic to rhombohedral $R\text{-}3c$.

In this study we have developed and applied simple force-field model for classical molecular dynamics simulations of FeF_3 . Our goal is to use such model for a description of FeF_3 crystal structure and lattice dynamics at room temperature. We have validated the obtained model using the experimental Fe K-edge EXAFS spectrum [1], which contain information on the structure and dynamic disorder. The obtained force-field model quality and related problems will be discussed.

[1] A. Kuzmin and Ph. Parent, J. Phys.: Condensed Matter 6 (1994) 4395-4404.

FeF₃ STRUKTŪRAS MODELĒŠANA UN ANALĪZE, IZMANTOJOT EVOLUCIONĀRO ALGORITMU

Inga Jonāne, Jānis Timošenko
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Dzelzs (III) fluorīds (FeF₃) ir perovskīta tipa savienojums, kura struktūru veido ar virsotnēm savienoti FeF₆ oktaedri. Atšķirībā no līdzīgām kubiskām rēnija trioksīda un skandija fluorīda struktūrām (*Pm3̄m* telpiskā grupa), FeF₃ gadījumā oktaedri ir pagriezti un tādēļ FeF₃ ir zemāka, romboedriskā simetrija (telpiskā grupa ir *R3̄c*). Lai izpētītu FeF₃ lokālo struktūru un kristāliskā režģa dinamiku, tika veikta dzelzs absorbcijas K malas sīkstruktūras (EXAFS - *Extended X-ray Absorption Fine Structure*) analīze. Istabas temperatūrai atbilstošo EXAFS datu interpretācijai tika izmantota nesen izstrādātā kombinētā apgrieztā Monte-Karlo/evolucionāro algoritmu metode (RMC/EA). RMC/EA metodē tiek konstruēts pētāmās struktūras 3D modelis un gadījuma rakstura procesā tiek mainītas atomu koordinātes ar mērķi minimizēt starpību starp eksperimentālo un dotajam modelim *ab-initio* aprēķinos iegūto EXAFS spektriem. Šādās simulācijās iegūtais FeF₃ struktūras modelis tika salīdzināts ar molekulārās dinamikas aprēķinos iegūto, kā arī tika noskaidroti atbilstošie struktūras parametri (starpatomu attālumi un atomu svārstību relatīvās amplitūdas).

MODELING AND ANALYSIS OF FeF₃ STRUCTURE USING EVOLUTIONARY ALGORITHM

Inga Jonane, Janis Timoshenko
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Iron (III) fluoride (FeF₃) is a perovskite-type compound: its structure is built up of FeF₆ octahedra connected through vertices. Unlike similar cubic rhenium trioxide and scandium fluoride structures (space group *Pm3̄m*), in FeF₃ case these octahedra are tilted and thus FeF₃ has a lower rhombohedral symmetry (space group *R3̄c*). In this study we have investigated the local structure and lattice dynamics of FeF₃ using EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure) spectroscopy at the iron K-edge. EXAFS data, acquired at room temperature, were analyzed employing recently developed combined reverse Monte Carlo/evolutionary algorithm approach (RMC/EA). In the RMC/EA method a 3D model of the investigated structure is constructed and then atomic coordinates are modified in a random process with the aim to minimize the difference between experimental and calculated EXAFS spectrum. The latter one is obtained in *ab-initio* calculations for current structure model. The final structure model of FeF₃ was used for comparison with the results of molecular dynamics and to estimate the values of structure parameters (interatomic distances and the mean square relative displacements of atoms).

ODS TĒRAUDA STRUKTŪRA ANALĪZE IZMANTOJOT TI K-MALAS RENTGENABSORBCIJAS SPEKTROSKOPIJU

Arturs Cintinš¹, Andris Anspoks¹, Juris Purāns¹, Tim Graening²

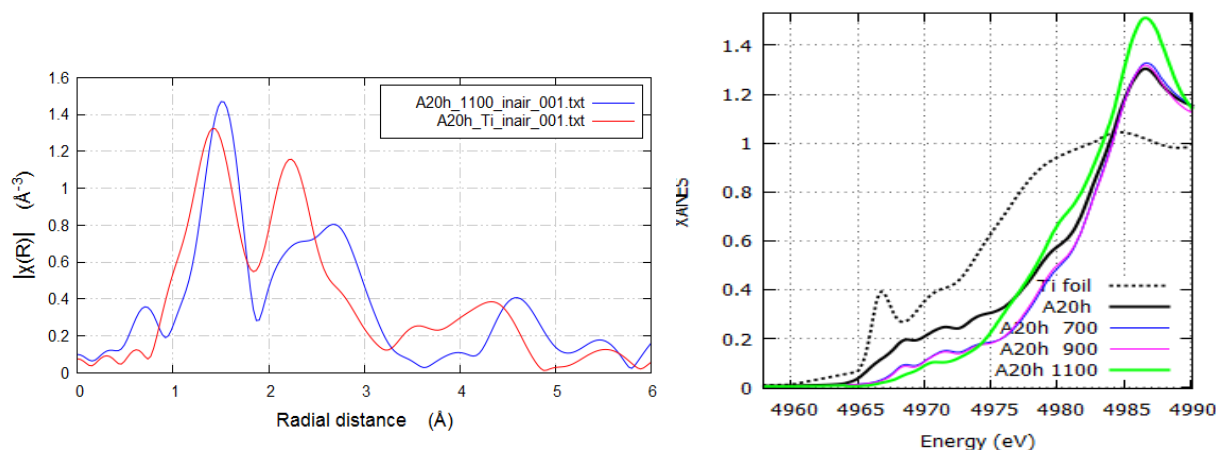
¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Karlsruhe Institut für Technologie, Institut für Materialforschung-I*

Oksīdu stiprināts tērauds (ODS) ir perspektīvs kodolsintēzes reaktoru materiāls. Šajā darbā ir izpētīta ODS tērauda izejmateriālu Ti K-mala, izmantojot rentgenabsorbciijas spektroskopiju. Darbā ir izmantota rentgenabsorbciijas spektru piemalas sīkstruktūras (XANES) un rentgenabsorbciijas spektra sīkstruktūras (EXAFS) analīze.

XANES datu analīze deva informāciju par Ti lokālo struktūru ODS matricā, un tās atkarību no apstrādes temperatūras. Izmantojot EXAFS datus, ieguvām lokālas struktūras parametrus un veicām pirmās koordinācijas sfēras radiālās sadalījuma funkcijas rekonstrukciju.

Darba rezultātā ir parādīts kā mainās Ti fāze ODS izejmateriālu matricā, atkarībā no apstrādes temperatūras.



ODS STEEL RAW STRUCTURE ANALYSIS USING TI K-EDGE X-RAY ABSORPTION SPECTROSCOPY.

Arturs Cintins¹, Andris Anspoks¹, Juris Purans¹, Tim Graening²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Karlsruhe Institut für Technologie, Institut für Materialforschung-I*

Oxide dispersion strengthened (ODS) steels are promising materials for fusion reactors. In this work we have studied Ti K-edge of ODS steel raw materials with X-ray absorption spectroscopy using analysis of X-ray absorption near edge structure (XANES) and extended X-ray absorption fine structure (EXAFS).

Analysis of XANES revealed information about dependency of local structure of Ti in ODS matrix on processing temperature. From EXAFS we reconstructed radial distribution function and obtained local structure parameters.

We have revealed how thermal treatment influences the phase of Ti in ODS raw materials

Na_{1/2}Bi_{1/2}TiO₃-SrTiO₃-PbTiO₃ CIETĀ ŠĶĪDUMA STRUKTŪRAS ATKARĪBA NO ELEKTRISKĀ LAUKA

Reinis Ignatāns, Ēriks Birks, Marija Duncce, Kārlis Kundziņš, Māris Kundziņš, Aina Plaude,
Maija Antonova, Māris Līviņš
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Cietajiem šķīdumiem ar sastāvu $0,4\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3-(0,6-x)\text{SrTiO}_3-x\text{PbTiO}_3$ ($0,4\text{NBT}-(0,6-x)\text{ST}-x\text{PT}$) ir konstatēts izteikts elektrokaloriskais efekts. Tas ir būtiskākais iemesls veikt rentgenstaru difrakcijas mērījumus, pieliekot ārēju elektrisko lauku paraugam. Istabas temperatūrā sastāviem ar 10% un 5% PT koncentrāciju novērojama tetragonālās un kubiskas fāzes koeksistence. Rentgenstaru difrakcijas ainas tika analizētas ar modificētu Ritvelda metodi. Pēc Ritvelda analīzes rezultātiem var secināt, ka paraugam ar 10% PT koncentrāciju ar elektrisko lauku var mainīt tetragonālās un kubiskās fāzu attiecību, piedevām režģa parametri abām fāzēm praktiski nemainās. Ritvelda analīze norāda arī uz lieliem iekšējiem spriegumiem tetragonālajai fāzei, bet kubiskai fāzei iekšējie spriegumi ir nenožīmīgi. Paraugam ar 5% PT koncentrāciju istabas temperatūrā bez uzlikta ārēja lauka ir lielāks kubiskās fāzes daudzums salīdzinot ar 10% PT sastāvu. Elektriskais lauks šāda sastāva paraugu ietekmē mazāk. Lai varētu veikt rentgenstaru difrakcijas mērījumus ar ārēju elektrisko lauku, ir izgatavota neliela papildus iekārta rentgenstaru difraktometram.

Na_{1/2}Bi_{1/2}TiO₃-SrTiO₃-PbTiO₃ SOLID SOLUTIONS STRUCTURE DEPENDENCE ON ELECTRIC FIELD

Reinis Ignatans, Ēriks Birks, Marija Duncce, Karlis Kundzins, Maris Kundzins, Aina Plaude,
Maija Antonova, Maris Livins
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Solid solutions with composition of $0,4\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3-(0,6-x)\text{SrTiO}_3-x\text{PbTiO}_3$ ($0,4\text{NBT}-(0,6-x)\text{ST}-x\text{PT}$) exhibit high electrocaloric effect. That is the main reason to study crystalline structure dependence of external electric field for particular material. At room temperature compositions with 10% and 5% PT concentration phase coexistence of tetragonal and cubic phase is detected. X-ray diffraction patterns were analyzed by modified Rietveld method. Results of Rietveld analysis show that phase ratio can be changed with external electric field, additionally cell parameters of both phases practically do not change. Rietveld analysis show high internal stresses in the tetragonal phase, but internal stresses in the cubic phase are negligible. Composition with 5% PT concentration at room temperature without external field has higher cubic phase weight compared to 10% PT composition. Electric field affects specimen with 5% PT concentration less compared with 10% PT composition. New additional apparatus was made for X-ray diffractometer so measurements with external electric field could be possible.

NEITRALO PUNKTVEIDA DEFEKTU UN FRENKEĻA PĀRU APRĒĶINI NO PIRMĀJIEM PRINCIPIEM KORUNDĀ

Aleksandrs Platonenko, Jurijs Žukovskis, Sergejs Piskunovs, Jevgenijs Kotomins
Latvijas Universitātes Cietvielu Fizikas Instituts

Korunds (α -Al₂O₃) ir svarīgs radiācijas izturīgs materiāls, kuru var veiksmīgi pielietot nākotnes kodolsintēzes reaktoros, kā diagnostikas komponentu sastāvdaļu un starojumu absorbējošo pārklājumu. Radiācijas izraisītas izmaiņas korunda strukturālās un optiskās īpašībās ir galvenokārt saistītas ar skābekļa vakancēm un Frenkeļa defektu pāriem (O_i+V_O).

Šajā darbā mēs veicam aprēķinus neitrāliem punktveida defektiem un Frenkeļa pāriem korundā, izmantojot 2×2×1 periodisku superšūnu, kas sastāv no 120 atomiem, un 3×3×1 superšūnu, kas sastāv no 270 atomiem. Aprēķini tika veikti izmantojot CRYSTAL14 programmu. Veidošanas enerģijas, lādiņa sadalījums un elektronu blīvuma diagrammas tika salīdzinātas abiem defektu saturošiem modeļiem, lai novertētu defektu mijiedarbību. Starpmezglu O_i atoms visos apskatītos gadījumos veido „hanteli” ar regulāro skābekļa atomu ($d_{O_i-O} = 1,404 \text{ \AA}$), kuras kopējais lādiņš ir -1,1 *e*. Veidošanas enerģijas neitrāliem punktveida defektiem, kas aprēķināti izmantojot 2×2×1 superšūnu ir: O_i – 4,21 eV un V_O – 7,60 eV. Veicot aprēķinus ar 3×3×1 korunda superšūnu, Frenkeļa pāris ar $d_{O_i-V_O} = 4,42 \text{ \AA}$ rekombinējas, kāmr 2×2×1 superšūnas gadījuma tā paliek metastabilā stavoklī.

AB INITIO SIMULATIONS ON NEUTRAL POINT DEFECTS AND FRENKEL PAIRS IN CORUNDUM

Aleksandrs Platonenko, Yuri F. Zhukovskii, Sergejs Piskunov, Eugene A. Kotomin
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Corundum (α -Al₂O₃) is important material with potential applications for components of diagnostics, breeder blanket and in future fusion reactors as coating to avoid the light gases permeation, as well as corrosion produced by lithium-based alloys. Radiation-induced changes in structural and optical properties of radiation-exposed α -Al₂O₃ crystalline materials are mainly associated with oxygen vacancies V_O and complementary Frenkel pairs of defects (O_i+V_O).

We have performed *ab initio* calculations using CRYSTAL14 code on neutral single point defects and Frenkel pairs of radiation defects in corundum, using periodic conventional supercell 2×2×1 containing 120 atoms, as well as 3×3×1 supercell containing 270 atoms. Formation energies, charge distribution, and electron density plots for both defect-containing supercells were compared to evaluate defect-defect interaction in periodic model. The interstitial O_i atom, both single and a component of O_i+V_O pair, spontaneously forms a dumbbell with the adjacent atom in the regular oxygen sublattice ($d_{O_i-O} = 1.404 \text{ \AA}$) characterized by the induced charge -1.1 *e*. Formation energies for neutral single point defects in 2×2×1 supercell are equal to 4.21 eV for O_i and 7.60 eV for V_O. In calculations performed for 3×3×1 corundum supercell, Frenkel pair with initially fixed distance $d_{O_i-V_O} = 4.42 \text{ \AA}$ has been found to be recombined after geometry optimization, while in 2×2×1 supercell, this pair stays in metastable state.

Y, O UN V_{Fe} DIFŪZIJU BARJERU AB INITIO APRĒĶINI FCC-FE REŽĢĪ

Aleksejs Gopejenko¹, Jurijs Žukovskis¹, Pavel V. Vladimirov², Jevgenijs Kotomins¹, Jurijs Mastrokovs¹, Vladimir A Borodin³, Anton Möslang²

¹Latvijas Universitātes Cietvielu Fizikas Institūts,

²Karlsruhe Institut für Technologie, Institut für Angewandte Materialien

³NRC "Kurchatov Institute"

Pašreizējās paaudzes ferīta-martensīta tēraudi ar samazināto aktivācijas spēju pastiprināti ar oksīdi nogulsņējumiem ļauj palielināt nākotnes kodolsintēzes reaktoru darba temperatūru uz apmērām 100°C (līdz 650°C un augstāk). Visbiežāk izmantotais tēraudu pastiprināšanai oksīds ir Y_2O_3 , jo tas ir viens no stabilākajām oksīdiem ar kušanas temperatūra augstāk nekā tēraudiem, kas varētu spēlēt nozīmīgu lomu, oksīda nanodaļiņu ODS tēraudos veidošanā.

Šajā pētījumā galvenais mērķis ir iegūt dziļu ieskatu ODS nanodaļiņu veidošanā ODS tēraudu struktūrās. Lai to veikt, tiek izmantota divpakāpju teorētiskā pieeja šī procesa atomārai modelēšanai. Pirmais solis ietver plašu ab initio aprēķini elementāro itrija un skābekļa kompleksu dzelža režģī ($4 \times 4 \times 4$ un $5 \times 5 \times 5$ FCC Fe superšūnas modeļiem), kas satur arī Fe-vakances (V_{Fe}) izmantojot VASP datora kodu. Mijiedarbības enerģija starp oksīda atomiem un dzelža matricas atomiem un to migrācijas barjeras enerģijas ir iegūti no šīm aprēķiniem turpmākai atomārai modelēšanai.

Saistības enerģijas starp piemaisījuma atomiem un vakancēm, kā arī to migrācijas barjera enerģija, ir svarīgi parametri ODS daļiņu veidošanas LKMC modelēšanā (otrais modelēšanas solis). Lai veikt migrācijas barjeru aprēķinus ir izmantots nudge elastic band (NEB) metode (kurā ir pielietotā VASP datora kodā). Vismazākais aprēķinātais Y atomu migrācijas enerģija barjera ir aptuveni 1.75eV. Acīmredzot ka paaugstināta vakančec koncentrācija ir nepieciešama Y migrācijai, kā arī palielināts superšūnas izmērs ir nepieciešams šim mērķim.

AB INITIO CALCULATIONS OF Y, O AND V_{Fe} DIFFUSION BARRIERS INSIDE FCC-FE LATTICE

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

Yuri Mastrokov¹, Vladimir A. Borodin³, Anton Möslang²

¹Latvijas Universitātes Cietvielu Fizikas Institūts

²Karlsruhe Institut für Technologie, Institut für Angewandte Materialien

³NRC "Kurchatov Institute"

Current generation of reduced activation ferritic-martensitic steels (RAFM) strengthened by oxides permits a growth of the operating temperature for future fusion and advanced fission reactors by 100°C (up to 650°C and higher). The most frequently used oxide for the strengthening of RAFM steels is Y_2O_3 , as it is one of the most stable oxides with melting temperature higher than that of the steels which might play significant role in the formation of oxide nanoparticles in ODS steels.

The main objective of this study is to get deep insight in the formation of the ODS particles inside RAFM steel structures. To perform it, a two-step theoretical approach for atomistic simulation of this process is proposed. The *first step* includes extensive *ab initio* calculations of elementary yttrium and oxygen complexes inside the iron lattice ($4 \times 4 \times 4$ and $5 \times 5 \times 5$ fcc-Fe supercell models) containing also Fe-vacancies (V_{Fe}) performed using VASP computer code. Both interaction energies between solute and matrix atoms and barriers for migration of different solute atoms are extracted from these calculations for further atomistic simulations. Binding energies between the impurity atoms and vacancies as well as their migration barrier energies are important parameters for the LKMC modeling of the ODS particle formation (the *second step* of our simulations). To perform calculations in order to estimate migration barriers, the nudge elastic band (NEB) method have been used (as implemented within the VASP computer code). The lowest calculated energy of the barrier for Y atom migration has been found to be about 1.75eV. Obviously, the increased concentration of V_{Fe} vacancies is required for interstitial Y migration and the increased size of the supercell is necessary for this aim.

TiO₂ NANOCAURUĻU ĢEOMETRIJAS UN SASTĀVA IETEKME UZ TO ELEKTRONISKO STRUKTŪRU: *AB INITIO* MODELĒŠANA

Andrejs Česnokovs, Oļegs Lisovskis, Dmitrijs Bočarovs, Sergejs Piskunovs, Jurijs Žukovskis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

TiO₂ ir perspektīvs materiāls ūdens fotokatalītiskai sadalīšanai. Diemžēl, tīrā TiO₂ efektivitāte ir zema un līdz ar to tas nav ekonomiski izdevīgs. Tā efektivitāti var palielināt, veidojot no tā nanocaurules – enerģētiski stabilas struktūras ar lielu virsmas laukumu. Vēl lielāku efektivitāti var panākt, mainot titāna dioksīda aizliegtās zonas platumu.

Darbā ir salīdzinātas dažādas morfoloģijas nanocauruļu īpašības. Deviņu slāņu (001) anatāza nanocaurule, mūsu agrāko pētījumu objekts, ir salīdzināta ar vairākām sešu slāņu (101) anatāza nanocaurulēm. Mēs salīdzinām to stabilitāti, veidošanās enerģijas, to dopēšanas iespējas un to zonu struktūras atkarību no piemaisījuma atomiem (gan no individuālajiem N un S atomiem, gan no pāri ieviestiem). Mēs arī pārbaudām piemaisījumu koncentrācijas ietekmi uz zonu struktūru un apspriežam piemaisījumu savstarpējo mijiedarbību.

Aprēķinu laika samazināšanai, mēs izpētām iespējas samazināt modeļa izmērus un dimensionalitāti, t.i. pāreju no periodiskā modeļa uz neperiodisko modeli. Tas mums ļaus veikt komplicētākus aprēķinus pieņemamā laikā.

CONNECTION BETWEEN ELECTRONIC STRUCTURE OF NANOTUBULAR TiO₂ AND ITS MORPHOLOGY: AN *AB INITIO* STUDY

Andrejs Chesnokov, Olegs Lisovski, Dmitrijs Bocharov, Sergejs Piskunov,
Yuri F. Zhukovskii
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

TiO₂ is a promising photocatalyst for water splitting. However, 3D bulk titania's efficiency is too low for this aim. It can be improved by transforming titania into stable 1D nanotubes (NTs) possessing large surface area. Further improvement of TiO₂ NT catalytical activity is possible through the band gap engineering.

In this study, we compare properties of nanotubes with different morphology. A 9-layer (001) anatase NT, an object of our earlier studies, is compared to various 6-layer (101) anatase NTs. Specifically, we compare their stability, formation energies, doping possibilities and dependence of band structure on types of dopant atoms (N and S as individual atoms or when introduced in pair). We also investigate how concentration of dopant atoms affects the band structure and discuss interactions between impurities.

In order to reduce computational time and to be able to run more complex calculations in reasonable time, we investigate strategies for reducing size and dimensionality of our model, *e.g.*, transition from a periodic model of a nanotube to its non-periodic cluster model.

ORGANISKIE MATERIĀLI UN FOTONIKA

ATSTAROŠANĀS REŽĢI MOLEKULĀRO AZOSTIKLU KĀRTIŅĀS

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

Mūsu iepriekšējie caurstarošanas hologrāfisko režģu ieraksta pētījumi molekulāro azostiklu kārtiņās ar biezumu 1-3 μm ir uzrādījuši strauju ieraksta efektivitātes samazināšanos pie maza režģa perioda $\Lambda=0.5\mu\text{m}$. Vai tas ir saistīts ar ieraksta mehānismu vai tikai ar gaismas Releja izkliedi? Kāda ir situācija pie vēl mazāka režģa perioda?

Meklējot atbilde uz šiem jautājumiem esam veikuši atstarošanas režģu (AR) ierakstu molekulāro azostiklu kārtiņās ZWK-2TBp, ZWK-3p, WE-3b un ZWK-3b ar 532nm un 633 nm lāzeriem (attiecīgi $\Lambda=0.182\ \mu\text{m}$ un $\Lambda=0.216\ \mu\text{m}$). Mērījumu rezultāti ir salīdzināti ar caurstarošanas režģu ($\Lambda=2\ \mu\text{m}$) attiecīgajiem raksturlielumiem. Visaugstākā difrakcijas efektivitāte $DE=0.91\%$ ir sasniegta kārtiņā ZWK-2TBp, ierakstot ar 532 nm un nolasot ar 633 nm gaismu. Kopumā AR ieraksta efektivitāte ir aptuveni 10 reižu mazāka nekā caurstarošanas režģu gadījumā ar $\Lambda=2\ \mu\text{m}$. Nav gūti pierādījumi tam, ka šo efektivitātes samazināšanos nosaka Releja izkliede.

Jāatzīmē negaidītā iespēja AR ierakstu un nolasīti veikt ar ļoti atšķirīgiem gaismas viļņu garumiem-532 un 633 nm. DE pie 633 nm ne tikai nav mazāka par DE pie 532 nm, bet ir pat lielāka. Aprēķins saskaņā ar Kogelnika teoriju (ņemot vērā arī absorbciju) rāda, ka DE pie 633 nm būtu jābūt 30 reižu mazākai nekā pie 532 nm. Referātā tiks aplūkoti iespējami cēloņi.

REFLECTION GRATINGS IN MOLECULAR AZOBENZENE GLASSY FILMS

Andris Ozols, Peteris Augustovs, Dmitry Saharov, Elmars Zarins, Valdis Kokars
Faculty of Material Science and Applied Chemistry, Riga Technical University

Our previous transmission holographic grating recording studies in molecular azobenzene glassy films with the thickness of 1-3 μm have revealed a steady decrease of recording efficiency at small grating period $\Lambda=0.5\mu\text{m}$. Is this decrease connected with the recording mechanism or only with the Rayleigh light scattering? What is the situation at still smaller gratings periods?

The answer these questions we have recorded reflection gratings (RG) in ZWK-2TBp, ZWK-3p, WE-3b and ZWK-3b molecular azobenzene glassy films by 532 and 633 nm laser beams (corresponding to $\Lambda=0.182\ \mu\text{m}$ and $\Lambda=0.216\ \mu\text{m}$, respectively). The results of measurements were compared with the transmission grating corresponding parameters at $\Lambda=2\ \mu\text{m}$. The highest diffraction efficiency $DE=0.91\%$ has been achieved in ZWK-2TBp film when RG was recorded at 532 nm and read out at 633 nm. Generally, RG recording efficiency was about 10 times lower than in the case of transmission gratings with $\Lambda=2\ \mu\text{m}$. No evidence of the dominant Rayleigh scattering effect was obtained.

Unexpected possibility was found to use light of considerably different wavelengths (532 and 633 nm) for recording and readout of RG. DE at 633 nm was not only smaller but even higher than at 532 nm. Calculations according to Kogelnik's theory including absorption have shown that DE at 633 nm should be 30 times smaller than at 532 nm. The possible explanations of this discrepancy will be discussed.

LIMITĒJOŠIE FAKTORI ENERĢĒTISKO LĪMEŅU NOTEIKŠANAI AR SKENĒJOŠĀS KELVINA ZONDES METODI

Raitis Gržibovskis, Aivars Vembris
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Materiālu pētniecībā bieži tiek izmantota skenējošā Kelvina zonde ar kuru iespējams noteikt pētāmā materiāla dažus enerģētiskos līmeņus. Kelvina zondes iekārta darbojas bezkontakta režīmā, tādā veidā šī metode ir materiālus nesagraujoša. Kaut arī Kelvina zonde tiek plaši pielietota gan dažādu metālu pētniecībā, nosakot to izejas darbu, gan pusvadītāju pētniecībā, mērot virsmas potenciālu, tomēr ir vairāki ierobežojošie faktori, kas ietekmē rezultātus un metodes pielietojamību.

Šajā darbā mēs esam pētījuši dažādu materiālu (metāls, organiski pusvadītāji, dielektrisks materiāls) plāno kārtiņu virsmas potenciāla vērtību atkarību no elektroda, kas atrodas zem pētītā materiāla. Iegūtās virsmas potenciāla un izejas darba vērtības tiek skaidrotas ar materiālu īpatnējo vadāmību. Referātā tiks īsumā apskatīts Kelvina zondes princips un prezentēti iegūtie rezultāti.

LIMITING FACTORS FOR ENERGY LEVEL DETERMINATION USING SCANNING KELVIN PROBE TECHNIQUE

Raitis Grzibovskis, Aivars Vembris
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

In material research Kelvin probe is often used to determine some of the energy levels of studied material. Kelvin probe operates in non-contact regime meaning that this method is non-destructive. Although Kelvin probe is widely used in metal research, by determining their work function, and in semiconductor research, by determining their surface potential, there are several limiting factors which can affect the results and usability of this method.

In this work we have studied surface potential value dependence on electrode which lies under the thin films of different materials (metal, organic semiconductors, insulator). Obtained surface potential and work function values are being explained by material conductivity. In the talk short Kelvin probe principle as well as obtained results will be presented.

ENERĢĒTISKIE LĪMEŅI DMABI HROMOFORU SATUROŠĀS MOLEKULĀS

Jūlija Pervenecka, Raitis Gržibovskis, Aivars Vembris
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Augstas efektivitātes ierīču izveidošanai no organiskām molekulām, piemēram, organiskās saules baterijas, ir svarīgi noteikt šo materiālu enerģētisko līmeņu struktūru. Enerģētiskie līmeņi sniedz informāciju par materiāla savietojamību un izmantošanas iespējām kopā ar citiem materiāliem.

Darba gaitā tika pētīts dimetilaminobenzilidēn-1,3-indandions (DMABI) un četri tā atvasinājumi. Plānās kārtiņas tika pagatavotas ar divām metodēm: rotējošā diska (spin coating) un termiskās iztvaicēšanas vakuumā metodi. Pagatavošanas metode tika izvēlēta atkarībā no vielas spējas veidot plānu amorfu kārtiņu no šķīduma.

Pētāmo vielu molekulu jonizācijas enerģija plānā kārtiņā uz ITO stikla tika noteikta ar fotoemisijas kvantu iznākuma spektroskopijas metodi. Molekulas jonizācijas enerģijas un elektronu afinitātes enerģijas starpība noteikta no fotovadāmības sliekšņa vērtības. No iegūtās molekulu jonizācijas enerģijas un fotovadāmības sliekšņa vērtības iespējams iegūt elektronu afinitātes līmeņa vērtību. Referātā tiks atspoguļotas sakarības starp pētīto molekulu struktūru un to enerģētiskiem līmeņiem.

ENERGETICAL LEVELS OF DMABI CHROMOPHORE CONSISTING MOLECULES

Jūlija Pervenecka, Raitis Gržibovskis, Aivars Vembris
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

To create high-efficiency device from organic molecules, for example, organic solar cells, the energetic levels structures of those molecules is very important to define. Energetic levels provide information of material compatibility with other materials.

In this work dimetilaminobenzylidene-1,3-indandione (DMABI) and four its derivatives were studied. Thin films were made by two methods: spin-coating and thermal evaporation in vacuum. Preparation method was chosen depending on compounds ability to form thin amorphous films from solution.

The molecule ionization energy in thin films of the studied compounds was obtained by photoemission quantum yield spectroscopy method. The energy gap between molecule ionization energy and electron affinity energy was determined from the photo conduction experiment.

An electron affinity level value was obtained from molecules ionization energy and photo-conductivity threshold value. Relation between the studied molecules structure and their energy levels will be discussed in the presentation.

FOTOINDUCĒTĀ ANIZOTROPIJA AZOBENZOLU SATUROŠĀ MOLEKULĀRAJĀ STIKLĀ

Krista Klismeta, Jānis Teteris
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Kā zināms, azo savienojumiem ir raksturīga optiski ierosināma izomerizācija ap azo saiti. Izomerizācijas procesa laikā molekulas var tikt orientētas attiecībā pret ierosinošās gaismas polarizāciju, rezultātā materiālā rodas anizotropija un var notikt makroskopiska mēroga masas pārnese uz parauga virsmas. Azohromoforus saturošos mazmolekulārajos stiklos orientēšanās process gaismas elektriskā lauka ietekmē tiek atvieglots, jo to ģeometriskā forma kavē kristalizācijas procesus.

Minēto masas pārnese parādību azo savienojumos var izmantot, lai hologrāfiski izveidotu difrakcijas režģus. Šajā darbā pētīta iespēja uzlabot hologrāfiskā ieraksta efektivitāti, paraugu papildus apstarojot ar cita viļņa garuma lāzeru, kā arī šī procesa atkarība no izmantotās gaismas polarizācijas. Darbā izmantotais savienojums ir azobenzolu saturošs molekulārais stikls ar nosaukumu K-RJ-8, sintezēts Rīgas Tehniskajā universitātē.

PHOTOINDUCED ANISOTROPY IN AZOBENZENE CONTAINING MOLECULAR GLASS

Krista Klismeta, Janis Teteris
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

As is known, under influence of light azo compounds experience photoisomerization. During this process the moieties may align relative to the electric field vector of light. This leads to anisotropy in the material and macroscopic movement of mass could occur on the surface of the film. The orientation process is easier in low molecular weight organic glasses containing the azo chromophore because the geometry of the moiety prevents crystallization.

Mass transport phenomenon can be used to holographically create diffraction gratings. In this work the possibility to improve efficiency of holographic recording by additionally irradiating the sample with another laser with different wavelength was experimentally studied. The dependence on polarization was studied. The compound used in this work was azobenzene containing low molecular weight organic glass K-RJ-8, synthesized in Riga Technical University.

ELEKTRISKĀS VADĀMĪBAS UN LĀDIŅNESĒJU LAMATU LĪMEŅU PĒTĪJUMI TETRACĒNA ATVASINĀJUMU PLĀNĀS KĀRTIŅĀS

Jānis Tjarve, Kaspars Pudžs, Aivars Vembris, Mārtiņš Rutkis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Termoelektrisko ierīču izveidei nepieciešami materiāli ar augstu elektrisko vadītspēju un zemu siltumvadītspēju. Modificējot molekulas, var mainīt organisko materiālu īpašības. Augstas elektriskās vadītspējas nodrošināšanai organiskajos materiālos ir nepieciešams izzināt lādiņnesēju transportu un enerģētiskos līmeņus.

Šajā darbā ir pētītas tetracēna un tā atvasinājumu plānas kārtiņas. Pētītie paraugi ir veidoti ar termiskās sublimēšanas metodi vakuumā. Elektriskā vadāmība ir noteikta ar četru kontaktu metodi. Elektriskās īpašības ir pētītas ar telpas lādiņa ierobežotās strāvas metodēm (TLIS). Paraugu morfoloģija ir pētīta ar skenējošo elektronu mikroskopu (SEM).

Darbā tiks apskatītas plāno kārtiņu elektriskās īpašības un lādiņnesēju ietekme uz tām.

STUDY OF ELECTRICAL CONDUCTIVITY AND CHARGE CARRIER TRAPPING STATES IN THIN FILMS OF TETRACENE DERIVATIVES

Janis Tjarve, Kaspars Pudzs, Aivars Vembris, Martins Rutkis
Institute of Solid State Physics University of Latvia

Production of thermoelectric devices requires materials with high electrical conductivity but low thermal conductivity. Characteristics of organic materials could be changed by modifying molecular structure. Knowledge of electrical properties and energetic levels is required to achieve high electrical conductivity in organic materials. Thin films of tetracene and three of its derivatives were prepared by thermal evaporation in vacuum. Electrical conductivity was measured by four probe method. Other electrical characteristics were investigated by space charge limited current (SCLC) methods. Morphology of thin films was determined using scanning electron microscope.

Electrical properties and local trapping states impact on them will be discussed in this work.

STENDA REFERĀTI

AR TERBIJU, PRAZEODĪMU, NEODĪMU UN DISPROZIJU AKTIVĒTU STIKLU UN STIKLA KERAMIKU PĒTĪJUMI

Edgars Elsts¹, Guna Kriekš^{1,2}, Uldis Rogulis¹, Krišanis Šmits¹, Aleksejs Zolotarjovs¹,
Jānis Jansons¹, Anatolijs Šarakovskis¹, Kārlis Kundziņš¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Rīgas Tehniskā universitāte*

Cietvielu fizikas institūtā tika sintezēti stikla paraugi ar nominālo sastāvu $16\text{Na}_2\text{O}-9\text{NaF}-5\text{LaF}_3-7\text{Al}_2\text{O}_3-63\text{SiO}_2$ (mol%), kas aktivēti ar 3 mol% TbF_3 , PrF_3 , NdF_3 un DyF_3 .

Stikla paraugus termiski apstrādājot pie 600°C , 700°C , 800°C temperatūras 30 minūtes, tie tika padarīti par stikla keramikām.

Stiklu un stikla keramikas paraugi tika pētīti, izmantojot rentgenstaru difrakcijas, rentgenstaru ierosinātas luminiscences spektroskopijas, katodluminiscences spektroskopijas un skenējošo elektronu mikroskopijas metodes.

Tika analizēta NaLaF_4 , kā arī citu kristālisko fāžu veidošanās paraugos un to ietekme uz luminiscences īpašībām – intensitāti un dzišanas laikiem.

Jauna scintilatoru materiālu tehnoloģija tiks izstrādāta ESF projekta „Tehnoloģiski svarīgu materiālu eksperimentāli un teorētiski pētījumi” ietvaros.

STUDIES OF TERBIUM, PRASEODYMIUM, NEODYMIUM, DYSPROSIUM ACTIVATED GLASS AND GLASS-CERAMICS

Edgars Elsts¹, Guna Kriekš^{1,2}, Uldis Rogulis¹, Krišanis Šmits¹, Aleksejs Zolotarjovs¹,
Janis Jansons¹, Anatolijs Šarakovskis¹, Karlis Kundzins¹

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

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

Glass samples with nominal composition $16\text{Na}_2\text{O}-9\text{NaF}-5\text{LaF}_3-7\text{Al}_2\text{O}_3-63\text{SiO}_2$ (mol%) doped with 3 mol% TbF_3 , PrF_3 , NdF_3 and DyF_3 were synthesized at the Institute of Solid State Physics.

These glass samples were converted to glass ceramics by thermal treatment: at 600°C , 700°C , 800°C temperature for 30 min.

Glass and glass-ceramics samples were studied by X-ray diffraction, X-ray excited luminescence spectroscopy, cathodoluminescence spectroscopy and scanning electron microscopy methods.

Formation of NaLaF_4 as well as formation of other crystalline phases in the samples and its influence on the luminescence properties – intensity and decay times have been analyzed.

New scintillator materials technology will be developed in framework of the ESF project “Experimental and theoretical investigation of technologically important materials”.

Acknowledgements

E. Elsts thanks the ESF (project No. 2013/0046/1DP/1.1.1.2.0/13/APIA/VIAA/021) for financial support.

AR Eu^{3+} UN RZ JONIEM AKTIVĒTU OKSIFLUORĪDU STIKLU UN STIKLA KERAMIKU LUMINISCENCES SPEKTRI

Jānis Sperga, Meldra Ķemere, Uldis Rogulis, Jurgis Grūbe, Guna Krieķe, Edgars Elsts
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Ar Eu joniem aktivēti oksifluorīdu stikli un stikla keramikas ir aplūkoti kā perspektīvi baltās gaismas luminofori¹. Dotā pētījuma ietvaros tiek pētīta divu (Eu un vēl viens RZ aktivators) aktivatoru ietekme uz luminiscences centru veidošanos pie dažādiem ierosmes viļņu garumiem, ar mērķi iegūt stikla vai stikla keramikas paraugu ar pēc iespējas augstāku CRI (color rendering index) indeksa vērtību.

Darba gaitā sintezēti caurspīdīgi oksifluorīdu stikli, kuri vienlaicīgi aktivēti ar Eu^{3+} un kādu no RZ elementu joniem Sm^{3+} , Ho^{3+} , Tb^{3+} , Dy^{3+} , Er^{3+} nelielās koncentrācijās (~1 mol%). Kontrolēti karsējot stiklus pie noteiktām kristalizācijas temperatūrām tiek iegūtas CaF_2 kristalītus saturošas stikla keramikas.

Paraugiem izmērīti luminiscences spektri, kas ļauj izdarīt secinājumus par Eu^{3+} un citu RZ jonu savstarpējo mijiedarbību paraugā, kas atspoguļo aktīvācijas centru luminiscences spektru intensitātes izmaiņas, kā arī ļauj aprēķināt CIE krāsu koordinātas un CRI indeksa vērtību.

Eu^{3+} joniem ir novērojama efektīva luminiscence spektra sarkanajā daļā, pārējiem izmantotajiem RZ aktivatoriem luminiscences maksimumi pamatā atrodas spektra zaļajā daļā un to luminiscences intensitāte sintezētajos paraugos pie dotajām koncentrācijām ir salīdzināma ar Eu^{3+} jonu luminiscenci.

LUMINESCENCE SPECTRA OF OXYFLUORIDE GLASSES AND GLASS CERAMICS ACTIVATED WITH Eu^{3+} AND RE IONS

Janis Sperga, Meldra Kemere, Uldis Rogulis, Jurgis Grube, Guna Krieke, Edgars Elsts
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Oxyfluoride glasses and glass ceramics doped with Eu ions are considered as prospective white light luminophores¹. In this research, we have investigated the influence of two ions (Eu and other RE ion) on the luminescence spectra of the samples using different excitation wavelength with a goal to find out a sample with the highest CRI (color rendering index) value.

Transparent oxyfluoride glasses co-doped with Eu^{3+} and one other RE ion: Sm^{3+} , Ho^{3+} , Tb^{3+} , Dy^{3+} , and Er^{3+} (concentration ~1 mol%) have been synthesized. By a controlled heating of the glass samples at certain crystallization temperatures we obtained glass ceramics which contain CaF_2 crystallites.

The luminescence spectra allow us to evaluate the interaction between the Eu^{3+} and other RE dopant in the examined samples as a change in the intensity of the activator luminescence. Using the data acquired by the luminescence spectra we calculated CIE color coordinates and CRI index values.

The results show that there is an effective luminescence provided by the Eu^{3+} in the red part of the spectrum while other dopants show a luminescence concentrated around the green part of the spectrum. The luminescence intensity of the Eu^{3+} is comparable to that of the other dopants.

¹ I. Brice, U. Rogulis, E. Elsts, J. Grūbe. *Latv. J. of Phys. Tech. Sci.*, 2012, Nr. (I). p.44

AR EU DOPĒTU FAP UN HAP KERAMIKU LUMINESCENCE

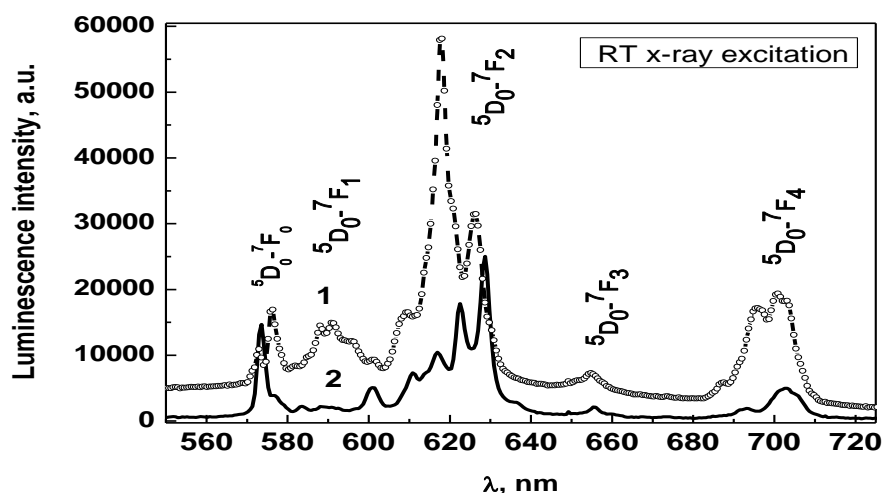
Larisa Grigorjeva, Donats Millers, Krišjānis Šmits, Aleksejs Zolotarjovs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Luminescences pētījumi hidroksilaptītos $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ (HAp) un fluorapatītos $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{F}_2$ (FAp) dopētos ar retzemju elementu joniem (RE) ir aktuāli sakarā biomarķēšanas metožu attīstību. Abi materiāli kristalizējas vienādā heksagonālā struktūrā (P63/m) vienīgi FAp struktūrā OH grupas ir aizvietotas ar fluora joniem. RE joni iebūvējas HAp un FAp struktūrā divās atšķirīgās Ca pozīcijas - Ca(I) un Ca(II). Eu^{3+} joni lietoti kā lokālas struktūras indikators sakarā ar to, ka Eu^{3+} jonu luminescence ir jutīga pret centra simetriju. Pētījumā Eu^{3+} jonu $^5\text{D}_0$ - $^7\text{F}_j$ pāreju luminescence ir salīdzināta dažādos nanopulveros un keramikās.

LUMINESCENCE OF EUROPIUM-DOPED FAp AND HAp CERAMICS

Larisa Grigorjeva, Donats Millers, Krisjanis Smits, Aleksejs Zolotarjovs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The luminescence study of hydroxyapatite $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ (HAp) and fluorapatite $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{F}_2$ (FAp) doped with RE ions is an advanced topic due to development of biolabelling methods. Both materials have the same hexagonal structure (P63/m) only in FAp structure OH group was replaced by fluorine ions. RE ions were incorporated in HAp and FAp structures in two types of Ca sites (Ca(I) and Ca(II)). Eu^{3+} ion was used as a local structure probe since the Eu^{3+} ion luminescence is sensitive to center symmetry. In present study the fine structure of $^5\text{D}_0$ - $^7\text{F}_j$ transitions of Eu^{3+} ion were compared on different HAp and FAp nanopowders and ceramics.



Eu doped FAp (1) and HAp (2) ceramic luminescence

SKĀBEKĻA APMAIŅA SISTĒMĀ METĀLU OKSĪDS-ATMOSFĒRA

Donats Millers, Krišjānis Šmits, Larisa Grigorjeva, Aleksejs Zolotarjovs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Dažus metālus oksidējot gaisā veidojas nestehiometriski to oksīdi, oksīdā ir pašvielas defekti, kuri saistīti ar skābekļa deficītu vai pārpalikumu. Minētie defekti iespaido metāla oksīda luminiscenci. Nestehiometriskam metāla oksīdam, kurā ir skābekļa iztrūkums, sadarbojoties ar gāzu maisījumu, kurš ir bagātināts ar skābekli, skābekļa deficīts oksīdā samazinās un izmainās materiāla luminiscence. Tādēļ dažu metālu oksīdi ir daudzsoļi skābekļa sensoru izveidei. Mūsu pētījumos lielākais datu vairums ir uzkrāts par ZrO_2 , gan neaktivētu, gan aktivētu ar retzemju joniem. Eksperimentu rezultāti, kuri iegūti ZnO pētījumos, rāda, ka arī šī materiāla luminiscence ir atkarīga no skābekļa satura to aptverošajā gāzu maisījumā. Sadarbība ar oksīdu aptverošām gāzēm notiek caur oksīda materiāla virsmu, tādēļ efektīvi ir materiālu veidi, kuriem attiecība starp virsmas laukumu un tilpumu ir liela. Parasti tādi materiāli ir nanokristāliski pulveri, taču to izmantošana sensoros saistīta ar tehniskām problēmām, tādēļ veikti pētījumi par metāla virsmai cieši piesaistītas porainas smalkgraudainas keramikas izveidi izmantojot metāla elektrolītisku oksidāciju plazmā.

OXIGEN EXCHANGE IN SYSTEM METAL OXIDE-ATMOSPHERE

Donats Millers, Krisjanis Smits, Larisa Grigorjeva, Aleksejs Zolotarjovs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The non – stoichiometric oxides were obtained for some metals if oxidation was prepared in air. The intrinsic defects were incorporated in these oxides because of oxygen deficiency or excess. These intrinsic defects strongly affect the luminescence of material. The oxygen deficient non – stoichiometric oxide interaction with oxygen rich surrounding gasses led to the oxygen deficiency reduction in oxide and luminescence of material changes. Therefore oxides of some metals were prospective for oxygen sensor development. The most of results obtained in our experiments are accumulated on pure as well as rare earth ion doped ZrO_2 . The results obtained during ZnO recent study gave evidence that the luminescence of this material depends on oxygen content in surrounding gasses also. The interaction between oxide and surrounding gasses take place via material surface, thus efficient is material having large surface to volume relation. These materials usually are nanocrystalline powders, however its application meet technical problems, therefore we carried out an attempt via plasma electrolytic oxidation process to produce the porous fine grain ceramics strongly bonded to the metal surface.

The financial support of project 2DP/2.1.1.1.0/14/APIA/VIAA/007 is greatly acknowledged.

PLZT KERAMIKAS INDUCĒTĀS ABSORBCIJAS ATKARĪBA NO TEMPERATŪRAS

Mārtiņš Vanks, Donāts Millers, Larisa Grigorjeva Krišjānis Šmits, Vilnis Dimza
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

PLZT keramiku apstarojot ar rentgenstariem vai elektronu kūļa impulsiem pie dažādām temperatūrām tajā novērota inducētā absorbcija. Inducētās absorbcijas spektri ir līdzīgi abiem apstarošanas veidiem, kas liecina, ka abos gadījumos inducēto absorbciju nosaka vieni un tie paši absorbcijas centri. Iespējamā šo absorbcijas centru izcelsme ir PLZT keramikā esošo defektu pārlādēšanās apstarošanas laikā vai arī pašvielas polaronu veidošanās. Inducētās absorbcijas sabrukšana dažādos spektra apgabalos notiek atšķirīgi un tas liecina, ka novērotajā spektrā pārklājās vairākas joslas. Inducētās absorbcijas sabrukšanas kinētikas nevar aproksimēt ar vienu eksponenti, tās labi aprakstāmas ar Kolrausa likumu (stieptā eksponente), kaut gan ir iespējama aproksimācija arī ar divu eksponentu summu. Inducētās absorbcijas atkarība no temperatūras rāda, ka zemās temperatūrās iespējami stabili, nesabrūkoši inducētās absorbcijas centri, paaugstinot temperatūru inducētās absorbcijas centri sabrūk, tomēr īsi dzīvojoša inducētā absorbcija novērojama pat virs 500 K.

THE INDUCED ABSORPTION DEPENDENCE ON TEMPERATURE IN PLZT CERAMICS

Martins Vanks, Donats Millers, Larisa Grigorjeva Krisjanis smits, Vilnis Dimza
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The induced absorption under X-ray as well as pulsed electron beam irradiation at different temperatures was observed in PLZT ceramics. The induced absorption spectra are similar for both kinds of irradiation and it is the strong evidence that the same centers are responsible for absorption observed. These centers possibly were created by recharging of preirradiation defects in PLZT ceramics as well as creation of intrinsic and bound polarons could be involved. The decay of induced absorption differs over all spectrum thus showing that several bands overlaps. The induced absorption decay kinetics can not be approximated by a single exponent, the approximation by Kohlfausch law (stretched exponent) gives a good result, however the approximation with two exponents sum is possible also. The dependence of induced absorption on temperature shows the stable absorption centres at low temperatures are. Enhancement of temperature led to the decay of absorption centres, however short-lived absorption was observed even above 500.K.

LIOFILIZĒTA GRAFĒNA OKSĪDA - BENZOLA SUSPENSĪJA CAURSPĪDĪGU ELEKTRODU IZGATAVOŠANAI

Agnese Dravniece¹, Lilita Gerca¹, Mārtiņš Rutkis¹, Kārlis Kundziņš¹, Valdis Kampars²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Rīgas Tehniskā Universitāte*

Vienslāņa grafēns ir inovatīvs gaismas caurlaidīgs materiāls, kam piemīt augsta elektrības un siltumvadītspēja, līdz ar to, tradicionālos elektrodus aizstājot ar grafēna monoslāni, tiktu paaugstināta optoelektrisko ierīču efektivitāte. Pētījumā grafēna oksīda (GO) iegūšanai izmantota modificēta Hammera (*Hummer*) metode, kam seko parauga liofilizācija, lai atbrīvotos no ūdens. Pretēji plaši izmantotajām GO suspensijām ūdenī, pētīta GO suspensija benzolā. Lai samazinātu GO lokšņu skaitu plānajā kārtiņā, veikta eksfoliēšana, paraugu sonējot, kā rezultātā iegūtie GO izmēri ir robežās no dažiem nm līdz desmitiem μm. Novērota substrāta virsmas apstrādes ietekme. Iegūtās GO suspensijas un plānās kārtiņas raksturotas ar skenējošo elektronu mikroskopiju.

Šis pētījums veikts ar Valsts pētījumu programmas „Daudzfunkcionālie materiāli un kompozīti, fotonika un nanotehnoloģijas (IMIS²)” atbalstu.

LYOPHILIZED GRAPHENE OXIDE - BENZENE SUSPENSION FOR USE IN TRANSPARENT ELECTRODES

Agnese Dravniece¹, Lilita Gerca¹, Martins Rutkis¹, Karlis Kundzins¹, Valdis Kampars²

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

²*Riga Technical University*

Single sheet graphene is an innovative transparent material with high electrical and thermal conduction therefore if used in transparent electrodes it would improve the performance of optoelectronic devices. In this study graphene oxide (GO) has been obtained by a modified Hummer's method followed by a relevant step of water removal (lyophilisation). GO suspension in benzene is studied contrarily to widely used GO – water suspensions. Exfoliation is carried out to reduce the number of GO layers in suspension resulting in the GO sheet size range from few nm to tens of μm. The effect of variously treated glass substrate surfaces is observed. Obtained GO suspensions and thin films have been studied using a scanning electron microscope.

This work has been supported by National Research Program “Multifunctional Materials and Composites, Photonics and nanotechnology (IMIS²)”

JONU ENERĢIJAS IETEKME UZ STRUKTŪRAS IZMAIŅĀM AR Xe JONIEM APSTAROTĀ LiF

Rolands Grants¹, Roberts Zabels¹, Muratbeks Baižumanovs²,

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Eirāzijas Nacionālā Universitāte, Astana, Kazahstāna*

Pētītas struktūras un mikromehānisko īpašību izmaiņas ar 450 MeV, 224 MeV un 52 MeV Xe joniem apstarotos LiF kristālos, izmantojot optiskās un ASM mikroskopijas, ķīmiskās kodināšanas un nanoindentēšanas metodes. No SRIM aprēķinātajām enerģijas zudumu līknēm var secināt, ka Xe jonu gadījumā daļā no to trajektorijas tiek pārsniegts enerģijas zudumu kritiskais sliekšnis $dE/dx > 10$ keV/nm, kas nepieciešams kompleksu, serdi saturošu treku veidošanai. Šajā apgabalā veidojas ķīmiski kodināmi treki. Treku trajektorijā ķīmiskā kodināšana uzrāda dislokāciju rindas. Taču atšķirībā no smagākajiem (U, Bi, Au) joniem Xe jonu veidotajās dislokāciju rindās novērojams liels sīko cilpu skaits. To var saistīt ar atšķirībām treku diametrā un treku pārklāšanās efektā. Atšķirības dislokāciju struktūrā apliecina arī nanoindentēšanas dati, kuri uzrāda jonu izraisītā cietināšanās efekta samazinājumu. Apstarojot ar 224 MeV un 52 MeV enerģiju joniem, pie augstām fluencēm (10^{13} - 10^{14} Kr/cm²) novērots ievērojams sadursmju (nukleāro zudumu) mehānisma ieguldījums.

EFFECT OF ION ENERGY ON STRUCTURE OF LiF CRYSTALS IRRADIATED WITH SWIFT Xe IONS

Rolands Grants¹, Roberts Zabels¹, Muratbek Baizhumanov²

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

²*L.N. Gumilov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan*

Structure and changes of micromechanical properties in LiF crystals irradiated with 450 MeV, 224 MeV and 52 MeV Xe ions have been investigated by optical and AFM microscopy and methods of chemical etching and nanoindentation. From SRIM calculated curves of energy losses it can be seen that in the case of Xe ions in a part of their trajectory energy losses surpass the threshold of $dE/dx > 10$ keV/nm for the formation of complex tracks containing a core damage. Thus chemically etchable tracks are formed within this region. The chemical etching of tracks reveals rows of dislocations within a trajectory of tracks. Nevertheless, unlike other heavier ions (U, Bi, Au) dislocation rows formed by Xe ions contain large number of tiny dislocation loops. It can be linked to differences in diameters of tracks and degree of track overlapping. Differences in the dislocation structure are confirmed also by nanoindentation which shows a decrease in ion caused hardening effect.

By irradiating with 224 MeV and 52 MeV energy ions a substantial contribution of collision (nuclear losses) mechanism has been observed.

DABĪGO RADIONUKLĪDU KONCENTRĀCIJAS SALĪDZINĀJUMS BALTIJAS REĢIONA VALSTU KERAMIKAS MATERIĀLOS

Daina Riekstiņa^{1,2}, Jānis Bērziņš¹, Tamāra Krasta¹, Ruta Švinka³, Oksana Skrypnik²

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Latvijas Universitātes Ķīmiskās fizikas institūts*

³*Rīgas Tehniskās universitātes Silikātu materiālu institūts*

Darbā, izmantojot gamma spektrometrijas metodi, noteikti dabīgo radionuklīdu aktivitātes koncentrāciju līmeņi un aktivitātes indeksi dažādiem celtniecības materiāliem. Sevišķa uzmanība pievērsta māliem un mālu keramikai kā vietējiem produktiem. Iegūtie rezultāti salīdzināti ar analoģu materiālu datiem citās Ziemeļeiropas un Baltijas valstīs, kā arī noteikta atbilstība ES radiācijas drošības prasībām. Iegūtie rezultāti rāda, ka aktivitātes indeksa vērtības visiem pētītajiem celtniecības materiāliem, izņemot granītu un ugunsdrošos ķieģeļus, ir zemāki par Radiācijas drošības noteikumos atļauto līmeni. Konstatēts, ka dabīgo radionuklīdu koncentrācija Devona perioda māla depoziātos var būt vairāk kā divas reizes augstāka nekā Kvartāra perioda depoziātos, bet dažādos māla keramikas produktos koncentrācija var atšķirties pat līdz piecām reizēm. Tomēr dabīgo radionuklīdu koncentrācijas un aktivitātes indeksa vidējās vērtības māliem un māla ķieģeļiem Latvijā ir tuvas lielumiem iegūtiem citās Ziemeļeiropas valstīs, izņemot Zviedriju.

COMPARISON OF NATURAL RADIONUCLIDE CONTENTS IN CERAMIC MATERIALS OF BALTIC REGION COUNTRIES

Daina Riekstiņa^{1,2}, Jānis Bērziņš¹, Tamāra Krasta¹, Ruta Švinka³, Oksana Skrypnik²

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

²*Institute of Chemical Physics, University of Latvia*

³*Institute of Silicate Materials Science of the Riga Technical University*

Part of building materials is a significant source of indoor gamma-ray exposure for the population due to activity of natural radionuclides K-40 and Th-232, U-238 decay chain products. This work presents results of the study of natural radionuclide level and activity index in building materials used in Latvia. Especial attention is given to clay and clay ceramics. Concentrations of natural radionuclides were determined by gamma-spectrometry method. Conformity with national and EU regulations was established. Results were compared with analogous data from other North European and Baltic countries. Obtained data show that activity index values for all tested building materials, except granite and fireproof bricks, are below permissible radionuclide concentration level. It was found that radionuclide concentration in Devonian period clay deposits can be more than two times higher than in Quaternary ones, but radionuclide content in different clay products can differ up to five times. However, average concentrations of natural radionuclides and activity index values for clay and clay bricks used in Latvia are on the same level as in other North European countries, except Sweden.

SALASPILS KODOLREAKTORA DZESĒŠANAS ŪDENS RADIOAKTIVITĀTES IZMAIŅAS (2001.- 2014.)

Daina Riekstina^{1,2}, Jānis Bērziņš¹, Jānis Alksnis², Jānis Rudzītis², Oļģerts Vēveris¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Latvijas Universitātes Ķīmiskās fizikas institūts*

Darbā demonstrēti radionuklīdu koncentrācijas ilgtermiņa (kopš 1999.g.) mērījumu rezultāti Salaspils kodolreaktora (SKR) tvertņu ūdenī. Laika gaitā pirmā kontūra ūdenī veidojās aktivācijas produkti no mikro-piemaisījumiem un radioaktīvie korozijas produkti no metāla apvalka, kā arī difundēja kodoldalīšanās produkti caur degvielas kasešu mikroplaisām. Izmantojot augstās izšķirtspējas gamma-spektrometrijas metodi, tika mērīta radionuklīdu Co-60 un Cs-137 koncentrācija tvertnes ūdenī. Pirmā radionuklīda klātbūtne ir saistīta ar neutronu aktivāciju, otrais ir kodolu dalīšanās produkts. Kodolreaktora aktīvajā zonā neutronu atstarošanai tika izmantotas berilija (Be) kasetes, kurās veidojās tritījs, kas gala rezultātā arī nonāca reaktora tvertnes ūdenī. Tā kā H-3 ir garš pussabrukšanas periods – 12 gadi, tad ilgās SKR darbošanās laikā izveidojās samērā augsta īpatnējā tritīja aktivitāte. Tritīja koncentrācijas mērīšanu ūdeņos veica izmantojot Packard TRI-CARB2100 un Hidex 300SL beta spektrometrus un šķidro scintilatoru OptiPhase HiSafe 3™.

Mērījumi tika turpināti arī pēc degvielas kasešu izņemšanas no reaktora tvertnes un pārvietošanas glabāšanas tvertnē. Tika konstatēts, ka Co-60 koncentrācija ūdenī būtiski samazinājās, jo glabāšanas tvertnes sienas nesatur aktivācijas produktus.

CHANGES OF SALASPILS NUCLEAR REACTOR COOLING WATER RADIOACTIVITY (2001- 2014)

Daina Riekstina^{1,2}, Jānis Bērziņš¹, Jānis Alksnis², Jānis Rudzītis², Oļģerts Vēveris¹

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

²*Institute of Chemical Physics, University of Latvia*

Results of the long-term (since 1999) monitoring of radionuclide content in water of the decommissioned Salaspils nuclear reactor (SNR) basins are presented. Within time lapse, nuclear reactor's first circuit water contains the products of neutron activation of micro impurities, the radioactive substances of metal coating corrosion and also the nuclear fuel fission products. The last ones diffuse in the water through micro splits of the fuel ambient shell. The high-resolution gamma-spectrometry method was used to measure concentrations of radionuclides Co-60 and Cs-137 in the water. The first radionuclide characterizes neutron activation products, the second – fission products. The use of beryllium (Be) cassette for neutron reflection in the reactor core resulted in the production of tritium which has leaked into basin water. Measurements of H-3 activity in water were carried out with the liquid scintillation spectrometer Packard TRI-CARB 2100 and Hidex 300SL using the scintillation liquid OptiPhase HiSafe 3™. Monitoring has been continued also after the transfer of fuel ambient shells to the storage-well. It was found that the content of Co-60 in water has significantly decreased since walls of the storage-well do not contain activation products.

LITIJA JONU VADĪTĀJI SISTĒMĀ $\text{Li}_4\text{Ti}_{1-x}\text{P}_2\text{O}_7$ ($x=0; 0,06; 0,2$)

Antonija Dindune¹, Janis Ronis¹, Dagnija Valdniece¹, Vilma Venckutė², Antanas Orliukas²

¹ Rīgas Tehniskās universitātes Neorganiskās ķīmijas institūts

² Viļņas Universitātes Fizikas Fakultāte

Pirofosfāti, kuri sintezēti cietfāžu reakcijās sistēmā $\text{Li}_{4x}\text{Ti}_{1-x}\text{P}_2\text{O}_7$ ($x = 0, 0.06, 0.2$), varētu tikt izmantoti kā perspektīvi elektrodu materiāli daudzkārtēji uzlādējamās baterijās. Paraugu rentgendifrakcijas datu analīze (XRD) parādīja, ka paraugiem ir kubiska $3 \times 3 \times 3$ superstruktūra (telp.gr. $\text{Pa } \bar{3}$) ar 108 formulas vienībām šūnā. Rentgenstaru fotoelektronu spektroskopijas (XPS) un impedances pētījumiem TiP_2O_7 , $\text{Li}_{0.24}\text{Ti}_{0.94}\text{P}_2\text{O}_7$ un $\text{Li}_{0.8}\text{Ti}_{0.8}\text{P}_2\text{O}_7$ keramikas tabletes karsēja atbilstoši pie 1460 K (3h), 1370 K un 1170 K (1 un 5 h). SEM/EDX un XPS pētījumos analizēti Ti 2p, P 2p and O 1s kodolu līmeņi. Kompleksā elektrovadītspēja mērīta gaisā no 400 K līdz 720 K un frekvenču intervālā no 10 Hz līdz 3 GHz. Zemfrekvenču intervālā līdz 2 MHz mērījumus veica, izmantojot 2-paraugu un 4-paraugu metodes ar impedances spektrometru. Mikroviļņu apgabalā izmantoja iekārtu ar koaksiālo līniju. Vadītspējas spektros konstatēti divi relaksācijas dispersijas apgabali, kuri saistīti ar jonu pārnesei keramikas paraugu kristālos un uz to robežvirsmas. Daļēja Ti aizvietošana ar Li iegūtajos $\text{Li}_{4x}\text{Ti}_{1-x}\text{P}_2\text{O}_7$ paraugos palielina kopējo elektrovadītspēju, salīdzinot ar tīru TiP_2O_7 . Novērota aktivācijas enerģiju anomālija kopējās elektrovadītspējas mērījumos starp 520 to 580 K, kura varētu būt saistīta ar jonu nesakārtotību šūnās.

LITHIUM ION CONDUCTORS IN THE SYSTEM $\text{Li}_4\text{Ti}_{1-x}\text{P}_2\text{O}_7$ ($x=0; 0,06; 0,2$)

Antonija Dindune¹, Janis Ronis¹, Dagnija Valdniece¹, Vilma Venckutė², Antanas Orliukas²

¹Institute of Inorganic Chemistry, Riga Technical University

²Faculty of Physics, Vilnius University

The powder of $\text{Li}_{4x}\text{Ti}_{1-x}\text{P}_2\text{O}_7$ ($x = 0.06, 0.1, 0.2$) pyrophosphates - potentially suitable electrode materials for lithium secondary batteries - have been synthesized by solid state reaction. The analysis of the XRD patterns showed that these pyrophosphates have cubic $3 \times 3 \times 3$ superstructure (S.G. $\text{Pa } \bar{3}$) with 108 formula units in the supercell. For XPS and impedance investigations the pellets of TiP_2O_7 , $\text{Li}_{0.24}\text{Ti}_{0.94}\text{P}_2\text{O}_7$ and $\text{Li}_{0.8}\text{Ti}_{0.8}\text{P}_2\text{O}_7$ were sintered at 1460 K (3h), 1370 K and 1170 K (1 and 5 h) respectively. SEM/EDX and XPS investigations were carried out at room temperature and the core level Ti 2p, P 2p and O 1s were analyzed. The complex electrical conductivity were carried out in air from 400 K to 720 K and in the frequency range from 10 Hz to 3 GHz. For the measurements with 2-probe and 4-probe methods in frequency range up to 2 MHz impedance spectrometer was used. A setup with a coaxial line was used for the investigations in the microwave region. Two relaxation dispersion regions in conductivity spectra were found caused by ion transport in grain boundary and grain of the ceramics. The partial substitution of Ti by lithium in $\text{Li}_{4x}\text{Ti}_{1-x}\text{P}_2\text{O}_7$ compounds leads the increment of the values of total conductivity comparing with host TiP_2O_7 . The anomalies of activation energies of total conductivities in range from 520 to 580 K were found and it can be related to disordering in the supercells.

This work was supported by Research Cooperation project of Latvian Council of Science N666/2014.

LiFePO₄ LITIJA JONU BATERIJU KATODMATERIĀLA SPRIEGUMA HISTERĒZE

Gints Kučinskis, Gunārs Bajārs, Jānis Kleperis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Virssprieguma – strāvas stipruma atkarība elektroķīmiskās sistēmās parasti pakļaujas Butlera – Volmera sakarībai. Pie strāvām, kas tuvas nullei, arī novērotie virsspriegumi ir niecīgi. Neseni litija injekcijas un ekstrakcijas materiālu pētījumi norāda uz šīs sakarības neizpildīšanos pie maziem virsspriegumiem, tādējādi radot neizzūdošu sprieguma histerēzi.

Darbā pētīts LiFePO₄ litija jonu bateriju katodmateriāls, kurā novērotā neizzūdošā sprieguma histerēze tiek saistīta ar secīgu litija injekciju LiFePO₄ graudos.

Tika novērota Butlera – Volmera tipa virsspriegumu – strāvas stipruma atkarība. Pie zemām strāvām novēroti virsspriegumi zem 10 mV. Tie ir zemāki par līdz šim publicētajām virsspriegumu vērtībām. Balstoties uz iegūtajiem rezultātiem, veikta LiFePO₄ secīgas uzlādes un izlādes modeļa izvērtēšana, noteiktas apmaiņas strāvu un lādiņa pārneses koeficientu vērtības.

Autori izsaka pateicību LZP zinātniskās sadarbības projektam nr. 666/2015. Šis darbs izstrādāts ar Eiropas Sociālā fonda atbalstu projektā «Atbalsts doktora studijām Latvijas Universitātē».

VOLTAGE HYSTERESIS OF LiFePO₄ LITHIUM ION BATTERY CATHODE MATERIAL

Gints Kucinskis, Gunars Bajars, Janis Kleperis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Overvoltage – current dependence in electrochemical systems usually obeys the Butler – Volmer equation. The overvoltages observed at currents close to zero are also usually negligible. However, recent studies of lithium insertion materials indicate that in some systems there is still considerable overvoltage measured even at very small currents, therefore non-vanishing voltage hysteresis can be observed.

In this work LiFePO₄ lithium ion battery cathode material has been studied. Non-vanishing voltage hysteresis of this material has been related to the sequential lithium insertion in LiFePO₄ grains.

A Butler – Volmer type overvoltage – current dependence was observed for high overvoltages. Overvoltages under 10 mV have been observed at low currents. These are lower than the values published until now. Based on the obtained results, LiFePO₄ particle sequential charging and discharging has been evaluated, exchange currents and charge transfer coefficients have been determined.

Authors acknowledge the financial support of Latvian Council of Science cooperation grant No. 666/2015. This work has been supported by the European Social Fund within the project «Support for Doctoral Studies at University of Latvia»

LiFePO₄ ELEKTROFORĒTISKĀ UZNEŠANA UZ TĒRAUDA ELEKTRODA

Karīna Bikova, Gints Kučinskis, Gunārs Bajārs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Elektroforēze ir metode, kurā šķīdinātājā izvietotas lādētas daļiņas var tikt pārvietotas, izmantojot elektrisko lauku. Tādējādi elektriska lauka iedarbības rezultātā daļiņas var tikt uznestas uz elektrodiem. LiFePO₄ ir plaši pētīts litija jonu bateriju katodmateriāls. LiFePO₄ katodus ar elektroforēzes pārklāšanas metodi (EPD) pirmo reizi sagatavoja Mazors un kolēģi.

Mūsu darbā N-metil-2-pirolidonā (NMP) tika ievietoti LiFePO₄, ogles kvēpi un polivinilidēna fluorīda (PVDF) saistviela masu attiecībās 75:15:10. PVDF ir laba šķīdība NMP, tādējādi dispersijas sagatavošana ir vienkāršāka kā izmantojot citus šķīdinātājus. Dispersijai tika pievienoti dažādi nejonu virsmaktīvās vielas Triton X-100 (TX-100) apjomi, lai noteiktu optimālo virsmaktīvās vielas daudzumu, kas nepieciešama EPD veikšanai.

Rezultāti liecina, ka gadījumā, kad TX-100 nebija pievienots, LiFePO₄ elektroforētiska uzklāšana nebija veiksmīga. Pēc 0.4 % (v/v) TX-100 pievienošanas LiFePO₄ kārtiņa tika veiksmīgi uznestā tomēr uzklāšanas temps bija lēns. Biezāka kārtiņa ir iegūta, pievienojot 1.6 % (v / v) TX-100, kas bija lielāks no TX-100 daudzumiem, kas tika pievienots suspensijai. EPD tika veikta 15 min ar elektriskajiem laukiem 100 V/cm un 120 V/cm.

ELECTROPHORETIC DEPOSITION OF LiFePO₄ ON A STEEL ELECTRODE

Karīna Bikova, Gints Kučinskis, Gunārs Bajārs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Electrophoresis is a method of moving charged particles through a medium by using an electric field induced by electrodes. Therefore particles can be deposited on the electrodes under the influence of an electrical field. LiFePO₄ is a widely researched cathode material for lithium ion batteries. LiFePO₄ cathodes were first prepared by electrophoretic deposition method (EPD) by Mazor et al.

In our work LiFePO₄, carbon black and polyvinylidene fluoride (PVDF) were inserted in N-Methyl-2-pyrrolidone (NMP) in mass ratio 75:15:10. PVDF has a good solubility in NMP than in acetone, therefore enabling easy preparation of the dispersion. Various amounts of the non-ionic surfactant Triton X-100 (TX-100) were added to the dispersion in order to study the optimal amount of the surfactant necessary for electrophoretic dispersion.

The results show that in the case where TX-100 was not added, electrophoretic LiFePO₄ deposition was not successful. After adding 0.4 % (v/v) TX-100, LiFePO₄ thin film was successfully deposited. However, the deposition rate was slow. A thicker film was obtained by adding 1.6 % (v/v) of TX-100, which is the biggest amount of TX-100 that was added to the suspension. EPD has been done for 15 min with electric fields 100 V/cm and 120 V/cm.

Authors acknowledge the financial support of National Research program of Latvia "Multifunctional materials and composites, photonics and nanotechnology" IMIS-2

NANOPORAINA OGLEKĻA MATERIĀLA KĀRTIŅU ELEKTROFORĒTISKA UZKLĀŠANA NO IZOPROPANOLA UN ŪDENS SUSPENSIJĀM

Anna Dorondo¹, Jānis Mateuss², Kaspars Kaprāns³, Gints Kučinskis³, Gunārs Bajārs³, Jānis Kleperis³

¹ *Latvijas Universitātes, Ķīmijas fakultāte*

² *Latvijas Universitātes, Fizikas un matemātikas fakultāte*

³ *Latvijas Universitātes, Cietvielu fizikas institūts*

Darba gaitā tika izmantots nanoporains oglekļa materiāls (NOM), kas iegūts termokīmiskā sintēzē. Sintēzes pamata metodoloģija ir 2 stadiju termiskās apstrādes process, kas ietver izejvielas karbonizāciju zemā temperatūrā (250-450 °C) un tai sekojošu termokatalītisku aktivāciju (600-800 °C). Sintēzes rezultātā iegūtais oglekļa un minerālu produkts pēc demineralizācijas ir nanoporains oglekļa materiāls ar šauru poru sadalījumu un augsti attīstītu īpatnējo virsmu (SBET vairāk nekā 2000 m²/g).²

Tika veikta elektroforētiska NOM uznešana no izopropanola un ūdens suspensijām uz tērauda elektroda potenciostatiskā režīmā pie spriegumiem 2-10 V/cm H₂O suspensijā un 20-150 V/cm izopropanola suspensijā. Suspendēto daļiņu virsmas lādiņa palielināšanai tika pievienots 1 M KOH šķīdums, palielinot pH vērtību no neitrālas uz bāzisku.

Iegūtās NOM kārtiņas tika analizētas izmantojot skenējošo elektronu mikroskopiju (SEM), rentgendifrakcijas (XRD) un enerģijas izkliedes rentgena spektroskopiju (EDX), un tām tika pētītas elektroķīmiskās īpašības, izveidojot litija jonu šūnu.

Tika secināts, ka elektroforēze noris efektīvāk, pievienojot 1.5 mL 1 M KOH uz 10 mL NOM suspensijas, Eksperimentāli tika noskaidrots, ka ūdens suspensijā elektroforēzes procesa optimālais spriegums ir 5 V/cm (30 min), pie lielāka sprieguma ūdens elektrolīze negatīvi ietekmē elektroforēzes procesu. No izopropanola suspensijas vienmērīgas kārtiņas tika elektroforētiski uznestas pie 70 V/cm (30 min).

ELECTROPHORETIC DEPOSITION OF NANOPOROUS CARBON MATERIAL FILMS FROM ISOPROPANOL AND WATER SUSPENSIONS

Anna Dorondo¹, Janis Mateuss², Kaspars Kaprans³, Gints Kucinskis³, Gunars Bajars³, Janis Kleperis³

¹ *Faculty of Chemistry, University of Latvia*

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

³ *Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

For experiments nanoporous carbon material was used (NCM), which had been made by a thermochemical reaction. The 2 stage synthesis is based on substrate carbonization at low temperature (250-450 °C) and thermocatalytic activation (600-800 °C). The resulting material after demineralization is NCM with highly nanoporous structure and large specific surface (SBET over 2000 m²/g).¹

NCM films were deposited on steel electrode from water and isopropanol suspensions using potentiostatic mode, 2-10 V/cm potential was used for electrophoretic deposition from H₂O suspension and 20-150 V/cm -from isopropanol suspension. To increase the surface charge of the suspended particles 1.5 mL 1M KOH has been added increasing pH from neutral to basic. Obtained NCM films were analyzed by scanning electron microscopy (SEM), X-ray diffraction (XRD) and energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX), electrochemical characteristics were studied in two electrode Li-ion cell.

It was concluded, that efficiency of electrophoresis is increased by adding 1.5ml (1M KOH) / 10ml (suspension). Optimal voltage for deposition from water suspension was 5 V/cm (for 30 min) under higher potential water electrolysis had a negative impact on the deposition process. For electrophoretic deposition from isopropanol most uniform films were obtained at 70V/cm (for 30 min).

The financial support of Latvian Science Cooperation Project No. 666/2014 is greatly acknowledged.

²Dobele G., Jakab E, Volperts A, Sebestyén Z, Zhurins A, Telysheva G., Formation of nanoporous carbon materials in conditions of thermocatalytic synthesis. Journal of Analytical and Applied Pyrolysis 103 (2013) 173–180

ELEKTROFORĒTISKI UZKLĀTU $\text{TiO}_2\text{-WO}_3$ KOMPOZĪTU STRUKTŪRA, OPTISKĀS UN FOTOKATALĪTISKĀS ĪPAŠĪBAS

Ineta Liepiņa¹, Gunārs Bajārs¹, Mārcis Rublāns², Andrejs Lūsis¹, Ēvalds Pentjušs¹,
Jānis Balodis¹, Jevgēnijs Gabrusenoks¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Latvijas Universitātes Fizikas un matemātikas fakultāte*

TiO_2 pateicoties tā fotokatalītiskajām īpašībām, zemām ražošanas izmaksām un ķīmiskajam inertumam ir daudzsološs materiāls ūdens un gaisa attīrošajām tehnoloģijām. Šajā darbā bi-komponents WO_3 tika izmantots kā foto-elektronu uzglabāšanas materiāls.

$\text{TiO}_2\text{-WO}_3$ pārklājumi tika iegūti, izmantojot elektroforētisko nogulsnešanu uz 3x3 cm tērauda plāksnēm ar elektriskā lauka intensitāti no 50 līdz 100 V/cm un laiku no 5 līdz 20 min. Dispersijas vide tika sagatavota no sālsskābes vai benzoskābes šķīduma izopropanolā, kurā tika pievienoti metālu oksīdi. Izgulsnētās kārtiņas tika sildītas 60 °C temperatūrā 2 stundas un pēc tam karsētas 500 °C arī 2 stundas.

Izmantojot rentgenstaru difrakciju tika iegūta fāzu struktūra un kristālu izmēri TiO_2 plānajās kārtiņās. Rentgenstaru fluorescences tika izmantota, lai noteiktu WO_3 daudzumu plānajās kārtiņās. Virsmas morfoloģija tika analizēta ar skenējošo elektronu mikroskopu.

Optiskās īpašības (absorbcijas koeficients, aizliegtās zonas platums) dažāda biezuma $\text{TiO}_2\text{-WO}_3$ paraugiem tika iegūti UV-redzamās gaismas diapazonā. Fotokatalītiskās īpašības iegūtajiem pārklājumiem tika novērtētas atkarībā no TiO_2/WO_3 daudzuma attiecības.

STRUCTURE, OPTICAL AND PHOTOCATALYTIC PROPERTIES OF $\text{TiO}_2\text{-WO}_3$ COMPOSITES PREPARED BY ELECTROPHORETIC DEPOSITION

Ineta Liepina¹, Gunars Bajars¹, Mārcis Rublans², Andrejs Lusis¹, Evalds Pentjuss¹,
Janis Balodis¹, Jevgenijs Gabrusenoks¹

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

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

Due to its photocatalytic capability, low cost and chemically inert properties, TiO_2 is a promising material for water and air contamination treatment technologies. In this work bi-component WO_3 is used as a photo-electron storing material.

$\text{TiO}_2\text{-WO}_3$ coatings were prepared by electrophoretic deposition 5 to 20 min on 3x3 cm steel substrates using electric field intensity ranges from 50 to 100 V/cm. Dispersion medium was prepared from either hydrochloric or benzoic acid solution in isopropanol where the metal oxides were added. Deposited films were heated at 60 °C for 2 h and then annealed at 500 °C for 2 h.

The phases and crystalline sizes of obtained TiO_2 thin films were determined by X-ray diffraction. X-ray fluorescence was used to establish WO_3 content in thin films. Surface morphologies were analyzed by scanning electron microscopy.

Optical properties (absorption coefficient, bandgap) for different thickness $\text{TiO}_2\text{-WO}_3$ thin films were determined in UV-visible light range.

Photocatalytic properties of obtained coatings were assessed in dependence on TiO_2/WO_3 content ratio.

The financial support of State Research Program IMIS-2 is greatly acknowledged.

TiO₂ NANODAĻIŅU PĀRKLĀJUMA UZ STIKLA AUDUMA IEGŪŠANA AR ELEKTROFORĒZI

Andrejs Lūsis, Gunārs Bajārs, Ineta Liepiņa, Jevgēnijs Gabrusenoks, Jānis Balodis,
Ēvalds Pentjušs

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Starp titāna oksīda (TiO₂) nano daļiņu fizikālajām un ķīmiskajām īpašībām būtisku vietu ieņem fotokatalītiskās īpašības. Stikla audumi ar savu ķīmisko, termisko un mehānisko īpašību kopu ir laba pamatne fotokatalītisko membrānu radīšanai.

Darbā tika izgatavota speciāla cirkulāra elektroforēzes šūna un veikti pētījumi par elektroforēzes pārklājumu iegūšanas metodikas izstrādi.

TiO₂ pārklājumi tiek iegūti no TiO₂ suspensijas elektroforēzes šūnā. Iegūtie TiO₂ nano daļiņu pārklājumi tika raksturoti ar XRD un Ramana spektriem tikko iegūtiem un termiski apstrādātiem gaisā 2h pie 500 °C. No Ramana spektriem seko, ka termiskā apstrāde sākotnēji iegūtos anatāza TiO₂ nano daļiņu pārklājumus pārveido anatāza un rutila fāzu maisījumā. Termiskā apstrāde nobīda XRD spektru līnijas par 0.5 (°) lielāku 2θ (°) vērtību virzienā.

ELECTROPHORETIC DEPOSITION OF TiO₂ NANO PARTICLES COATING ON THE GLASS FABRIC

Andrejs Lusis, Gunars Bajars, Ineta Liepina, Jevgenijs Gabrusenoks, Janis Balodis,
Evalds Pentjuss

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Among the titanium oxide (TiO₂) nano particles physical and chemical properties the photo catalytic properties take substantial place. The set of chemical, thermal and mechanical properties of glass fabrics is a good base for photo catalytic membrane creation.

The special circular electrophoresis cell had been made and the methodologies of electrophoretic coating deposition have been studied.

TiO₂ coatings are obtained from TiO₂ suspension in electrophoresis cell. The obtained TiO₂ nano particle coatings were characterized by XRD and Raman spectra of freshly obtained and heat treated in air 2h at 500 °C. From the Raman spectra follows that the heat treatment of originally obtained anatase TiO₂ nano particle coating converts it to anatase and rutile phase mixture. Heat treatment shifts XRD spectrum lines by 0.5 (°) to higher 2θ (°) value direction.

The financial support of IMIS2 project is greatly acknowledged.

CINKA OKSĪDU PLĀNO KĀRTIŅU SINTĒZE AR EKSTRAKCIJAS – PIROLĪTSKO METODI

Olga Kiseļova¹, Antons Cvetkovs², Uldis Rogulis¹, Vera Serga², Reinis Ignatāns¹, Kārlis Kundziņš¹

¹ *Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

² *Rīgas Tehniskās universitātes Neorganiskās ķīmijas institūts*

Cinka oksīds (ZnO) ir n-tipa pusvadītājs. Pateicoties materiāla kristāliskās struktūras parametriem, aizliegtās zonas platumam (3,37 eV istabas temperatūrā), lielai eksitonu saites enerģijai (60 meV) un dažādu ķīmisko elementu piemaisījumiem, materiālam ir labas optiskās, elektriskās, pjezoelektriskās un magnētiskās īpašības. Augstāk minētās īpašības padara ZnO par svarīgu materiālu ar dažādiem pielietojumiem, piemēram, fotodetektoros, gaismas diodēs, gāzu sensoros, biosensoros, saules baterijās u.c. Pētījuma ietvaros tika sintezētas tīras ZnO un ar CdO piejaukumu plānās kārtiņas, izmantojot ekstrakcijas – pirolītisko metodi Iegūtajiem paraugiem izmērīti XRD spektri, kuri apliecina, ka tika iegūtas ZnO un CdO kristāliskās fāzes plānajās kārtiņās, noteikts plāno kārtiņu biezums un virsmas morfoloģija.

SYNTHESIS OF ZINC OXIDE THIN FILMS BY EXTRACTION – PYROLYTIC METHOD

Olga Kiseleva¹, A. Cvetkovs², Uldis Rogulis¹, Vera Serga², Reinis Ignatans¹, Karlis Kundzins¹

¹ *Institute of Solide States Physics, University of Latvia*

² *Institute of Inorganic Chemistry, Riga Technical University*

Zinc oxide (ZnO) is a n-type semiconductor. Because of ZnO crystal structure parameters, wide direct band gap (3,37 eV at room temperature), large exciton binding energy (60 meV) and different chemical elements impurities material has good optical, electrical, piezoelectrical un magnetic properties. These properties make ZnO as an important material with a variety of applications, such as a photodetector, light-emitting diodes, gas sensors, biosensors, solar cells, etc.

In the present study thin films of pure ZnO and doped with CdO were synthesized by extraction - pyrolytic method. The XRD, the thinkness and the surface morphology of thin films were measured. XRD patterns showed crystalline phases of ZnO and CdO in the thin films.

AR Mn LEĢĒTAS PLZT 8/65/35 ELEKTROOPTISKĀS KERAMIKAS POLARIZĀCIJAS ĪPATNĪBAS

Vilnis Dimza, Lelde Kundziņa, Māris Kundziņš, Kārlis Kundziņš, Aina Plaude, Māris Līviņš,
Maija Antonova
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Pētīta polarizācijas uzvedība elektrooptiskās keramikas PLZT 8/65/35 (La₈)+X sv.% Mn (X=0.01; 0.1; 0.3; 1.0 un 3.0) (La₈+Mn) sastāvos.

Tiek analizēti polarizācijas mehānismi vājos un stipros elektriskos laukos, Attiecīgi, tika mērīta kompleksā dielektriskā caurlaidība $\epsilon^* = \epsilon' - i\epsilon''$ ($f=129\text{Hz}-1\text{MHz}$) pie elektriskā lauka 0,4V/cm un polarizācijas histerēzes cilpas (hysteresis loops) P(E) pie laukiem 1-30kV/cm. Temperatūras diapazons: no -50°C līdz +400°C.

Ja neleģēta La₈ ϵ^* uzvedība atbilst tipiskai relaxor uzvedībai (piemēram, izpildās Fogela-Fulčera likums), tad, ievadot Mn piedevu relaxor tipa uzvedības komponente samazinās un parādās Debaja (Debye), Maksvela-Vāgnera (Maxwell-Wagner) un maiņstrāvas vadāmības (alternating current (AC) dispersion) tipa dispersiju komponentes. To, vai citu minēto dispersiju dominēšana atkarīga no Mn koncentrācijas un temperatūras.

Polarizācijas elektriskā lauka atkarību P(E) izskats arī būtiski mainās atkarībā no Mn koncentrācijas un temperatūras.

Var iegūt vairāku veidu P(E):

- klasiskam segnetoelektriskam (SE) (ferroelectric) materiālam raksturīgas taisnstūrveida (rectangular) histerēzes cilpas;
- līdzīgas antisegetoelektriķim AFE (antiferroelectric) materiālam dubultās (double) histerēzes cilpas;
- iežņaugtas (constricted) histerēzes cilpas.

Tiek diskutēta dubulto histerēzes cilpu izcelsme, kā

- antisegetoelektriskās (ASE) fāzes klātbūtne;
- elektriskā lauka inducēta fāzu pāreja (piem., kā: relaxor→ASE, relaxor→SE);
- novecošanās (Aging) efektu ietekme.

POLARISATION SPECIFIC CHARACTERISTICS IN Mn DOPED PLZT 8/65/35 ELECTRO-OPTICAL CERAMIC

Vilis Dimza, Lelde Kundzina, Maris Kundzins, KarlisKundzins, Aina Plaude, Maris Livins,
Maija Antonova
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

In the research was studied polarization behaviour of electro-ceramic PLZT 8/65/35 (La₈) + X wt.% Mn (X = 0.01; 0.1; 0.3; 1.0 and 3.0) (La₈ + Mn) configurations. The study contains an analysis of polarisation mechanisms in the strong and weak electric fields, respectively, complex dielectric permeability $\epsilon^* = \epsilon' - i\epsilon''$ ($f=129\text{ Hz} - 1\text{ MHz}$) for electric field 0,4 V/cm and polarization hysteresis loops P(E) for electric fields 1-30 kV/cm. Temperature range is from -50°C to +400°C.

If non-doped La₈ ϵ^* corresponds to typical relaxor behaviour (for example, Vogel-Fulcher law is met), then by introduction of Mn additive the relaxor behaviours component decreases and Debye, Maxwell-Wagner and alternating current (AC) type dispersion components appear. Whether these or other dispersion dominates depends on the Mn concentration and temperature. Character of dependence P(E) of polarization electric field significantly varies depending on the Mn concentration and temperature. It is possible to get several kinds of P(E) dependence:

- rectangular hysteresis loops characteristic to classical ferroelectric material;
- double hysteresis loops similar to antiferroelectric material;
- constricted hysteresis loops.

There is the discussion about the double hysteresis loops origin as:

- presence of antiferroelectric phase;
- phase transition induced by the electric field (eg. as: relaxor→antiferroelectric material; relaxor→ferroelectric material);
- influence of the aging effect.

NO RECIKLĒTA PET IEGŪTU POLIURETĀNU PUTUPLASTU MODIFICĒŠANA AR OGLEKĻA NANODAĻIŅĀM

Laura Stiebra¹, Uģis Cābulis¹, Māris Knite²

¹*Latvijas Valsts Koksnes ķīmijas institūts*

²*Rīgas Tehniskās universitātes Tehniskās fizikas institūts*

Mūsdienās oglekļa nanodaļiņas, pateicoties to augstajām mehāniskajām un vadītspējas īpašībām, tāpat kā poliuretāna putuplasti to vieglā svara dēļ, ir kļuvuši arvien pieprasītāki un to izmantošanas iespējas dažādās jomās ir pieaugusi.

Šajā darbā, izmantojot oglekļa nanocaurulītes, tika modificēti poliuretānu/poliizociānūrātu (PUR/PIR) putuplasti, ar mērķi iegūt elektrovadošus viedos materiālus. Oglekļa nanodaļiņas PUR/PIR sistēmās tika ievadītas dažādās koncentrācijās (0,18-0,46%), tika mainīti arī izocianāta indeksi ($II=110-260$). Paraugiem kā uzputošanās aģents izmantots ūdens, to blīvums $200\pm 5 \text{ kg/m}^3$. Eksperimentālajā daļā noteikta tilpuma īpatnējā elektriskā pretestība un siltumvadītspēja. Veikta mehānisko īpašību testēšana.

PUR putuplastiem ar $II=110$, pievienojot 0,18% oglekļa nanocaurulīšu, elektrovadītspēja palielinās par 5-6 kārtām. Nanodaļiņu koncentrācijai palielinoties, tilpuma īpatnējā pretestība samazinās. II pieaugot, nanocaurulīšu ietekme uz PUR/PIR putuplastu elektrovadītspēju samazinās - pievienojot pat 0,46%, tilpuma īpatnējā pretestība samazinās tikai par 2 kārtām.

Darba gaitā tika noskaidrots, ka, pievienojot oglekļa nanodaļiņas, robežstiprība un elastības modulis stiepē samazinās. II šos rādītājus būtiski neietekmē. Izgatavoto kompozītu siltumvadītspēju neietekmē ne izocianāta indekss, ne ievadīto pildvielu daudzums. Tas svārstās robežās starp 31-33 mW/m·K.

Secinājums: elektrovadītspēja poliuretānu/poliizociānūrātu putuplastiem palielinās, pieaugot oglekļa nanocaurulīšu daudzumam. Optimālais izocianāta indekss ir 110.

POLYURETHANE FOAMS OBTAINED FROM RECYCLED PET AND MODIFIED WITH CARBON NANOPARTICLES

Laura Stiebra¹, Uģis Cabulis¹, Maris Knite²

¹*InstituteLatvian State Institute of Wood Chemistry*

²*Institute of Technical Physics, Riga Technical University*

Carbon-based nanoparticles due to their high mechanical and transport properties have attracted a great deal of interest and have opened up a whole new set of possibilities in different systems. Likewise increased interest for research and development are receiving light weight materials such as polyurethane foams.

In this work carbon nanotubes were used in order to modify polyurethane/polyisocyanurate (PUR/PIR) foams and to obtain conductive smart materials. Different concentrations of nanotubes (0.18-0.46%) and isocyanate indexes ($II=110-260$) was used. Foaming agent used for samples – water. Density of all samples – $200\pm 5 \text{ kg/m}^3$. Electrical properties, as well as heat conductivity and mechanical properties was investigated.

Volume electric resistivity for PUR foams with $II=110$ and 0.18% carbon nanotubes is 5 to 6 orders lower, than without nanoparticles. Increasing concentration of nanoparticles, electric resistivity decreases. Increasing II , carbon nanotube influence on PUR/PIR foam electric conductivity decreases – adding 0.46%, volume resistivity reduces by 2 orders.

During the work it was found that adding carbon nanotubes, tensile strength and modulus of elasticity decreases. II do not influence these results dramatically. Heat conductivity of prepared composites is not affected neither by isocyanate index, neither concentration of dispersed particles. It is in the range between 31 and 33 mW/m·K.

Conclusion: electrical conductivity for polyurethane/polyisocyanurate foams increases, increasing concentration of carbon nanotubes. The optimal index of isocyanate is 110.

TRĪS KOMPONENŠU MEMBRĀNU PĒTĪJUMI IZMANTOŠANAI DEGVIELAS ŠŪNĀS

Jūlija Hodakovska, Jānis Kleperis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Attīstoties degvielas šūnu tehnoloģijām un tuvojoties to plašai izmantošanai, arvien aktuālāks paliek jautājums par lētāku un plašāk pieejamu tās sastāvā ieejošo materiālu izveidi, kas ļautu šai tehnoloģijai veiksmīgi ienākt plašajā tirgū. Polimēru degvielas šūnām viena no tādām komponentēm ir protonu vadoša polimēru membrāna.

Nafion un līdzīgi uz fluora bāzēti polimēri jau vairāk nekā 50 gadus ieņem vadošo lomu protonus vadošu membrānu jomā, bet to ražošanas izmaksas un daži trūkumi (piemēram, metanola caurlaidība metanola degvielas šūnās) izraisa mazāku patērētāju interesi par tehnoloģiju kopumā, neskatoties uz daudzajām degvielas šūnu pievilcīgajām pusēm. Tāpēc arvien tiek veikti plaši pētījumi, lai atrastu materiālus, kas spētu nodrošināt līdzīgu protonu vadāmību, bet nebūtu ar iepriekš minētiem trūkumiem. Polimēru daudzveidība un modifikācijas iespējas atstāj pētniekiem plašu darbības lauku iespēju tuvākā nākotnē sintezēt nepieciešamos materiālus.

Mūsu darbā tiek apskatītas trīs komponentu membrānas: 2 polimēru (sulfonēts poli(ēter-ēter-keton)s un Nafion) un neorganiskā komponente (oksīdi). Polimēri nodrošina protonu vadāmību un kalpo kā neorganiskas komponentes matrica. Izvēlēto oksīdu īpašības ļauj palielināt ūdens daudzuma saglabāšanas spēju membrānā pie lielākām temperatūrām un pazemināta mitruma, tādējādi nodrošinot labāku protonu vadāmību un plašākas pielietojšanas iespējas.

Viens no autoriem (JH) pateicas ESF Grantam 2013/0046/1DP/1.1.1.2.0/13/APIA/VIAA/021.

RESEARCH OF THREE-COMPONENT MEMBRANES FOR POLYMER FUEL CELLS

Julija Hodakovska, Janis Kleperis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

To enter wide market, the fuel cell technology needs to develop better materials to make the technology more attractive. For polymer electrolyte fuel cells one of such components is membrane.

Nafion and similar polymers are on the leading edge for last 50 years, but some of its disadvantages (like production costs, methanol permeability etc.) could reduce fuel cell technology's attractiveness to buyers despite some advantages. This is the reason why search for good proton conductive materials which also are competitive in other areas. The variability and possibilities for multiple modifications gives to polymer compounds a lot of possibilities for researchers.

Our research work is focused on three-compound membranes: two are organic compounds (sulfonated poly(ether-ether-ketone) and Nafion) and one is an inorganic material (oxide). Polymers make proton conductive matrix, but inorganic components are added to improve material's ability to retain water (that is important component in proton conductivity mechanisms) at higher temperatures and in case of reduced humidity.

One of authors (JH) gratefully acknowledges the financial support of ESF Grant 2013/0046/1DP/1.1.1.2.0/13/APIA/VIAA/021.

INDIJA PIEJĀUKUMA FERĪTĀ IETEKMES IZPĒTE UZ STRUKTŪRU, FIZIKĀLKĪMISKĀM ĪPAŠĪBĀM UN FOTOAKTIVITĀTI PLĀNĀS KĀRTIŅĀS

Jānis Zemītis¹, Mārtiņš Vanags^{1,2}, Jānis Kleperis²

¹ Rīgas Tehniskās universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte

² Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Fotoelektrokīmiskā fotonu enerģijas pārvēršana ķīmiskajā enerģijā ir alternatīva pieeja saules enerģijas uzglabāšanā. Hematīts jeb $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ tiek pētīts kā n – tipa pusvadītājs, kuru varētu pielietot fotoelektriskajā ūdens šķelšanā. Pētījumi ir pierādījuši, ka tīrs hematīts nesniedz vēlamo rezultātu. Viena no metodēm kā uzlabot fotoelektrokīmiskās īpašības ir hematīta dopēšana ar dažādu vielu atomiem.

Eksperimentu gaitā tika sintezēti dažādi ar indiju dažādās koncentrācijās dopēta hematīta nanoslāņi uz stikla ar elektrovadošu caurspīdīgu FTO (alvas oksīds ar fluora piejauku) klājumu. Nanoslāņi tika iegūti no attiecīgo metālu hlorīdiem, izmantojot pirolīzes metodi. Šīm kārtiņām tika mērīta fotoaktivitāte, virsmas topogrāfija, biezums, struktūras fāzes u.t.t. Ir novērots, ka palielinot indija atomu koncentrāciju, fotoaktivitāte pieaug, sasniedzot maksimumu pie noteiktas koncentrācijas un pēc tam samazinoties.

Autori pateicas Valsts Pētījumu programmai enerģētikā LATENERGI 2014-2017 par finansiālu atbalstu pētniecībai.

IMPACT OF INDIUM IMPURITIES IN THIN FILM FERRITE ON STRUCTURE, PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES AND FOTOACTIVITY

Jānis Zemītis¹, Mārtiņš Vanags¹, Jānis Kleperis²

¹ Material science and applied chemistry faculty, Riga Technical University;

² Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The photo-electrochemical conversion of photon energy into chemical fuel is an alternative approach to store solar energy. Hematite ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) has been studied for decades as n -type semiconductor electrode for photoelectrical water splitting. Nevertheless, studies have shown that pure hematite performs poorly. One of approaches is modifying the electronic conductivity by doping the hematite with different element atoms.

In this study, we have synthesized different doped hematite nano-layers on FTO glass with indium in different concentrations. These nano-layers were obtained from respective metal chlorides by pyrolysis. There were measured foto-activity, surface topography, thickness, phases etc. It has been observed that foto-activity reaches maximum and then decreases when increasing indium concentration.

The authors would like to thank the National Research Program in energetic 2014-2017 LATENERGI for financial support of research.

ELEKTROENERĢIJAS SAVĀKŠANA NO PIESĀRŅOTU ŪDEŅU BASEINIEM, IZMANTOJOT MIKROORGANISMU BATERIJAS

Roberts Berkis¹, Artūrs Gruduls², Rasa Šmite³, Raitis Šmits³, Jānis Kleperis⁴

¹*Rīgas 64. vidusskola;*

²*Latvijas Universitātes Bioloģijas fakultāte;*

³*Mākslas, zinātnes, kultūras un inovāciju tīkls RIXC*

⁴*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts;*

Līdz šim tika uzskatīts, ka enerģijas iegūšana ir saistīta ar apkārtējās vides piesārņošanu, tomēr ir iespējams apvienot enerģijas ražošanu ar vides attīrīšanu. Piesārņota ūdens dzelmē, kā arī purvos baktērijas nemitīgi dara savu labo darbu, noārdot organiskos atkritumus. Šajā procesā slēpjas neizmantotas enerģijas rezerves - bezskābekļa apstākļos (anaerobā vidē) organiskās vielas tiek noārdītas fermentācijas procesos un bioķīmiskajās reakcijās rodas dažādi blakusprodukti, metāns, oglekļa gāze un arī ūdeņraža joni un „brīvie” elektroni. Izmantojot īpaši izveidotas sistēmas – mikroorganismu degšūnas jeb Microbial Fuel Cells (MFC) šos elektronus un ūdeņraža jonus iespējams izmantot elektrības iegūšanai. Šādās degšūnās strāvas ir ļoti vājas, tādēļ līdz elektroierīču darbināšanai jāatrisina elektrības uzkrāšanas jautājums. Darbā izveidota mikroorganismu degšūna ar anodu no poraina oglekļa materiāla un katodu no metāla sieta, kurš pārklāts ar katalizatoru, ar mērķi novērtēt elektrības ieguves iespējas no dabīgas ekosistēmas. Izstrādāta elektroenerģijas uzkrāšanas shēma ar superkondensatoriem elektrības savākšanai no mikroorganismu degšūnas dabā.

Autori pateicas Valsts Pētījumu programmai enerģētikā LATENERGI 2014-2017 par finansiālu atbalstu.

ELECTRICITY COLLECTION FROM WASTE WATER BASINS USING MICROBIAL BATTERIES

Roberts Berkis¹, Artūrs Gruduls², Rasa Šmite³, Raitis Šmits³, Jānis Kleperis⁴

¹*Riga Secondary School № 64;*

²*Faculty of Biology, University of Latvia;*

³*RIXC – Network of Art, Science, Culture and Innovations*

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

Until now, it was thought that the production of energy is associated with the pollution of the environment; however, it is possible to combine energy production with environmental treatment processes. In the depths of polluted water as well as in marshes the bacteria are constantly doing their good work, breaking down organic waste. In this process lies reserves of untapped energy – in anaerobic conditions the organic matter is broken down by fermentation processes and biochemical reactions are forming a variety of products: methane, carbon dioxide hydrogen ions and the "free" electrons. Using a specially designed system - Microbial Fuel Cell (MFC) it is possible to exploit these electrons and hydrogen ions for electricity production. Current in such MFC is very weak, so the power amplification is necessary, what can be accomplished with electricity accumulation. In our work the microbial fuel cell is made from porous carbon anode material and a metal mesh cathode, coated with a catalyst, to assess the opportunities of obtaining electricity from natural ecosystems. Electricity storage circuit is developed with supercapacitor to store electricity produced by MFC under realistic operating conditions.

SINTEZĒTO CEOLĪTU STRUKTŪRAS UN SASTĀVA RAKSTUROŠANA UN ŪDEŅRAŽA ADSORBCIJAS PĒTĪJUMI TAJOS

Amanda Dolgā¹, Ingars Lukoševičs¹, Pēteris Lesničenoks², Jānis Kleperis³

¹*Rīgas Franču Licejs;*

²*Rīgas Tehniskās Universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte;*

³*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts;*

Lai ieviestu jaunu degvielu tautsaimniecībā un attīstītu infrastruktūru, tajā pašā laikā samazinot fosilo kurināmo īpatsvaru tautsaimniecībā, nepieciešams veikt pētījumus un atrast efektīvāko veidu kā uzglabāt un pārvadāt ūdeņradi. Pateicoties savām unikālajām īpašībām, nanoporu materiāls ceolīts jau vairākus gadu desmitus tiek izmantots dažādās cilvēka darbības sfērās – sākot ar medicīnu un beidzot ar lauksaimniecību: nepatīkamu aromātu novēršanai pagrabos, noliktavās vai saldēšanas iekārtās, tiek pielietots kā sorbents gāzu, dzeramā ūdens un rūpnieciskā ūdens attīrīšanā, ar to tiek veikta augšnes cietās virskārtas deaktivācija, kas augkopībā palīdz būtiski palielināt ražīgumu. Mūsu darbā veiktais pētījums saistīts ar ūdeņraža uzglabāšanas nozari un pētīto materiālu izmantošanas iespējām automašīnas ūdeņraža degvielas bākā. Veikta ceolītu sintēze, dabiskā klinoptilolīta un sintezēto ceolītu modifikācija ar joniem, struktūras un sastāva pētījumi šiem materiāliem. Vienkārša metode izmantota ceolītā saistītā ūdeņraža daudzuma noteikšanai ar nelielu pārspiedienu (līdz 2.2 bāri) un temperatūrās no -173 °C līdz +200 °C.

Autori pateicas Valsts Pētījumu programmai enerģētikā LATENERGI 2014-2017 par finansiālu atbalstu.

CHARACTERIZATION OF STRUCTURE AND COMPOSITION OF SYNTHESIZED ZEOLITES AND HYDROGEN ADSORPTION STUDIES

Amanda Dolgā¹, Ingars Lukoševičs¹, Pēteris Lesničenoks², Jānis Kleperis³

¹*Riga French Lyceum;*

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

³*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

Solid state hydrogen storage materials have become a key area of research over the past 20 years. In order to introduce a new fuel in economy and develop necessary infrastructure, while reducing the share of fossil fuels in the economy, it is necessary to carry out extensive research and find the most efficient way to store and transport hydrogen. Thanks to its unique properties, nanoporous material zeolite for several decades is used in various areas of human activity - from medicine to agriculture, environmental treatment: the prevention of unpleasant odors in basements, warehouses or refrigeration equipment, is used as a gas sorbent, treatment of drinking water and industrial water etc.

Scientific investigations performed in this work are connected to hydrogen storage – possibility to use investigated materials in hydrogen fuel storage tank in a car. Synthesis and modification of different zeolite materials is accomplished and morphology and structure investigated. The measurement of amount of absorbed hydrogen has been performed during studies of synthesized materials. An original method has been developed for hydrogen sorption in temperatures between -173 °C and 200 °C.

RECIKLĒTA GRAFĪTA VAIRĀK-SLĀŅU GRAFĒNA PIELIETOJUMS ELEKTROVADOŠAS TINTES IZSTRĀDĒ

Gustavs Baumanis¹, Krišjānis Auziņš¹, Pēteris Lesničenoks², Jānis Zemītis²,
Jānis Kleperis³

¹*Rīgas Franču Licejs;*

²*Rīgas Tehniskās Universitātes Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte;*

³*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts;*

Grafēns ir 21. gadsimta materiāls, to veido oglekļa atomi viena grafīta slāņa veidā. Materiāls pirmo reizi iegūts tikai 2004.gadā, un tam piemīt unikālas fizikālķīmiskās īpašības un paredz lielu lomu nākotnē.

Mūsu darbā parādīts, ka ar vienkāršu elektroķīmiskās atslāņošanas metodi no rūpnieciskiem atkritumiem ņemtu grafītu var pārvērst grafēnā. Sākumā tiek iegūts daudzslāņu materiāls, un ultraskaņā tas tiek sasmalcināts. Grafēna klātbūtne iegūtajā materiālā pierādīta ar struktūru un morfoloģiju noteicošām metodēm – rentgenstaru difrakcijas un skenējošo elektronu mikroskopijas komplektā ar izkliedētās enerģijas spektroskopijas metodēm. Iegūtā materiāla reducēšana Ar:H₂ (95:5) atmosfērā palielina grafēna daļu daudzslāņu grafītā. Emulsijas veidošanai pārbaudīti dažādi šķīdinātāji, kā arī izmantota apstrāde ultraskaņas vannā. Emulsija klāta uz dažādām virsmām, izmantojot vairākas iekārtas, sākot ar vienkāršāko – rakstāmspalvu, un beidzot ar tintes printeri. Iegūti klājumi ar dažādu pretestību, zemākā bija 8-10 Ω/kvadrāta robežās, bet augstākā virs 100 k Ω/kvadrāta.

Autori pateicas Valsts Pētījumu programmai IMIS² 2014-2017 par finansiālu atbalstu.

APPLICATION OF MULTI-LAYER GRAPHENE FROM RECYCLED GRAPHITE IN THE DEVELOPMENT OF CONDUCTIVE INK

Gustavs Baumanis¹, Krišjānis Auziņš¹, Pēteris Lesničenoks², Jānis Zemītis²,
Jānis Kleperis³

¹*Riga French Lyceum;*

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

³*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

Graphene is material of the 21st century, and is composed from carbon atoms with graphite layered structure in the form of single layer. The material was produced for the first time only in 2004, and it has unique physical-chemical properties and provides a large role in the future.

Our work shows that in a simple electrochemical exfoliation method is possible the industrial waste graphite to convert into graphene. At first, multi-layer material is obtained, and then treated with ultrasound when it crushing happens. The presence of graphene in the synthesized material has been demonstrated with the structural and morphological methods - X-ray diffraction and scanning electron microscopy bundled with energy dispersive spectroscopy. The reduction at high temperature in Ar:H₂ (95:5) atmosphere increases the share of multilayer graphene in material. Different solvents were tested for the ability to form a homogeneous emulsion with synthesized graphene after treatment in ultrasonic bath. Obtained emulsions were coated on a variety of surfaces using multiple devices, starting with the simplest - nib, and finally with an inkjet printer. Obtained coatings have different resistances, the lower was 8-10 Ω /square and the highest was above 100 k Ω /square.

TiO₂ NANOSTRUKTŪRU SINTĒZE UN PIELIETOJUMI ŪDENS ATTĪRĪŠANAI

Rihards Vaivods¹, Kārlis Lācis¹, Ainārs Knoks², Jānis Kleperis², Līga Grīnberga²

¹*Rīgas 64. vidusskola*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

TiO₂ nanostruktūras ir daudzsološs materiāls tīrākas vides nodrošināšanai ne tikai atmosfērā, bet arī ūdenī. Absorbējot Saules starojumu, titāna oksīds, ir spējīgs sadalīt videi kaitīgus organiskos savienojumus, tādējādi attīrot ūdeni. Nanostruktūrām ir lielāka aktīvā virsma, tās nodrošina aktīvāku procesu norisi ūdenī. Turklāt TiO₂ ir ķīmiski inerts, tādēļ tā nanostruktūrām sagaidāms ilgāks dzīves laiks attīrāmajā vidē. Darbā kā sintēzes metode ir izvēlēta elektroķīmiska anodēšana. Šī metode ļauj iegūt kvalitatīvas nanostruktūras, izmantojot nelielu eksperimentālo iekārtu. Iegūto TiO₂ pārklājumu struktūrā ar rentgenstaru difrakcijas metodi tiek meklēta anatāza fāze, bet virsmas pētījumos ar skenējošās elektronu mikroskopijas palīdzību notiek raksturīgo parametru noteikšana titāna dioksīda nanocaurulīšu klājumam. Mūsu darbā kā iegūto TiO₂ nanostruktūru foto-katalītiskās aktivitātes raksturojumu izmanto sintezēto materiālu fotostrāvas mērījumus. Lielāka īpatnējā fotostrāva nozīmē lielāku fotokatalītisko spēju un nodrošina ātrāku ūdens attīrīšanas ciklu.

Autori izsaka pateicību LZP sadarbības projektam Nr. 666 par finansiālo atbalstu.

SYNTHESIS OF TiO₂ NANOSTRUCTURES FOR WATER PURIFICATION

Rihards Vaivods¹, Kārlis Lācis¹, Ainārs Knoks², Janis Kleperis², Līga Grinberga²

¹*Riga 64th Secondary School*

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

TiO₂ nanostructures are promising material serving for a cleaner environment not only in the atmosphere but also in the water. Titanium dioxide is able to split environmentally harmful organic compounds in water while absorbing solar radiation, thus purifying polluted water. Self-oriented nanostructures are with large active surface and they provide more active photo-catalytic molecule-splitting processes in the water. In addition, TiO₂ is chemically inert material, therefore nanostructures are expecting longer lifetime in an environment that must be cleaned.

In our work an electrochemical anodizing method is selected for synthesis of TiO₂ nanotubes. This method makes it possible to obtain high-quality nanostructures using a simple pilot plant. The anatase phase is sought in resulting TiO₂ coating structures using X-ray diffraction method, and surface studies by scanning electron microscopy is applied for determination of characteristic parameters of the titanium dioxide nanotube coatings. Photocurrent measurements are used for the characterization of photo-catalytic activity of the synthesized materials in our work. Increased specific photocurrent means higher photo-catalytic ability and enables faster water treatment cycle.

The financial support of LSC cooperation project No. 666 is greatly acknowledged.

ELEKTRONU LĀDIŅA BLĪVUMA INTEGRĒŠANAS PARAMETRU OPTIMIZĀCIJA BADERA METODEI

Maksims Sokolovs, Jurijs Mastrikovs, Jevgenijs Kotomins
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Viens no būtiskiem rezultātiem no jebkura atomārā līmeņa aprēķiniem ir elektronu lādiņa sadalījums. Elektronu lādiņa aprēķins ir atkarīgs no izmantotās metodes. Metodes, kuras pamatojas uz Blīvuma funkcionālu teoriju (BFT), atļauj mums iegūt elektronu lādiņa blīvumu. Integrējot tā blīvuma vērtības, mēs izrēķinām elektronu lādiņu konkrētām jonam. Izaicināšs uzdevums ir nodefinēt jona tilpumu lādiņa blīvuma integrēšanai. R. Baders piedāvāja pagaidam visveiksmīgāko topoloģisko metodi tilpuma definēšanai.

Skaitliskajos BFT aprēķinos mums ir diskreti elektronu lādiņa blīvumi, kas prasa blīvuma matricas parametru optimizāciju. Izmantojot ABO₃ modeli, mēs veicam vairākus aprēķinus dažādiem lādiņa režģa izmēriem. Optimizētajiem parametriem iz praktiskais pielietojums, analizējot sistēmas elektronu lādiņu, kā arī magnētisko spinu sadalījumu, izrkēķināto ar datorkodu VASP.

OPTIMIZATION OF THE ELECTRON CHARGE DENSITY INTEGRATION PARAMETERS, FOR THE BADER METHOD

Maksims Sokolovs, Yuri Mastrikov, Eugene A. Kotomin
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

One of the essential results of any atomistic level calculations is electron charge distribution. Electron charge calculation depends on the method applied. Density Functional Theory (DFT) –based methods allow us to obtain electron charge density. Integrating values of that density, we calculate electron charge for particular ions. It is quite a challenging task to define ionic volumes for charge density integration. The most successful topological method was proposed by R. Bader.

In numerical DFT calculations we deal with discrete electron charge densities, which requires optimization of the density matrix parameters. Using ABO₃ – as a model system, we performed multiple calculations for different resolutions of the charge grid. Optimized parameters have a practical application in electron charge, as well as magnetic spin distribution analysis of the systems, calculated by the computer code VASP.

- [1] Bader R F W 1990 Atoms in Molecules: a Quantum Theory (New York: Oxford University Press)

STRUKTŪRA, ELEKTRISKĀS UN OPTISKĀS ĪPAŠĪBAS ZnO:Ir PLĀNAJĀM KĀRTIŅĀM, KAS IEGŪTAS AR REAKTĪVO MAGNETRONO KOPIZSMIDZINĀŠANU

Mārtiņš Zubkins, Roberts Kalendarevs, Kārlis Kundziņš, Jevgēnijs Gabrusenoks,
Kaspars Vilnis, Andris Āzens, Juris Purāns
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Turpmāku caurspīdīgās elektronikas attīstību uz caurspīdīgu, elektrovadošu oksīdu (TCO) bāzes kavē p-tipa vadītāju trūkums. Eksperimentālu un teorētisku pētījumu rezultāti rāda, ka polikristāliskas spineļa ZnIr_2O_4 plānās kārtiņas ar atbilstošiem akceptora tipa defektiem ir p-tipa vadītāji [1,2]. ZnO ar mazu Ir koncentrāciju ir pētīts tikai ar pirmo principu DFT aprēķiniem [3], bet eksperimentāli darbi nav veikti. Šajā darbā tiek pētītas īpašības ZnO:Ir plānajām kārtiņām, kas iegūtas ar reaktīvo magnetrono kopizsmidzināšanu.

ZnO:Ir plānās kārtiņas tika iegūtas ar reaktīvo magnetrono kopizsmidzināšanu $\text{Ar}+\text{O}_2$ atmosfērā, izmantojot Zn un Ir mērķus. Zn mērķis tika darbināts konstantā 200 W (DC) jaudas režīmā, bet Ir zemas jaudas (6 – 25 W) un zemas frekvences (100 Hz) pulsējošā režīmā ar papildus režģi virs mērķa, lai samazinātu Ir izsmidzināšanas un uzklāšanas ātrumu. Paraugu sērija tika iegūta pie dažādām Ir mērķa (katoda) jaudām, tādā veidā variējot Ir koncentrāciju kārtiņās. Procesa laikā pamatiņu temperatūra bija 300 °C un darba spiediens 10 mTorr ($Q(\text{Ar}) = 20 \text{ sccm}$, $Q(\text{O}_2) = 10 \text{ sccm}$).

STRUCTURAL, ELECTRICAL AND OPTICAL PROPERTIES OF ZnO:Ir THIN FILMS DEPOSITED BY REACTIVE MAGNETRON CO- SPUTTERING

Martins Zubkins, Roberts Kalendarev, Karlis Kundzins, Jevgenijs Gabrusenoks,
Kaspars Vilnis, Andris Azens, Juris Purans
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

One of the obstacles to further developments of transparent electronics based on transparent conductive oxide (TCO) thin films is lack of p-type conductors. Polycrystalline spinel ZnIr_2O_4 thin films with appropriate acceptor defects are shown as p-type conductors by experimental and theoretical studies [1,2]. Light ZnO doping with Ir has been studied only with first principles DFT calculation [3] without any experimental investigation. This study investigates properties of ZnO:Ir thin films deposited by reactive magnetron co-sputtering.

ZnO:Ir thin films were deposited by reactive magnetron co-sputtering from a metallic Zn and Ir targets in an $\text{Ar}+\text{O}_2$ atmosphere. Zn target was sputtered in constant 200 W (DC) mode, but Ir in low power (6 – 25 W) and low frequency (100 Hz) pulse mode with additional grid above the target in the order to decrease the sputtering and deposition rate of Ir. A set of samples was deposited at different Ir target (cathode) powers to vary the Ir concentration in the films. Substrate temperature was kept at 300 °C and working pressure at 10 mTorr ($Q(\text{Ar}) = 20 \text{ sccm}$, $Q(\text{O}_2) = 10 \text{ sccm}$).

- [1] Dekkers M, Rijnders G, Blank D H A 2007 Appl. Phys. Lett. 90 021903
- [2] Amini M N, Dixit H, Saniz R, Lamoén D, Partoens B 2014 Phys. Chem. 16 2588
- [3] Ramo D M, Bristowe P D 2013, 2014 Thin Solid Films 555 112-116

IRĪDIJA JONU ABSORBCIJAS ĪPAŠĪBAS CINKA-IRĪDIJA OKSĪDA PLĀNĀS KĀRTIŅĀS

Vera Skvorcova, Mārtiņš Zubkins, Roberts Kalendarevs, Georgijs Čikvaidze, Juris Purāns
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Darbā tika pētīti irīdija jonu absorbcijas spektri cinka-irīdija oksīda plānās kārtiņās ar dažādām irīdija atomu koncentrācijām. Kārtiņas tika uzklātas ar reaktīvo DC magnetrona izsmidzināšanu.

Paraugi, kuri satur irīdiju, ir caurspīdīgi redzamajā spektra apgabalā. Pieaugot irīdija koncentrācijai kārtiņas caurlaidība samazinās. Absorbcijas spektri ietver trīs plašas joslas ar maksimumiem: 240, 446 un 710 nm. Novērotās joslas ir saistītas ar Ir^{4+} jonu klātbūtni cinka-irīdija oksīdu plānās kārtiņās ar dažādu irīdiju jonu koncentrāciju. Cinka-irīdija oksīda plāno kārtiņu absorbcijas spektri tuvajā infrasarkanā un infrasarkanā rajonos parāda divas platas joslas ar maksimumiem tuvu pie 1100 un 3330 nm. Parādīts, ka novērotās absorbcijas joslas ir saistītas ar trīsvērtīgiem irīdija joniem, kuri atrodas tetraedriskās un oktaedriskās pozīcijās. Pieaugot irīdija koncentrācijai, cinka-irīdija oksīda kārtiņās joslas intensitāte pie 1100 nm pieaug, sasniedzot maksimumu pie irīdija koncentrācijas 29%. Turpmāka Ir koncentrācijas palielināšana līdz 41% noved pie 3330 nm intensitātes joslas palielināšanās. Pie irīdija koncentrācijām 47-56% 1100 un 3330 nm joslu intensitāšu attiecība nemainās. Iegūtām Zn-Ir-O plānām kārtiņām pie zemām irīdija koncentrācijām ir normāla špineļa struktūra. Irīdija koncentrācijas palielināšana noved pie apgrieztās (inversās) špineļa struktūras veidošanās.

ABSORPTION PROPERTIES OF IRIIDIUM IONS IN ZINC-IRIDIUM OXIDE THIN FILMS

Vera Skvortsova, Martins Zubkins, Roberts Kalendarev, Georgijs Chikvaidze, Juris Purans
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The paper presents a study of iridium ions absorption spectra of zinc-iridium oxide thin films deposited by reactive DC magnetron sputtering with different iridium atomic concentrations in the films.

The samples containing iridium are transparent in visible region. With iridium concentration increase in the obtained films transparency of films decreases. The absorption spectra in the visible range contain three broad bands with maxima: 240, 446 and 710 nm. The observed bands belong to Ir^{4+} ions in zinc-iridium oxides thin films. The absorption spectra of zinc-iridium oxide thin films for different iridium ions concentration in near infrared and infrared regions exhibit two broad bands with maxima in the vicinity of 1100 nm and 3330 nm. It is shown, that observed bands are connected with trivalent iridium ions in octahedrally and tetrahedrally coordinated sites. With iridium concentration increase in zinc-iridium oxide thin films the intensity of the 1100 nm band increases, reaching a maximum at iridium concentration of 29 %. The further iridium concentration increase up to 41% leads to an increase in intensity of the band of 3330 nm. At iridium concentration from 47 to 56% the ratio of the intensities of the 1100 and 3330 nm bands does not change. The obtained Zn-Ir-O thin films have normal spinel structure at low iridium concentrations. Iridium concentration increase leads to the formation of the inverse spinel structure.

METĀLORGANISKAIS SVINA HALOGENĪDU PEROVSKĪTA SAULES ELEMENTS AR ORGANISKAJIEM LĀDIŅA TRANSPORTA SLĀNIEM

Anastasija Ivanova^{1,2}, Igors Kaulačs¹, Gunta Šlihta¹, Modris Roze², Andrej Tokmakov³

¹ *Fizikālās enerģētikas institūts*

² *Rīgas Tehniskā universitāte*

³ *Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Saules elements ar aktīvo laukumu 7 mm² izveidots uz ITO pārklāta stikla paliktņa, kā caurumu transporta un elektronus un eksitonus bloķējošo slāni izmantojot PEDOT:PSS 30-40 nm biezu kārtiņu, kurai pēc izkarsēšanas 145°C temperatūrā argona atmosfērā uznešts ar rotācijas metodi PbI₂ un PbCl₂ sajaukums no DMF un DMSO šķīdumiem pie 65°C ar rotācija ātrumu 6000 apgr/min; kārtiņai pēc žāvēšanas 70°C argona atmosfērā uzklāta CH₃NH₃I kārtiņa no 2-propanola šķīduma (40 mg/mL) ar rotācija metodi uz 65°C karsta paliktņa. Lai padziļinātu slāņu savstarpēju difūziju, slāņi karsēti pie 107°C 1 h gaisā un tad 1 h argona atmosfērā. Uz iegūtā perovskīta slāņa uznešts elektronus vadošais un caurumus bloķējošais PCBM slānis ar rotācijas metodi no DCB šķīduma. Pēc žāvēšanas 105°C argonā, paraugs ievietots vakuumā, kur uzneš 50 nm biezs C₆₀ un 60 nm Ag slāņi ar termisko sublimāciju vakuumā.

Saules elementa īsslēguma fotostrāvas ārējas kvantu efektivitātes (EQE) spektrālās atkarības 370-1000 nm intervālā, kā arī EQE atkarības no gaismas intensitātes un voltampēru atkarības samērītas šajā pat vakuumiekārtā pie vakuuma 5·10⁻⁷ mbar, nepārvietojot paraugu. Sniegta iegūto rezultātu analīze.

ORGANOMETAL MIXED HALIDE PEROVSKITE SOLAR CELL WITH ORGANIC CHARGE TRANSPORT LAYERS

Anastasia Ivanova^{1,2}, Igors Kaulach¹, Gunta Shlihta¹, Modris Roze², Andrey Tokmakov³

¹ *Institute of Physical Energetics*

² *Riga Technical University*

³ *Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

Solar cell samples with active area 7 mm² were built on ITO coated glass by interdiffusion method: patterned ITO layer was covered by 30-40 nm thick hole transport and electron blocking layer PEDOT:PSS and annealed at 145°C in argon atmosphere. This layer was covered by PbI₂ and PbCl₂ mixture dissolved in DMF and DMSO mixture by spin coating at 6000 rpm on 65°C hot spin-coater, dried at 70°C in argon and covered by CH₃NH₃I solution in 2-propanol (40 mg/mL) by spin coating at 6000 rpm at 65°C. To finish interdiffusion process cell was heated at 107°C in closed system for 1 h and additionally 1 h in argon. Obtained perovskite layer was covered by PCBM layer at a rate 2000 rpm from DCB solution and annealed at 105°C for 1 h in argon; then followed 50 nm thick C₆₀ and 60 nm thick Ag layers by thermal evaporation in vacuum 10⁻⁶ mbar.

The short circuit photocurrent external quantum efficiency (EQE) spectral dependencies, EQE dependencies on light intensity in 370-1000 nm region and photocurrent EQE dependencies on applied voltage have been investigated in situ in vacuum 5·10⁻⁷ mbar without breaking the vacuum and moving the cell. Obtained results will be discussed.

A		F	
Alksnis J.....	58	Fedotovs A.....	12
Annus P.....	31	G	
Anspoks A.....	38	Gabrusenoks J.....	63, 64, 75
Antohe S.....	20	Gerca L.	55
Antonova M.	39, 66	Gopejenko A.....	41
Antuzevičs A.....	12, 13	Grabis J.	9
Augustovs P.	44	Graening T.	38
Auziņš K.	72	Grants R.	15, 56
Avotiņa L.	19, 20, 23	Grigorescu C.....	20
Āzens A.....	75	Grigorjeva L.....	14, 52, 53, 54
B		Grīnberga L.....	26, 29, 30, 73
Baižumanovs M.	56	Gruduls A.....	70
Bajārs G.	60, 61, 62, 63, 64	Grūbe J.....	10, 11, 51
Balodis J.....	63, 64	Gržibovskis R.	45, 46
Baumane L.	24	Gvardina I.	33
Baumanis G.....	72	H	
Bekris N.	23	Haļitovs M.	20, 23
Berķis R.	70	Hodakovska J.....	28, 68
Bērziņa B.	9	Hosono H.	11
Bērziņš D.	12	I	
Bērziņš J.....	22, 57, 58	Ignatāns R.	14, 39, 65
Bikova K.	61	Ivanova A.....	77
Birks Ē.	39	J	
Bočarovs D.....	42	Jankovska P.	9
Borodin V.A.....	41	Jansons J.	6, 50
C		JET contributors.....	19, 23
Cābulis U.	67	Jonāne I.	37
Cintiņš A.	38	K	
Cvetkovs A.....	65	Kajihara K.....	11
Česnokovs A.	42	Kalendarevs R.....	75, 76
Čikvaidze G.	76	Kampars V.	55
D		Kaprāns K.	62
Dimanta I.	26, 27, 28	Kaulačs I.	77
Dimants J.	27	Kiseļova O.	65
Dimza V.....	54, 66	Kleperis J.....	26, 27, 28, 29, 30, 33, 34, 60, 62, 68, 69, 70, 71, 72, 73
Dindune A.....	59	Klismeta K.	47
Doķe G.	10	Knite M.	67
Dolgā A.	71	Knitter R.	24
Dorondo A.	62	Knoks A.	30, 73
Dravniece A.	55	Kokars V.	44
Drunka R.	14	Kolb M.....	24
Dumbrājs O.....	21	Korsaks V.	9
Dunce M.....	39	Kotomins J.....	40, 41, 74
E			
Elsts E.	50, 51		

Krasta T.....	22, 57
Krieķe G.....	7, 8, 10, 50, 51
Kristiņš A.	31, 32, 33
Kučinskis G.....	60, 61, 62
Kundziņa L.....	66
Kundziņš K.	39, 50, 55, 65, 66, 75
Kundziņš M.....	39, 66
Kuzmins A.	6, 36
Ķemere M.	12, 51
Ķizāne G.	19, 20, 23, 24

L

Land R.....	31
Lazdiņš K.	36
Lācis K.	73
Lesničenoks P.	26, 29, 33, 71, 72
Liepiņa I.	63, 64
Likonen J.....	23
Lisovskis O.	42
Līviņš M.....	39, 66
Lukoševičs I.	71
Lungu C.P.	20
Lungu M.....	20
Lūsis A.	63, 64

M

Manika I.	15
Marcu A.	20
Mastrikovs J.....	41, 74
Mateuss J.....	62
Melderis J.....	33
Millers D.	14, 52, 53, 54
Min M.	31
Möslang A.....	41
Muižnieks I.	28

N

Nikolajeva V.	28
--------------------	----

O

Orliukas A.....	59
Osis M.....	7
Ozoliņa Z.	19
Ozols A.	44

P

Pajuste E.....	19, 20
Pentjušs Ē.....	63, 64
Perveņeckā J.....	46
Piskunovs S.....	40, 42
Platonenko A.....	40

Plaude A.....	39, 66
Porosnicu C.....	20
Pudžs K.....	48
Purāns J.....	13, 38, 75, 76

R

Riekstiņa D.	57, 58
Rogulis U.	12, 13, 50, 51, 65
Ronis J.	59
Roze M.....	77
Rublāns M.....	63
Rudzītis J.	58
Rutkis M.	48, 55

S

Saharovs D.....	44
Serga V.	65
Siliņš A.	11
Simonova Ļ.....	22
Skrypnik O.....	57
Skuja L.....	11
Skvorcova V.	76
Sloka B.....	27
Sokolovs M.....	74
Sperga J.....	51
Springis M.	7, 8, 10
Stan-Sion C.....	23
Stiebra L.....	67
Straumēns J.....	33
Supe A.	24
Šarakovskis A.	7, 8, 10, 50
Šlihta G.	77
Šmite R.	70
Šmits K.	6, 14, 50, 52, 53, 54
Šmits R.....	70
Šternbergs A.	18
Štrāls K.	8
Švinka R.....	57

T

Teteris J.....	47
Timošenko J.....	37
Tjarve J.	48
Tokmakov A.	77
Trinklere L.	9
Truhins A.....	6

V

Vaivods R.	73
Valdniece D.	59
Valtenbergs O.	24

Valucka S.	28
Vanags M.	34, 69
Vanks M.	14, 54
Vembris A.	45, 46, 48
Venckutė V.	59
Vēveris O.	58
Vilnis K.	75
Vladimirov P.V.	41
Volkovs A.	34

W

Widdowson A.	19
-------------------	----

Z

Zabels R.	15, 56
Zariņš A.	24
Zariņš E.	44
Zemītis J.	33, 69, 72
Zolotarjovs A.	14, 50, 52, 53
Zubkins M.	75, 76
Žukovskis J.	40, 41, 42