



*Latvijas Zinātņu akadēmija*

# EDGARA SILIŅA VĀRDBALVA 2024

## DR. HABIL. PHYS. JEVGĒŅIJS KOTOMINS

LZA Edgara Siliņa balva fizikā 2024. gadā piešķirta LZA īstenajam loceklim **Jevgēņijam Kotominam** (LU Cietvielu fizikas institūts) par darbu kopu "Nanomateriālu datormodelēšana efektīvai ūdeņraža ražošanai".

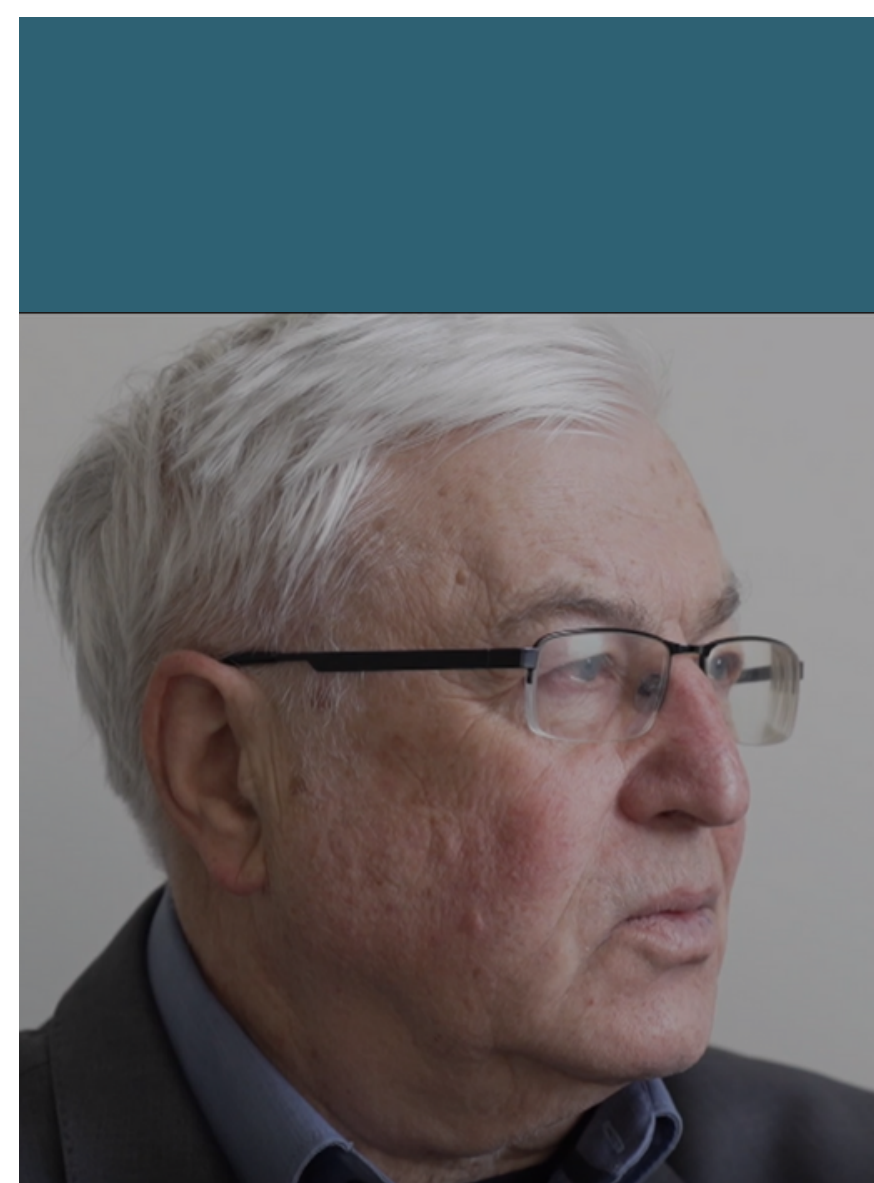
LU Cietvielu fizikas institūta vadošais pētnieks Dr. Jevgēņijs Kotomins: "Manas pašreizējās pētnieciskās intereses ir vērstas uz jaunu perspektīvo materiālu lielā mēroga datormodelēšanu no pirmajiem principiem: fotovoltaika (halogenīdu perovskīti), kodolsintēzes reaktori (radiācijas izturīgi optiskie logi), kurināmā šunas (ķīmiskās enerģijas pārveidošana par elektrisko) un efektīva, videi draudzīga ūdeņraža ražošana.

Darbu kopā ietvertais rakstu cikls apkopo mūsu pēdējo 3 gadu galvenos sasniegumus ūdeņraža ražošanā no saules gaismas stimulētās ūdens šķelšanas uz perovskīta nanodaļiņām.

Šie pētījumi tika veikti trīs Eiropas projektu ietvaros:

- FLAG-ERA JTC project To2Dox (Transferable two-dimensional correlated oxide layers) Pārvietojamie divdimensionālie slāņi no pārejas metālu oksīdiem ar stipru elektronu korelāciju;
- EC COST Action OC-2018-2-23544 (Computational materials sciences for efficient water splitting with nanocrystals from abundant elements) Skaitļošanas materiālu zinātne efektīvai ūdens šķelšanai ar nanokristāliem;
- M-ERA-NET project SunToChem (Engineering of perovskite photocatalysts for sunlight-driven hydrogen evolution from water splitting) Perovskīta fotokatalizatori ūdeņraža iegūšanai no saules gaismas izraisītās ūdens šķelšanas.

Kopš rūpnieciskās revolūcijas globālais pieprasījums pēc enerģijas ir pieaudzis 26 reizes, un fosilais kurināmais veido vairāk nekā 80% no kopējā enerģijas avota. Tomēr, tā kā cilvēki izmanto fosilā kurināmā spēkstacijas, lai veiktu visas darbības, pasaulē CO<sub>2</sub> ražošana ir uzkrājusies līdz 36 Gt, radot būtisku ietekmi gan uz vidi, gan uz cilvēku veselību. Globālā sasilšana kļūst par vienu no šī gadsimta aktuālākajām problēmām, un ir nepieciešamas efektīvas tīras enerģijas ražošanas alternatīvas.



Ūdeņradis ir daudzsološs primārās enerģijas nesējs tā pārpilnības un augstā enerģijas blīvuma dēļ. Fotokatalītiskā ūdens šķelšana, kas izmanto saules enerģiju, ir piesaistījusi ievērojamu uzmanību. Pētījumi ir parādījuši, ka vairākiem materiāliem uz metāla oksīda bāzes, piemēram,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{MoO}_3$  un perovskīti ( $\text{SrTiO}_3$ ), ir ievērojams potenciāls fotokatalītiskā ūdens šķelšanas jomā, pateicoties to augstajai stabilitātei, izturībai pret fotokoroziju un regulējamu struktūru, kas ļauj precīzi mainīt virsmas morfoloģiju un katalizatora aktīvās vietas.

Tomēr, neskatoties uz ūdens sadalīšanas reakcijai atbilstošām aizliegtās zonas malu pozīcijām, daudziem no šiem metālu oksīdiem ir platas aizliegtās zonas, un līdz ar to tie galvenokārt absorbē saules spektra tikai ultravioletajā reģionā. Tipiski piemēri ir metāla titanāti, tostarp  $\text{TiO}_2$  un  $\text{SrTiO}_3$ , ar aizliegtās zonas platumu aptuveni 3.2 eV. Turklāt fotokatalītiskā efektivitāte samazinājās, pateicoties fotoinducēto elektronu caurumu pāru ātrai rekombinācijai. Ir izstrādātas vairākas stratēģijas, pirmkārt, lai paplašinātu saules gaismas izmantošanu redzamajā diapazonā un, otrkārt, lai uzlabotu lādiņa nesēju atdalīšanu.

Izmantojot jaunākās kvantu ķīmijas metodes,  $\text{SrTiO}_3$  nanodaļiņu skaitliskās modelēšanas sēriju [1-8], mēs noteicām optimālās ūdens molekulu sadalīšanās pozīcijas uz dažādām slīpajām virsmām, pētījām ūdeņraža veidošanās kinētiku un termodinamiku uz nanodaļiņām. Mēs paredzējām, ka N un Al piemaisījumi nanodaļiņās varētu ievērojami uzlabot ūdeņraža veidošanos. Atomistiskie aprēķini liecina, ka šie piemaisījumi aiztur caurumus un ar to novērš elektronu-caurumu rekombināciju.

Mūsu prognozes apstiprināja M-ERA-NET projekta partneri: ūdeņraža ražošanas pieaugums uz Slovēnijā audzētajām nanodaļiņām tika demonstrēts Taivānas Universitātē. Tādējādi, starptautiskās sadarbības rezultātā tika izstrādāti jauni efektīvi nanomateriāli, kuriem ir liels industriālais potenciāls. Rezultāti tika publicēti augstā ranga Open Access starptautiskajos žurnālos.”

Balva iedibināta 1998. gadā. Edgars Siliņš (1927–1998) bija viens no Latvijas izcilākajiem fiziķiem, LZA īstenais loceklis, profesors, Dr.habil.phys., Fizikālās enerģētikas institūta Organiskās cietvielu fizikas un molekulārās elektronikas laboratorijas vadītājs. Kopā ar Rīgas vadošajiem ķيميķiem izveidojis un attīstījis jaunu virzienu zinātnē - organisko cietvielu fiziku. Uzrakstījis vairāk nekā 170 zinātnisku darbu, tai skaitā 6 Latvijā un ārvalstīs izdotas monogrāfijas, no kurām "Organic Molecular Crystals. Their Electronic States" ir visbiežāk citētā Latvijas fiziķu grāmata pasaulē. Mūža pēdējos gadus veltījis arī pasaules izziņas filozofiskiem pamatprincipiem, 1998. gada pavasarī pabeidza fundamentālu monogrāfiju "Lielo patiesību meklējumi. Esejas par ideju un paradigmu vēsturi".