

Lantanīdu jonu luminescences spektru modelēšana oksīdu materiālos

Katrīna Laganovska

Tika veikts literatūras apskats par aktuālajiem ar lantanīdiem aktivētu metālu oksīdu optisko īpašību pētījumiem. Veikti sistemātiski mēģinājumi veikt teorētiskus aprēķinus ar programmu LUMPAC, tomēr secināts, ka programmas aprakstā minētais atslēgas vārds “solids” attiecināms vairāk uz organiskām struktūrām un tā nav līdz galam piemērota metāla oksīdu pētīšanai. Arī literatūrā netika atrasta neviena publikācija par neorganisku cietvielu luminescenci, kurā būtu atsauce uz LUMPAC vai ORCA. Papildus ierobežojumi arī ir ģeometrijas optimizācija – maza izmēra paraugi (5x5x5 hafnija atomi) nav stabili un nesaglabā kristālisku struktūru pēc ģeometrijas optimizācijas. Pietiekami lielu paraugu enerģijas līmeņu aprēķināšana savukārt aizņem ļoti daudz laika. Piemēram, struktūras ar 8 Hf atomiem un 1 Eu enerģijas līmeņu aprēķināšanai uz mazjaudīga datora aizņem aptuveni nedēļu, kas padara *trial and error* pieeju kļūdu izslēgšanai gandrīz neiespējamu. Mazas sistēmas bez ģeometrijas optimizācijas nesniedza korektus rezultātus, līdz ar to, spektru modelēšana tika atlikta laika ierobežojuma dēļ un pētījumiem tiek izmantota eksperimentāla pieeja.

Eiropija spektra sīkstruktūras un spektrālā sadalījuma pētīšanai, ar Sol-gel metodi tika sintezēti hafnija oksīda paraugi ar trīs dažādām eiropija koncentrācijām: 5%Eu, 10%Eu, 5%Eu5%Nb. Paraugi tika izkarsēti trīs dažādās temperatūrās: 800C, 1000C un 1200C, mainot gan nanodaļiņu izmērus, gan kristālisko struktūru. Pēc paraugu iegūšanas tikai veikta paraugu fotoluminescences mērījumi izmantojot laboratorijā esošo Andor spektroskopu un 266nm lāzeri luminescences ierosināšanai. Paraugam, kurš satur niobiju novērota desmitkārt lielāka luminescences intensitāte nekā abiem paraugiem bez niobija. Pie augstām karsēšanas temperatūrām paraugam ar 5%Eu novērota strauja luminescences intensitātes samazināšanās un kristāliskās struktūras izmaiņas no kubiskas struktūras uz kubisku ar monoklīniem piejaukumiem. Tika veikti Termostimulētās luminescences (TSL) mērījumi diviem no paraugiem – 5%Eu un 5%Eu5%Nb (1200C). TSL intensitāte paraugam bez niobija bija ievērojami lielāka, kas liecina par skābekļa vakanču skaita samazināšanos ar niobiju dopētos paraugos.

Saistībā ar teorētisko aprēķinu daļas neveiksmīgajiem rezultātiem, pētījums ir iekavējies un publikācija par realizētajiem pētāmo materiālu luminescences mērījumu rezultātiem – eiropija sīkstruktūras izpēti, vēl tiek gatavota iesniegšanai.