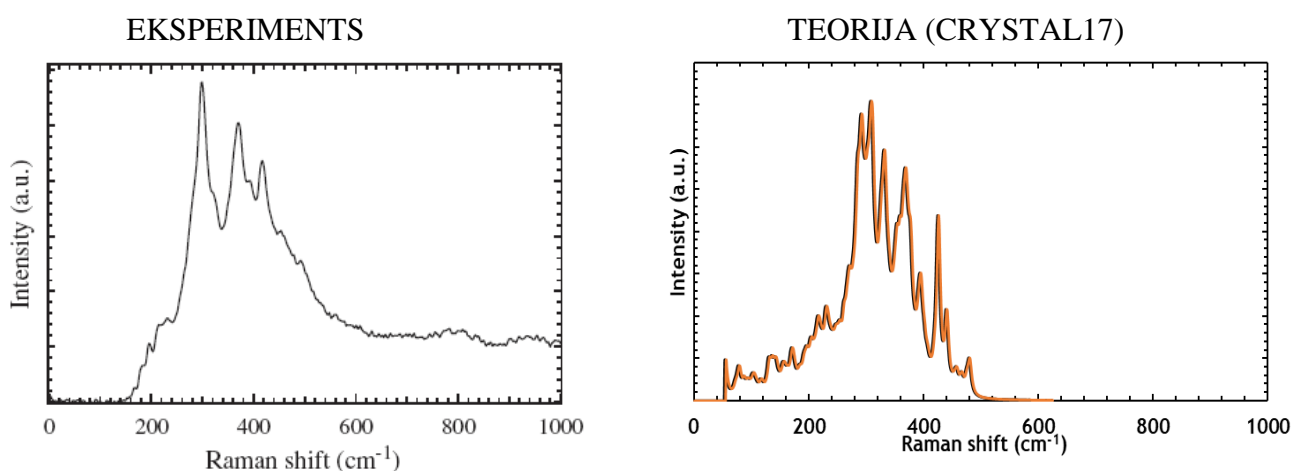


Ab initio F-centru modelēšana tīrā un ar Ce^{3+} aktivētā $\beta\text{-NaYF}_4$ kristālā

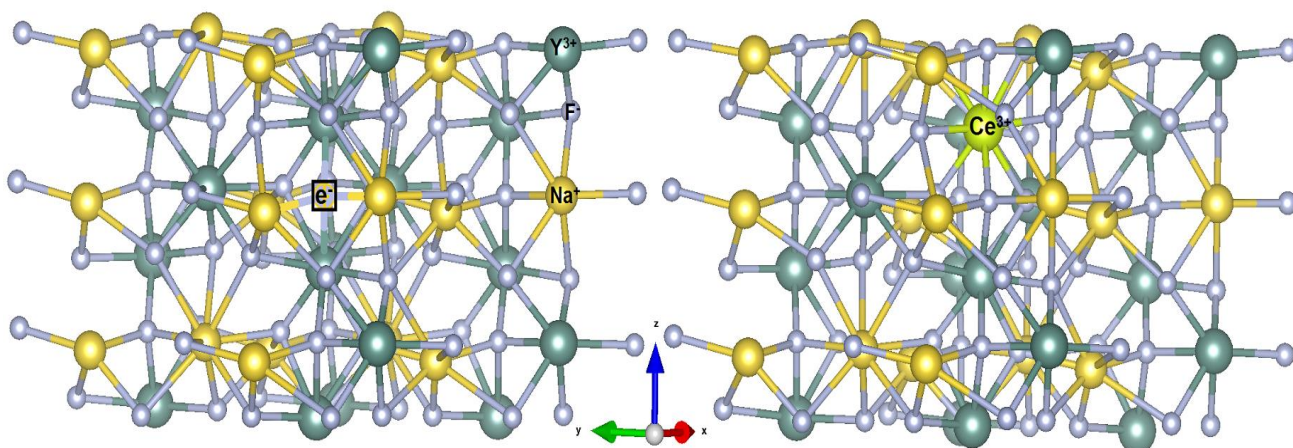
Aleksandrs Platoņenko

Heksagonāls (β -fāze) NaYF_4 aktivēts ar trīsvalentiem retzemju joniem ir viens no populārākiem un perspektīvākiem materiāliem ar augšup-pārveidotās (AP) luminiscences īpašībām. Tas arī tiek uzskatīts kā perspektīvs scintilatoru materiāls augstas enerģijas starojuma detektēšanai un pielietošanai medicīnā. Līdz šim laikam $\beta\text{-NaYF}_4$ un defekti tajā netika plaši pētīti ar *ab initio* metodēm materiāla nesakārtotas struktūras dēļ.

Pirmā posmā tika noteikta NaYF_4 struktūra ar zemāku enerģiju, tās īpašības (elektroniskā struktūra, fononu modas, radiāla sadalījuma funkcijas) tika salīdzinātas ar pieejamiem eksperimentāliem datiem.



Otrā projekta posmā tika salīdzinātas aizvietotāju un F-centru veidošanas enerģijas un elektroniskā struktūra atkarība no defekta vai aizvietotāja pozīcijas. Tā kā šai struktūrai piemīt nesakārtotība, itrija atomi visās *1a* un *2d* pozīcijās nav identiski. Analizējot defektu elektronisko struktūru un veidošanas enerģijas tika secināts, kā Ce^{3+} enerģētiski izdevīgāk aizvietot itriju *2d* pozīcijās, bet aizvietošana *1a* pozīcijās ir tikai par $\sim 0,1$ eV mazāk izdevīgāka.



Šis NaYF_4 modelis tika arī izmantots, lai modelētu citus aizvietotājus – Gd^{3+} un Eu^{3+} . Atšķirībā no Ce^{3+} joniem, Gd^{3+} un Eu^{3+} var simulēt ar dažādām f-elektronu konfigurācijām, tādā veidā mēģinot nonākt pie ierosināta stāvokļa modelēšanas.