

STRESZCZENIE

Badania dotyczyły materiałów o ogólnym wzorze $M_3RE_2(BO_3)_4:Ln^{3+}$ (gdzie: $M = Ca, Sr, Ba$; $RE = Y, La, Gd$ oraz $Ln^{3+} = Eu^{3+}, Tb^{3+}, Dy^{3+}$). Materiały tego typu były otrzymywane za pomocą metody zol-żelowej Pechini'ego. Otrzymane luminofory mogą być zastosowane w źródłach światła opartych o LED.

Kolejna część pracy była poświęcona badaniom obliczeniowym wpływu domieszkowania na budowę krystaliczną materiału-matrycy, wpływu budowy krystalicznej matrycy na procesy przeniesienia energii oraz na tworzenie się aglomeratów powodowanych jonami domieszki.

Wyniki obliczeń pół-empirycznych oraz DFT wykazały, że zwiększenie ilości domieszki Tb^{3+} w układach CeF_3 i $Sr_3La_2(BO_3)_4$ skutkowało zmniejszeniem wymiarów komórki.

Nowe podejście do obliczenia szybkości przeniesienia energii pomiędzy jonami Ln^{3+} w ciele stałym (z uwzględnieniem wielu możliwych odległości Ln-Ln) zostało zastosowane do analizy układu $YVO_4:Yb^{3+},Er^{3+}$, wykazującego zjawisko upkonwersji. Opisywana metoda modelowania może być zastosowana też dla innych układów wykazujących przeniesienie energii.

Badania uwzględniały również analizę (za pomocą obliczeń DFT) możliwości tworzenia klasterów jonów domieszki w $YVO_4:Eu^{3+}$. Obliczenie wskazuje, że geometria układu odpowiadająca bardziej skupionemu ułożeniu jonów domieszki jest bardziej preferowana termodynamicznie, a więc możliwa jest tendencja do tworzenia aglomeratów jonów domieszki.