

Projekt NCN OPUS16 nr UMO-2018/31/B/ST4/00924

„Struktura energetyczna i własności spektroskopowe jonów $3d^3$ (Cr^{3+} , Mn^{4+}) w matrycach krystalicznych w warunkach ekstremalnych” (Energy structure and spectroscopic properties of $3d^3$ ions (Cr^{3+} , Mn^{4+}) in crystalline matrices under extreme conditions), projekt realizowany w konsorcjum,

kierownik projektu z ramienia UG: dr hab. Sebastian Mahlik, prof. UG,

okres realizacji: 18.06.2019-17.06.2022,

kwota dofinansowania UG: 782 400 PLN,

osoby realizujące projekt: dr hab. Sebastian Mahlik, dr Dawid Jankowski, Mikołaj Kamiński

Celem projektu jest poznanie czynników determinujących własności emisyjne jonów Mn^{4+} lub Cr^{3+} wbudowanych w różnych grupach związków nieorganicznych (kryształy). By poznać te zależności będą przeprowadzone zostaną szczegółowe badania (zarówno eksperymentalne, jak i teoretyczne) materiałów krystalicznych, w których niewielka część - około 1-2% - dodatkowo naładowanych jonów matrycy jest zastępowana jonami Mn^{4+} lub Cr^{3+} . Domieszkowane materiały, takie jak Cs_2GeF_6 , $LaAlO_3$, $ZnGa_2O_4$ itp. mają ogromne znaczenie dla różnorodnych zastosowań optycznych, w szczególności jako źródła światła i termometry optyczne.

W ostatnich latach napotkano kilka problemów w rozwoju technologii diod świecących białym światłem (LED) o ciepłej barwie. Większość nowoczesnych białych diod LED opiera się na wspólnym świeceniu niebieskiej diody LED i żółtego luminoforu. Niestety taka kombinacja wytwarza "zimne" białe światło ze względu na niedostatek światła czerwonego w emisji luminoforu. Dlatego w laboratoriach na całym świecie prowadzone są intensywne poszukiwania efektywnego luminoforu emitującego czerwony kolor. Krystaliczne matryce w formie proszków, domieszkowane jonami Mn^{4+} są bardzo obiecującymi luminoforami pozwalającymi na rozwiązanie tego trudnego problemu. W proponowanym podejściu planujemy syntezę dużych grup materiałów o zbliżonej strukturze domieszkowanych jonami Mn^{4+} , takich jak perowskity, podwójne perowskity, fluorki, oksyfluorki itp. o różnym składzie kationowym oraz szczegółowe badanie własności emisyjnych w funkcji temperatury i ciśnienia w celu znalezienia materiałów o największej wydajności świecenia.

Termometria optyczna jest to szybko rozwijający się obszar, który jest bardzo ważny dla zastosowań w układach biologicznych oraz w medycynie, ponieważ jest nieinwazyjną metodą, która może być stosowana do określania temperatury nawet wewnątrz żywych organizmów. Technika ta oparta jest na zmianach wzajemnej relacji pomiędzy charakterystycznymi pikami emisyjnymi lub na zmianach stanów wzbudzenia w zależności od temperatury. Jony Cr^{3+} są doskonałymi kandydatami dla takich sond termometrycznych, ponieważ ich widma emisyjne po umieszczeniu w ciele stałym (na skutek oddziaływania z wewnętrznym polem krystalicznym) składają się z kombinacji przejść spinowo dozwolonych lub zabronionych, których czasy życia silnie zależą od temperatury. W tym celu planujemy zbadać mechanizmy, które zmieniają intensywność promieniowania podczas tych przejść i granice zmienności intensywności, zaś badania te będą obejmować syntezę, pomiary własności spektralnych w warunkach normalnych oraz przy wysokim ciśnieniu. Obliczenia oparte na funkcjonale gęstości umożliwią poznanie relacji pomiędzy strukturą a właściwościami emisyjnymi tych związków. Efektem realizacji projektu będzie usystematyzowana wiedza na temat interakcji jonów domieszek Mn^{4+} lub Cr^{3+} z matrycą, jako luminoforów i materiałów termometrycznych.