

## Investigação via teoria de campo cristalino, do mecanismo de luminescência persistente

Gabriela S. Dalcin (IC)<sup>1</sup>, Heveson L.L. Matos (PQ)<sup>1\*</sup>

Universidade Federal do Oeste da Bahia, <sup>1</sup>Centro Multidisciplinar de Luís Eduardo Magalhães, CEP 47850-000, Luís Eduardo Magalhães, Bahia, Brasil.

\*E-mail: [heveson.matos@ufob.edu.br](mailto:heveson.matos@ufob.edu.br)

Palavras chave: campo cristalino, lantanídeos, estrutura local.

### Abstract

*In this work, we developed a procedure to determine the local structure of the ion in a highly symmetrical crystal. The local structure of the  $\text{Eu}^{3+}$  in  $\text{XMgF}_3$  ( $X = \text{Rb}, \text{Cs}, \text{K}$ ) was obtained using the Crystalline Field Theory, together with Simple Overlap Model and the Method of Nearest Neighbors.*

### Introdução

Os elementos terras raras têm desencadeado inúmeros estudos devido à sua alta eficiência quântica e propriedades luminescentes. Na área da física, seu interesse está diretamente voltado para aplicações em ciências e tecnologias. Ainda hoje, não são conhecidos substitutos que proporcionem o mesmo desempenho desses materiais [1].

### Material e Métodos

Foi feito um estudo teórico utilizando a teoria do campo cristalino através do SOM e do MENN. Os softwares MATHCAD<sup>TM</sup> e Mercury 1.4.2 também foram usados.

### Resultados e Discussão

A distância interatômica entre Eu-F no sítio luminescente  $\text{Eu}^{3+}$  foi calculada utilizando o desdobramento de energia  $\Delta E = 350,7 \text{ cm}^{-1}$  [2]. Feito isto, foram previstas as distâncias entre Eu-F usando quatro cargas  $gEu$  diferentes com o recobrimento em um intervalo de  $0,05 \leq \rho \leq 0,12$  e uma varredura com intervalo de carga entre  $0,3 \leq g_j \leq 0,9$ , obtendo previsões para a distância de  $2,366 \text{ \AA}$  [3]. As melhores previsões de distâncias para as cargas  $gEu = 3$  e  $gEu = 3,5$  encontram-se entre os recobrimentos  $0,9 \leq \rho \leq 0,11$ , enquanto que, para a carga  $gEu = 4$  as melhores previsões estão situadas entre  $0,8 \leq \rho \leq 0,10$  e para  $gEu = 4,5$  entre  $0,8 \leq \rho \leq 0,9$ . Foi constatado que a carga do európio  $gEu = 4$  é a mais apropriada para as previsões de distância

### Conclusões

Neste trabalho, portanto, foi realizado um estudo da estrutura local do íon opticamente ativo em um cristal de alta simetria. Diante disso, foram feitas previsões para a distância interatômica entre Eu-F em uma família  $\text{XMgF}_3$  e constatado que as previsões estão em

bom acordo com dados experimentais disponíveis na literatura.

### Agradecimentos

Ao professor Heveson L. L. de Matos e a UFOB.

### Referências

- [1] M.T. Santos, Usos e aplicações de Terras Raras no Brasil: 2012-2030, Centro de Gestão e Estudos Estratégicos, Brasília, (2013)
- [2] C. Gaedtke, G.V.M. Williams, S. Janssens, S. Raymond, D. Clarke, Rad. Measur. 56 (2013) 187.
- [3] R.D. Shannon, Acta Crystall. A 32 (1976) 751.