

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>11</b>
2.1	Freies Ion . . . . .	12
2.1.1	Nephelauxetischer Effekt . . . . .	14
2.2	Ion im Kristallfeld . . . . .	16
2.2.1	Korrelationskristallfeld . . . . .	19
2.2.2	Konfigurationswechselwirkung . . . . .	21
2.2.3	Superpositionsmodell . . . . .	22
<b>3</b>	<b>Experimentelles</b>	<b>25</b>
3.1	Herstellung der LnOX-Kristalle . . . . .	25
3.2	Diamantstempeltechnik . . . . .	26
3.3	Meßaufbau . . . . .	28
3.3.1	Der Optikmeßplatz . . . . .	28
3.3.2	Röntgenbeugung . . . . .	31
3.3.3	EXAFS . . . . .	31
3.4	Druckbestimmung . . . . .	32
<b>4</b>	<b>Strukturelle Untersuchungen an LnOX-Systemen</b>	<b>35</b>
4.1	Der PbFCl-Typ . . . . .	35

4.2	LnOX-Systeme unter Druck . . . . .	41
4.3	EXAFS an LnOCl-Verbindungen . . . . .	48
<b>5</b>	<b>Optische Untersuchungen an Pr<sup>3+</sup> in LnOCl-Kristallen unter Druck</b>	<b>53</b>
5.1	Anregungsprozesse . . . . .	53
5.2	Pr <sup>3+</sup> :LaOCl . . . . .	56
5.2.1	Fluoreszenzspektren . . . . .	57
5.2.2	Anregungsspektren . . . . .	79
5.3	Pr <sup>3+</sup> :GdOCl . . . . .	90
5.3.1	Fluoreszenzspektren . . . . .	90
5.3.2	Anregungsspektren . . . . .	93
5.4	Pr <sup>3+</sup> :PrOCl . . . . .	96
5.4.1	Absorptionsspektren . . . . .	97
5.4.2	Fluoreszenzspektren . . . . .	108
5.5	Zusätzliche Linien in den optischen Spektren . . . . .	112
<b>6</b>	<b>Auswertung und Diskussion der Meßergebnisse</b>	<b>115</b>
6.1	Freie-Ionen-Parameter . . . . .	116
6.2	Nephelauxetischer Effekt . . . . .	119
6.3	Kristallfeldparameter . . . . .	123
6.4	Drehimpulskorreliertes Kristallfeld (LCCF) . . . . .	129
6.5	Konfigurationswechselwirkung . . . . .	132
6.6	Superpositionsmodell . . . . .	135
6.6.1	Lokale Verzerrungen . . . . .	136
6.6.2	Intrinsische Kristallfeldparameter . . . . .	139
6.6.3	Ab-initio-Rechnungen . . . . .	144

<b>7 Zusammenfassung</b>	<b>153</b>
<b>A Linienlagen der Übergänge von Pr<sup>3+</sup>:LnOCl</b>	<b>157</b>
A.1 Pr <sup>3+</sup> :LaOCl . . . . .	158
A.1.1 Fluoreszenzspektren . . . . .	158
A.1.2 Anregungsspektren . . . . .	165
A.2 Pr <sup>3+</sup> :GdOCl . . . . .	167
A.2.1 Fluoreszenzspektren . . . . .	167
A.2.2 Anregungsspektren . . . . .	173
A.3 Pr <sup>3+</sup> :PrOCl . . . . .	174
A.3.1 Absorptionsspektren . . . . .	174
A.3.2 Fluoreszenzspektren . . . . .	177
<b>B Energien der Kristallfeldzustände von Pr<sup>3+</sup>:LnOCl</b>	<b>183</b>
<b>C</b>	<b>187</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>189</b>