

Einbau der Seltenen Erden in Aluminate und Borate
Synthese, Charakterisierung und Anwendung der Basisstrukturen
lumineszierender Verbindungen

Dissertation
zur Erlangung des
Doktorgrades der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

der

Naturwissenschaftlich Fakultät III
Agrar- und Ernährungswissenschaften,
Geowissenschaften und Informatik

der Martin-Luther-Universität Halle -Wittenberg

vorgelegt von

von Frau Chimednorov Otgonbayar
geb. am 27.02.1990 in Ulaanbaatar

Gutachter:

1. Prof. Dr. Dr. Herbert Pöllmann
2. Prof. Dr. Harald Justnes

Tag der Verteidigung: 23.07.2021

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	I
Eidesstattliche Erklärung	III
Danksagung	IV
Nomenklatur und Abkürzungen	V
Kurzzusammenfassung	VI
Abstract	VII
1. Einleitung	1
1.1. Einführung.....	1
1.2. Aufgabenstellung.....	4
2. Grundlagen und Kenntnisstand	5
2.1. Lumineszenz.....	5
2.2. Leuchtstoffe.....	6
2.3. Seltene Erden und ihre spektralen Eigenschaften.....	8
2.3.1. Sm ³⁺ -Lumineszenz (4f ⁶).....	13
2.3.2. Dy ³⁺ -Lumineszenz (4f ⁹).....	15
2.3.3. Eu ³⁺ -Lumineszenz (4f ⁶).....	16
3. Experimentelle Methoden	18
3.1. Röntgenpulverdiffraktometrie (PXRD).....	18
3.2. Fourier-Transform-Infrarot-Spektroskopie (FTIR).....	19
3.3. Fluoreszenzspektroskopie.....	19
3.4. Rasterelektronenmikroskopie.....	20
4. Synthesemethode	21
4.1. Festkörpermethode.....	21
4.2. Pechini-Methode.....	24
4.3. Verwendete Chemikalien.....	28
5. Ergebnisse und Diskussion	29
5.1. Erdalkali-Aluminate	31
5.1.1. Einleitung.....	31
5.1.2. Synthese und Charakterisierung von Erdalkali-Aluminaten.....	32
5.1.3. Sm ³⁺ -Lumineszenz in MA ₂ O ₄ (M = Ca, Sr, Ba).....	37
5.1.4. Dy ³⁺ -Lumineszenz in MA ₂ O ₄ (M = Ca, Sr, Ba).....	40
5.1.5. Zusammenfassung und Diskussion.....	44

5.2. Erdalkali-Borate	47
5.2.1. Einleitung.....	47
5.2.2. Synthese und Charakterisierung von Erdalkali-Boraten.....	48
5.2.3. Sm ³⁺ -Lumineszenz in MB ₂ O ₄ (M = Ca, Sr, Ba).....	54
5.2.4. Dy ³⁺ -Lumineszenz in MB ₂ O ₄ (M = Ca, Sr, Ba).....	57
5.2.5. Zusammenfassung und Diskussion.....	59
5.3. Erdalkali-Seltenerd-Oxide	61
5.3.1. Einleitung.....	61
5.3.2. Synthese und Charakterisierung von Erdalkali-Seltenerd-Oxiden.....	62
5.3.3. Sm ³⁺ -Lumineszenz in SrEu ₂ O ₄ und BaEu ₂ O ₄	73
5.3.4. Dy ³⁺ -Lumineszenz in SrEu ₂ O ₄ und BaEu ₂ O ₄	76
5.3.5. Zusammenfassung und Diskussion.....	77
5.4. Einbau von Europium in SrAl₂O₄ und SrB₂O₄	81
5.4.1. Einleitung.....	81
5.4.2. Syntheseriehe SrEu _x Al _{2-x} O ₄ (0 ≤ x ≤ 2).....	82
5.4.3. Syntheseriehe SrEu _x B _{2-x} O ₄ (0 ≤ x ≤ 2).....	85
5.4.4. Zusammenfassung und Diskussion.....	88
5.5. Erdalkali-Seltenerd-Aluminate	89
5.5.1. Einleitung.....	89
5.5.2. Synthese und Charakterisierung von Erdalkali-Seltenerd-Aluminaten.....	90
5.5.3. Sm ³⁺ -Lumineszenz in CaEuAlO ₄ und SrEuAlO ₄	99
5.5.4. Dy ³⁺ -Lumineszenz in CaEuAlO ₄ und SrEuAlO ₄	102
5.5.5. Zusammenfassung und Diskussion.....	103
5.6. Erdalkali-Seltenerd-Borate	107
5.6.1. Einleitung.....	107
5.6.2. Synthese und Charakterisierung von Erdalkali-Seltenerd-Boraten.....	108
5.6.3. Sm ³⁺ -Lumineszenz in M ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ (M = Ca, Sr, Ba).....	116
5.6.4. Dy ³⁺ -Lumineszenz in M ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ (M = Ca, Sr, Ba).....	119
5.6.5. Zusammenfassung und Diskussion.....	121
6. Zusammenfassung und Ausblick	124
Literaturverzeichnis	130
Anhang	143
Abbildungsverzeichnis	196
Tabellenverzeichnis	201
Lebenslauf	203

Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die Arbeit selbstständig und ohne fremde Hilfe verfasst, keine anderen als die von mir angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt und die den benutzten Werken wörtlich oder inhaltlich entnommen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Datum

Unterschrift

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde im Zeitraum von März 2016 bis Oktober 2020 am Institut für Geowissenschaften in der Naturwissenschaftlichen Fakultät III der Martin-Luther-Universität Halle Wittenberg angefertigt.

Zuerst möchte ich meinem Doktorvater Prof. Dr. Dr. Herbert Pöllmann für die Bereitstellung des interessanten Themas und der Möglichkeit zur Promotion danken. Die fachlichen Diskussionen und die moralische Unterstützung bei der Durchführung der Arbeit haben mir immens geholfen. Die zeitliche und finanzielle Unterstützung zur Teilnahme an diversen nationalen und internationalen Tagungen erweiterten meinen Horizont.

Bei PD Dr. Stefan Stöber möchte ich mich für die vielen Diskussionen wissenschaftlicher und allgemeiner Natur bedanken. Bei den technischen Mitarbeiterinnen Gabriele Kummer und Diana Becher danke ich herzlichst für die Unterstützung im Labor und den täglichen freundschaftlichen Umgang.

Meinen Kolleginnen und Kollegen Sophie Kretschmer, Claudia Reissner, Leonardo Negrao, Tobias Beirau, Sabrina Galluccio und Rebecca Kühn danke ich für die tolle Arbeitsatmosphäre in der Arbeitsgruppe. Es war mir stets eine Freude mich mit euch fachlich auszutauschen und uns gegenseitig zu unterstützen.

Ganz herzlich danke ich schließlich meiner Familie, insbesondere meinen Eltern Chimedtsogzol Anaad und Otgonbayar Choijiljav sowie meinem Bruder Tegshizugder für ihre liebevolle Unterstützung und ihre große Anteilnahme während meiner gesamten Ausbildung. Ich schätze mich sehr glücklich, stets eine so tolle, starke Familie hinter mir zu wissen (манн их баярлалаа).

Für die Kraft der Liebe geht mein Dank an den Mann an meiner Seite, Johannes. Ich danke dir für deine großartige seelische und moralische Unterstützung, dein Verständnis, deine Geduld und nicht nachlassende Aufmunterung - und für das Korrekturlesen der Arbeit.

Nomenklatur und Abkürzungen

a.p.f.u.	Atome pro Formeleinheit (atoms per formula unit)
a.u.	Unskalierte Einheit (arbitrary unit)
counts	Anzahl
EG	Ethylenglycol
FTIR	Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer
IC	Innere Umwandlung (internal conversion)
ICDD	<i>International Centre for Diffraction Data</i>
ISC	Interkombination (intersystem crossing)
ICSD	<i>Inorganic Crystal Structure Database</i>
KZ	Koordinationszahl
MS	Massenspektrometrie
p.A.	Analyserein (per analysis)
PDF	<i>Powder Diffraction File</i> TM
REE	Seltenerdelemente bzw. Metalle der Seltenen Erden
REM	Rasterelektronenmikroskopie
RG	Raumgruppe
RG Nr.	Raumgruppennummer
WLED	Weißer Leuchtdiode (white light-emitting diode)
XRD	Röntgendiffraktometrie (X-ray diffraction)
ZS	Zitronensäure

Kurzzusammenfassung

In Anbetracht der begrenzt verfügbaren Ressourcen wird es immer wichtiger, industrielle Prozesse und Produkte energieeffizienter und ressourcenschonender zu gestalten. Weiße Lichtdioden (WLEDs) stellen eine hervorragende Alternative zu herkömmlichen Glüh- und Leuchtstofflampen, bei denen fast 90 % der Energie als Wärme verloren geht, dar. Wenngleich in den letzten Jahren große Fortschritte in der Entwicklung der WLEDs erzielt werden konnten, besitzen sie weiterhin erhebliches Optimierungspotenzial insbesondere hinsichtlich der Lichtausbeute, Farbstabilität und Farbwiedergabeeigenschaften sowie nicht zuletzt der Herstellungskosten.

Im Rahmen der gezielten Suche nach Leuchtstoffen für WLEDs behandelt die vorliegende Dissertationsschrift die systematische Analyse der Eigenschaften potentiell geeigneter Wirtsgitter auf Basis von Erdalkali-Aluminaten und -Boraten mit den allgemeinen Formeln MA_2O_4 , MB_2O_4 , $MREEAlO_4$ und $M_3REE_2(BO_3)_4$ ($M = Ca, Sr, Ba$; $REE =$ Metalle der Seltenen Erden). Durch den vollständigen Austausch von Aluminium bzw. Bor gegen Seltene Erden wurden Verbindungen des Typs $MREE_2O_4$ synthetisiert und charakterisiert. Für die Verbindungsklassen $MREEAlO_4$ und $MREE_2O_4$ konnte eine Beziehung zwischen der Strukturstabilität und dem Verhältnis der Ionenradien von Seltener Erde und Erdalkalimetall hergestellt werden. Die ermittelten kristallographischen Daten von $Ca_3Dy_2(BO_3)_4$, $Ca_3Eu_2(BO_3)_4$, $Ca_3La_2(BO_3)_4$, $Ca_3Nd_2(BO_3)_4$ und $Ca_3Yb_2(BO_3)_4$ wurden zur Archivierung in der ICDD-Datenbank weitergeleitet.

Als potenzielle Leuchtstoffe für WLEDs wurden dreiwertiges Samarium und Dysprosium bis zu 2 mol-% in die verschiedenen Wirtsgittertypen eingebaut. Von den insgesamt 26 untersuchten Leuchtstoffsystemen zeigten lediglich $BaAl_2O_4:Sm$, $SrB_2O_4:Dy$ und $BaB_2O_4:Dy$ keinerlei Fluoreszenz. Die besten Lumineszenzeigenschaften konnten mit dem Einbau von Dysprosium in Bariumaluminat ($BaAl_2O_4:Dy$) und Samarium in Calciumborat ($CaB_2O_4:Sm$) erzielt werden.

Abstract

In the light of limited available resources, it is getting increasingly important to optimize industrial processes and products to be more energy-efficient and resource-saving. White light-emitting diodes (WLEDs) are an excellent alternative to conventional incandescent and fluorescent lamps, where almost 90 % of the energy is consumed by the emission of heat. Although great progress has been made in the development of WLEDs in recent years, there is still considerable potential for their optimization, particularly in terms of luminous efficacy, color stability, color rendering properties and manufacturing costs.

Aim of this thesis is to find novel phosphors for WLEDs. A series of potentially suitable host lattices based on alkaline earth aluminates and borates with the general composition MA_2O_4 , MB_2O_4 , $MREEAlO_4$ and $M_3REE_2(BO_3)_4$ ($M = Ca, Sr, Ba$; $REE =$ rare earth elements) were studied systematically. Furthermore, compounds of the type $MREE_2O_4$ were studied, which result from the complete substitution of aluminum or boron by rare earth elements. The results show a dependence of structural stability on the ratio of the ionic radii of rare earth and alkaline earth metal for the compound classes $MREEAlO_4$ and $MREE_2O_4$. The crystallographic data determined for the compounds $Ca_3Dy_2(BO_3)_4$, $Ca_3Eu_2(BO_3)_4$, $Ca_3La_2(BO_3)_4$, $Ca_3Nd_2(BO_3)_4$ and $Ca_3Yb_2(BO_3)_4$ was forwarded for filing in the ICDD database.

Up to 2 mol-% trivalent samarium and dysprosium were incorporated into the different host lattice types as potential phosphors for WLEDs. From the studied 26 luminescent systems only $BaAl_2O_4:Sm$, $SrB_2O_4:Dy$ and $BaB_2O_4:Dy$ showed no fluorescence at all. The best luminescence properties were obtained by incorporation of dysprosium in barium aluminate ($BaAl_2O_4:Dy$) and samarium in calcium borate ($CaB_2O_4:Sm$).

1. Einleitung

1.1. Einführung

Ohne die unterschiedlichsten Licht- und Beleuchtungssysteme wäre die Welt, wie wir sie kennen, nicht denkbar. In Anbetracht der begrenzt verfügbaren Ressourcen und des fortschreitenden anthropogenen Klimawandels wird immer wichtiger, industrielle Prozesse und Produkte energieeffizienter und ressourcenschonender zu gestalten. Von Seiten der Politik werden deshalb Impulse gesetzt, die beispielsweise alternative Leuchtmittel erfordern, da herkömmliche Glühlampen aus Umweltschutzgründen verboten wurden. Weiterhin werden Klimaziele formuliert, die eine weitere Steigerung der Effizienz und Minimierung des Rohstoffaufwands erfordern .

Herkömmliche Glüh- und Leuchtstofflampen basieren entweder auf dem Prinzip des Erhitzens eines Glühfadens oder auf Gasentladung. Beide Methoden sind mit großen Energieverlusten durch die Abgabe von Wärme verbunden. Bei Glühlampen werden circa 90 % der Elektrizität genutzt, um Wärme zu erzeugen, nur 10 % werden in sichtbares Licht umgesetzt [1, 2]. Weitere negative Aspekte sind eine vergleichsweise kurze Lebensdauer, der recht hohe Stromverbrauch und eine häufige Notwendigkeit des Austauschs [3].

Im Jahr 1996 wurde von der Nichia Chemical Co. ein völlig neues Beleuchtungssystem auf Basis eines blauen InGaN-LED-Chips entwickelt, der mit Yttriumaluminiumgranat als Leuchtstoff beschichtet wurde ($\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce}$, YAG:Ce). Ein schematischer Aufbau dieser weißen Leuchtdioden (WLEDs, engl. white light-emitting diode) ist in Abb. 1 dargestellt.

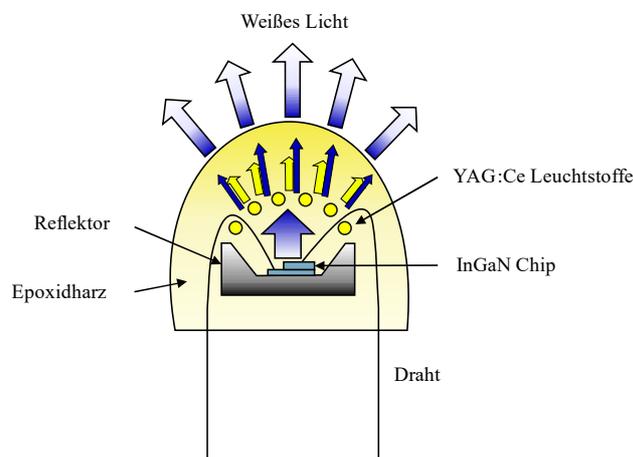


Abb. 1: Schematischer Aufbau von WLEDs (nach [4])

Bei aktivierter Stromzufuhr wird blaues Licht vom InGaN-Chip durch Elektronen-Loch-Rekombination in den p-n-Übergängen abgegeben. Ein Teil des erzeugten blauen Lichts regt den YAG:Ce Leuchtstoff an, dabei wird gelbes Licht ausgesendet. Die Vermischung des emittierten gelben Lichts mit dem Rest blauen Lichts ergibt das sichtbare weiße Licht. Bei dieser auf LED basierenden Beleuchtungsart handelt es sich um die so genannte Solid-State-Beleuchtung (SSL). Vorteile von SSL sind [3, 5–7]:

- eine hohe Lichtausbeute,
- die vergleichsweise hohe Energieeinsparung,
- eine kleinere Baugröße,
- die lange Haltbarkeit.

Inzwischen haben die herkömmlichen weißen Lichtquellen, wie in Abb. 2 dargestellt, ihre physikalische Grenze der Effizienz fast erreicht, während weiße LEDs weiteres Potenzial zur Effizienzsteigerung aufweisen. Es wird angenommen, dass LED-basierte SSL die nächste Generation von Beleuchtungsquellen für generelle Leuchtmittelanwendungen ist [4]. Darüber hinaus werden sie in der Hintergrundbeleuchtung von Flüssigkristallanzeigen, Fahrzeugscheinwerfern, Allgemeinbeleuchtung, Ampeln, Kamerablitzern und Röntgendektoren eingesetzt.

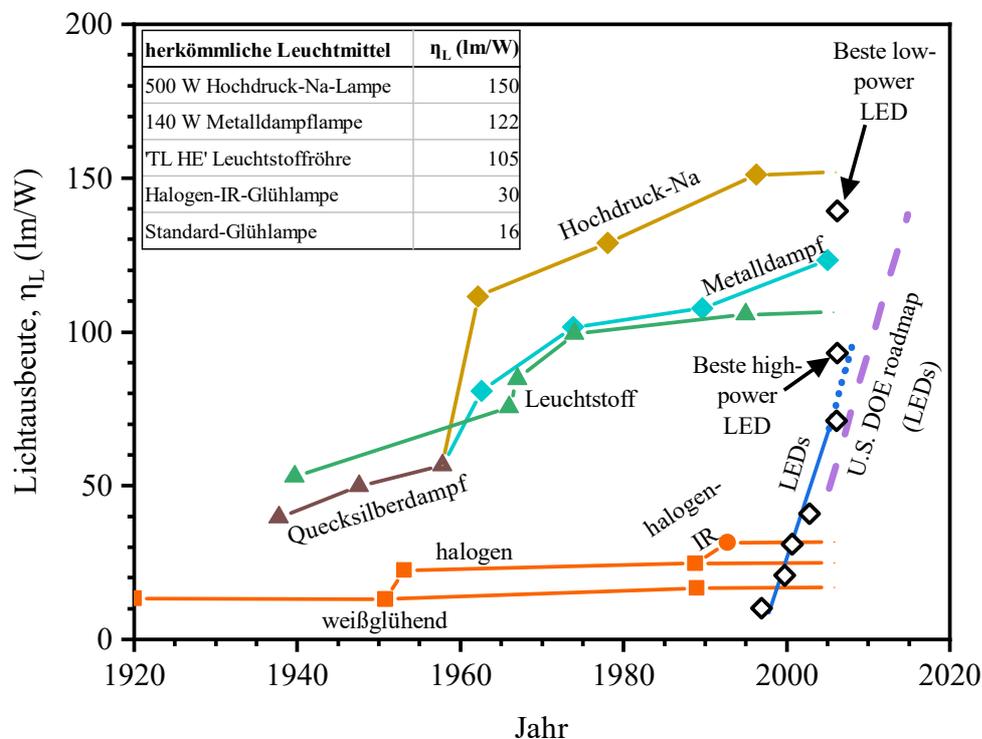


Abb. 2: Entwicklung der Lichtausbeute von Weißlichtquellen (Punkte entlang der blauen Kurve: Leistung handelsüblicher Hochleistungs-LEDs [4])

Generell gibt es drei verschiedene Herangehensweisen, um weißes Licht auf Basis von SSL zu erzeugen [8]:

1. Kombination einer blauen LED mit einem klassischen gelben Leuchtstoff, z.B. oben erwähnte YAG:Ce³⁺. Diese LEDs finden breite Anwendung als einfache langlebige weiße Lichtquelle in Ampeln, Außenbeleuchtungen oder Markierungsleuchten in Tunneln. Das erzeugte weiße Licht wirkt auf das Auge blaustichig-kalt.
2. Kombination einer blauen (Ga,In)N-LED mit zwei Leuchtstoffen, die rot und grün emittieren. Ein Beispiel hierfür ist die Beschichtung eines blau emittierenden GaInN-Chips mit orange leuchtendem Sr₂Si₅N₈:Eu²⁺ und grün fluoreszierendem SrSi₂O₂N₂:Eu²⁺. Durch die Rotanteile erzielt man einen warm-weißen Lichteindruck, diese Art der Lichterzeugung wird deshalb insbesondere als Innenraumbeleuchtung verwendet.
3. Kombination von (Ga,Al)N-UV-LEDs mit drei unterschiedlichen Leuchtstoffen, die rot, grün und blau lumineszieren. Das erzielte weiße Licht ist dem Tageslicht am ähnlichsten. Die Herausforderung hierbei ist, die drei verschiedenen Leuchtstoffe auf einem LED-Chip aufzutragen. Dieses Problem kann umgangen werden, indem Zwei-Farben-Leuchtstoffe verwendet werden: ein geeignetes Wirtsgitter wird mit zwei Aktivatoren dotiert, um bei mindestens zwei Wellenlängen zu emittieren. So gibt z.B. α-Sr(PO₃)₂:Eu²⁺,Mn²⁺ unter UV-Anregung weißes Licht ab.

Fortschritte bei der Synthese von Mikro- und Nanofestkörpern, der Funktionalisierung und Charakterisierung von Materialien sowie der Entwicklung neuartiger Leuchtstoffe ermöglichten wesentliche Verbesserungen von Phosphoren in pc-WLEDs. Moderne Leuchtstoffe besitzen allerdings weiterhin wesentliches Optimierungspotenzial insbesondere hinsichtlich der Verbesserung der Lichtausbeute, der Farbstabilität und der Farbwiedergabeeigenschaften sowie nicht zuletzt der Herstellungskosten.

Dabei ist es aufgrund des komplexen Wechselspiels der zahlreichen Parameter schwer konkrete Voraussagen über Anregungs- und Emissionswellenlängen der Emitter in möglichen Wirtsgittern zu treffen. Die Synthese phasenreiner und sorgfältig dotierter Wirtsgitter ist daher für die Forschung immer noch unerlässlich [8]. Die wichtigsten Anforderungen für Phosphoraktivatoren für WLEDs sind effiziente Absorptionsbanden im blauen Bereich (420-480 nm) bzw. im nahen UV-Bereich (365-410 nm) und weiterhin starke Emissionsübergänge. Diese Anforderungen werden von den starken 4f→5d-Übergängen der Metalle der Seltenen Erden hervorragend erfüllt [9–13]. Dabei zählen Samarium und Dysprosium zu den wichtigen

Aktivator-Ionen. Die intensive orangefarbene Lichtemission von verschiedenen mit Sm^{3+} aktivierten anorganischen Wirtsgittern ist sehr nützlich bei der Herstellung weißer Leuchtdioden (WLEDs) durch die Kombination von UV-LEDs mit cyan- und orange-emittierenden Phosphormaterialien. Weiterhin wird Samarium in der optischen Speichertechnologie, in Temperatursensoren, im Bereich der Unterwasser-Kommunikation, in verschiedenen fluoreszierenden Geräten, Farbdisplays und sichtbaren Festkörperlasern eingesetzt. Im Vergleich dazu emittiert Dysprosium in zwei Bereichen, zum einen im gelben und zum anderen im blauen Spektrum. Die relativen Intensitäten dieser beiden Emissionsbanden hängen von der Dotierungskonzentration, der Wirtszusammensetzung und der Anregungswellenlänge ab [14]. Im Hinblick auf die oben genannten Anwendungen und Eigenschaften wurden Sm^{3+} und Dy^{3+} als Aktivatoren für die vorliegende Arbeit verwendet.

Die zu erwartende Emissionslage eines Leuchtstoffs hängt nicht nur vom Aktivator, sondern auch von der chemischen Zusammensetzung und den strukturellen Eigenschaften des Wirtsgitters ab. In dieser Arbeit wurden potenzielle Wirtsgittermaterialien basierend auf Aluminaten und Boraten sowie Seltenerdoxiden monophasig synthetisiert und analysiert. Diese Wirtsgitter sind aufgrund ihrer niedrigen Synthesetemperaturen, chemischen Stabilität und niedrigen Herstellungskosten sehr gut als Wirtsgitter für Leuchtstoffe geeignet.

1.2. Aufgabenstellung

Wie bereits in der Einführung angesprochen, ist die Suche nach neuen geeigneten Wirtsgittern und Aktivatoren von großer Bedeutung. Im Rahmen dieser Arbeit sollen Wirtsgitter basierend auf Erdalkali-Aluminaten und -Boraten synthetisiert und analysiert werden. Dabei werden als Synthesemethoden die Festkörpermethode und die Pechini-Methode angewendet. Die Synthese der reinphasigen Wirtsgitter wird durch die Optimierung der Synthesemethoden sichergestellt. Im Fokus steht die kristallographische Charakterisierung der Wirtsgitter. Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeit liegt in der Analyse der Lumineszenzeigenschaften der mit dreiwertigen Seltenen Erden dotierten Wirtsgitter. Dafür werden die ausgewählten Wirtsgitter mit Sm^{3+} und Dy^{3+} monodotiert. Die Lumineszenzeigenschaften werden mit Hilfe eines auf Festkörper ausgelegten Fluoreszenzspektrometers untersucht. Schwerpunkt ist hierbei die Bestimmung der optimalen Konzentration der Seltenen Erden für das jeweilige Wirtsgitter, da die Fluoreszenzintensität ab einer bestimmten Aktivatorkonzentration erheblich reduziert wird (sog. Quenching-Effekt).

2. Grundlagen und Kenntnisstand

2.1. Lumineszenz

Lumineszenz (von lat. lumen = Licht) ist ein Sammelbegriff für Leuchterscheinungen, die keine Wärmestrahlung sind. Wenn das Licht unmittelbar (innerhalb weniger Mikrosekunden) nach der Anregung des strahlenden Mediums emittiert wird, spricht man von Fluoreszenz. Die Lebensdauer der Fluoreszenz beträgt 10^{-6} bis 10^{-12} Sekunden. Es leuchtet nur während der Anregung. Klingt das Leuchten nach Abschalten der Anregungsquelle langsam ab, dann spricht man von Phosphoreszenz.

Die Lichtstrahlung lässt sich anhand des Jablonski-Diagramms erläutern (Abb. 3). Wird einem Atom Energie zugeführt, so können dadurch Elektronen vom Grundzustand auf einen angeregten Zustand angehoben werden. Ein derart angeregtes Atom hat nun mehrere Möglichkeiten, seine Anregungsenergie abzugeben. Erfolgt die Abgabe durch die Aussendung eines Lichtquants, so handelt es sich um Fluoreszenz. Da dieser Vorgang quantenmechanisch erlaubt ist, passiert dies schnell und es gibt kein Nachleuchten. Das emittierte Fluoreszenzspektrum ist dabei aufgrund der strahlungslosen Energieverluste im angeregten Zustand zu größeren Wellenlängen verschoben (sog. Stokes-Verschiebung). Die zweite Möglichkeit zur Abgabe von Energie ist in Form von Schwingungsenergie (Wärme) an die Umgebung. Die dritte Möglichkeit ist ein quantenmechanischer verbotener Wechsel in einen angeregten Zustand bzw. die Umwandlung in den Triplettzustand vom Singulettzustand (sog. intersystem crossing, IC). Die Rückkehr in den Grundzustand ist ebenfalls quantenmechanisch verboten und findet daher langsam statt. Erfolgt die Rückkehr unter Lichtabstrahlung, so spricht man von Phosphoreszenz. Aus diesem Grund ist Phosphoreszenz nach dem Abschalten der Anregungsquelle über längere Zeiträume zu beobachten als Fluoreszenz [10, 11, 15, 16].

Für das Ausbleiben des Fluoreszenzlichts (eng. Quenching) kann es mehrere Gründe geben:

1. Konzentrationslöschung: die Anregungsenergie geht durch Stöße mit anderen Molekülen verloren,
2. Sensibilisierte Fluoreszenz: die Anregungsenergie wird als elektronische Energie auf andere Moleküle übertragen,
3. Die Anregungsenergie geht in ein langlebiges Niveau über und wird später als Phosphoreszenzlichtquant abgestrahlt.

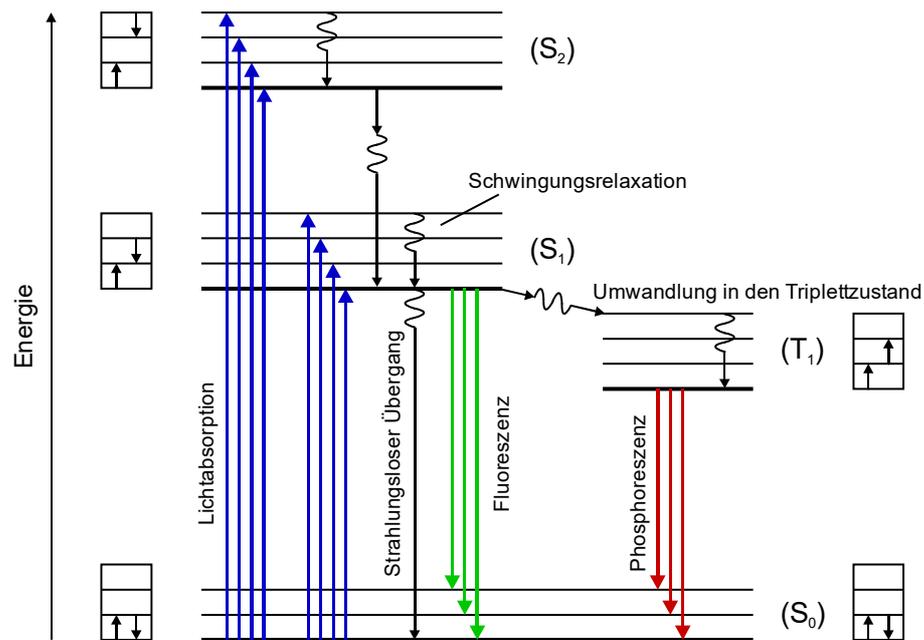


Abb. 3: Jablonski-Diagramm [17]

Weiterhin kann eine Unterteilung der Lumineszenz in Abhängigkeit von der anregenden Energiequelle vorgenommen werden (siehe Tab. 1).

Tab. 1: Formen von Lumineszenz [18]

Lumineszenztyp	Anregungsquelle	Anwendung
Kathodelumineszenz	Elektronen	Fernsehgeräte, Monitore
Photolumineszenz	(UV-)Photonen	Leuchtstofflampen,
Röntgenlumineszenz	Röntgenstrahlen	Röntgenstrahlenverstärker
Elektrolumineszenz	Elektrisches Feld	LEDs, EL-Displays
Sonolumineszenz	Ultraschall	
Solvatolumineszenz	Photonen	Detektoren, analytische Geräte
Chemolumineszenz	Chemische Reaktionsenergie	Analytische Chemie
Biolumineszenz	Biochemische	Analytische Chemie
Tribolumineszenz	Mechanische Energie	

2.2. Leuchtstoffe

Licht wird heutzutage fast ausschließlich unter Verwendung von Leuchtstoffen erzeugt. Als Leuchtstoffe (engl. phosphors) bezeichnet man allgemein feste Stoffe, die Lumineszenz zeigen. Anorganische Leuchtstoffe bestehen in der Regel aus einem Wirtsgitter mit einer Dotierung an Aktivator-Ionen in der Größenordnung von etwa 1 mol-% oder weniger. Die Zusammenstellung der möglichen Wirtsgitterelemente und Aktivatorelemente ist von Jüstel H. et al. unter dem Periodensystem der „Beleuchtungs“-Elemente zusammengefasst (Abb. 4). Die Aktivator-

Ionen sind dabei gelb markiert. Sie verfügen über die Energieniveaus, die für Lumineszenz verantwortlich sind. Generell lassen sich die Aktivatoren in zwei Klassen einteilen:

1. Die Energiezustände, die am Emissionsprozess beteiligt sind, wechselwirken mit dem Wirtsgitter schwach. Dazu gehört eine Vielzahl der Metalle der Seltenen Erden. Die optischen Übergänge finden ausschließlich zwischen 4f-Termen statt, die durch die äußeren Elektronen sehr gut von ihrer chemischen Umgebung abgeschirmt sind. Die Spektren umfassen scharfe Linien, die aus rein elektronischen Übergängen entstehen [19].
2. Die Energiezustände, die am Emissionsprozess beteiligt sind, wechselwirken mit dem Wirtsgitter stark. Einige Emissionsbanden sind dabei durch die starke Kopplung der elektronischen Zustände der Aktivatoren mit den Schwingungen der Atome oder Ionen der Wirtsgitter verbreitet. Das ist der Fall bei der Beteiligung von d-Elektronen (z.B. Mn^{2+}), s^2 -Ionen (z.B. Pb^{2+} , Sb^{3+}) oder Komplexanionen wie MoO_4^{2-} oder NbO_4^{3-} .

In der vorliegenden Arbeit wurden die Wirtsgitter ausschließlich mit Metallen der Seltenen Erden dotiert. Auf die spektralen Eigenschaften der Seltenen Erden wird detailliert in Abschnitt 2.3 eingegangen.

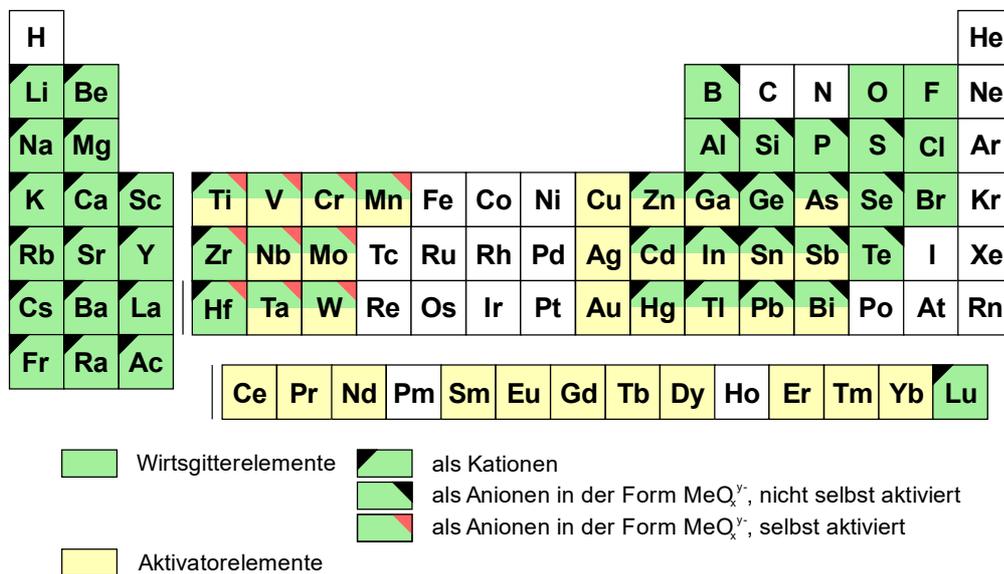


Abb. 4: Darstellung von Wirtsgitter-Ionen und Aktivator-Ionen im Periodensystem der Elemente [9, 18]

Die Eigenschaften eines Leuchtstoffs hängen nicht nur vom Aktivator, sondern auch von der Grundstruktur des Wirtsgitters ab. Mögliche Wirtsgitterelemente sind im Periodensystem der „Beleuchtungs“-Elemente grün gekennzeichnet (vgl. Abb. 4). Die Anionen sind dabei in Oxidform ausgewiesen, um zu verdeutlichen, dass jedes eine ganze Verbindungsklasse

darstellt. Somit repräsentiert SiO_4^{4-} die Silikatverbindungen, die z.B. $\text{Si}_2\text{O}_7^{6-}$, SiO_3^- und $\text{Si}_4\text{O}_{11}^{5-}$ -Anionen enthalten. Man unterscheidet zwischen zwei Arten von Wirtsgittern: inerten und selbst aktivierten. Dem Namen entsprechend weisen inerte Wirtsgitter keine eigenen Fluoreszenzeigenschaften auf. Die mit einem Kreis gekennzeichneten Anionen gehören zu der Gruppe der selbst aktivierten, sie benötigen also keinen Aktivator. So ist z.B. die Lumineszenzeffizienz von CaWO_4 bei einer Anregung mit 147 nm fast vergleichbar mit dem kommerziell verfügbaren Leuchtstoff $\text{BaMgAl}_{10}\text{O}_{17}:\text{Eu}^{2+}$ [20, 21].

2.3. Seltene Erden und ihre spektralen Eigenschaften

Zu den Metallen der Seltenen Erden gehören die Elemente der 3. Nebengruppe des Periodensystems (La, Sc und Y) und die Lanthanoide (Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb und Lu). Die Bezeichnung stammt aus der Zeit der Entdeckung der Elemente. Damals glaubte man, dass diese sporadisch in der Natur verteilt sind. Heutzutage ist evident, dass die Seltenerdmetalle recht gleichmäßig verteilt in der Erdkruste vorkommen. Selten sind jedoch die wirtschaftlich ausbeutbaren Vorkommen, bei denen die Konzentration über einem Prozent liegt. Eines der weltweit größten Vorkommen an Seltenen Erden beherbergt bspw. die Bayan Obo Mine in der Inneren Mongolei in China [22].

Die Elektronenkonfigurationen der Seltenen Erden sind in Tab. 2 dargestellt. Scandium, Yttrium und Lanthan haben die Valenzelektronenkonfiguration $ns^2(n-1)d^1$ mit $n = 4, 5, 6$ und treten in Verbindungen somit fast ausschließlich in der Oxidationsstufe +III auf. Die Valenzelektronen der Lanthanoide unterscheiden sich lediglich durch die Zahl der f-Elektronen. Sie treten also in Verbindungen ebenfalls meist in der Oxidationsstufe +III auf, denn die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der f-Elektronen ist so nah am Kern lokalisiert, dass diese Elektronen nur unter erhöhtem Energieaufwand abgegeben werden. Ausnahmen bilden Cer und Praseodym, bei denen es auch stabile +IV-Verbindungen gibt. Aufgrund der Stabilität der $4f^7$ -Konfiguration gibt es +IV-Verbindungen ebenfalls für Terbium. Diese Stabilität einer halb- bzw. vollbesetzten Schale findet sich auch bei der Oxidationsstufe +II bei Europium und Ytterbium [23, 24].

Tab. 2: Elektronenkonfiguration der Seltenen Erden [23]

Name	Symbol	Atom	REE ³⁺	REE ⁴⁺	REE ²⁺
Scandium	Sc	[Ar]4s ² 3d ¹	[Ar]		
Yttrium	Y	[Kr]5s ² 3d ¹	[Kr]		
Lanthan	La	[Xe]6s ² 3d ¹	[Xe]		
Cer	Ce	[Xe]6s ² 5d ¹ 4f ¹	[Xe]4f ¹	[Xe]	
Praseodym	Pr	[Xe]6s ² 5d ¹ 4f ²	[Xe]4f ²	[Xe]4f ¹	
Neodym	Nd	[Xe]6s ² 5d ¹ 4f ³	[Xe]4f ³	[Xe]4f ²	
Promethium	Pm	[Xe]6s ² 5d ¹ 4f ⁴	[Xe]4f ⁴		
Samarium	Sm	[Xe]6s ² 5d ¹ 4f ⁵	[Xe]4f ⁵		[Xe]4f ⁶
Europium	Eu	[Xe]6s ² 5d ¹ 4f ⁶	[Xe]4f ⁶		[Xe]4f ⁷
Gadolinium	Gd	[Xe]6s ² 5d ¹ 4f ⁷	[Xe]4f ⁷		
Terbium	Tb	[Xe]6s ² 5d ¹ 4f ⁸	[Xe]4f ⁸	[Xe]4f ⁷	
Dysprosium	Dy	[Xe]6s ² 5d ¹ 4f ⁹	[Xe]4f ⁹	[Xe]4f ⁸	
Holmium	Ho	[Xe]6s ² 5d ¹ 4f ¹⁰	[Xe]4f ¹⁰		
Erbium	Er	[Xe]6s ² 5d ¹ 4f ¹¹	[Xe]4f ¹¹		
Thulium	Tm	[Xe]6s ² 5d ¹ 4f ¹²	[Xe]4f ¹²		[Xe]4f ¹³
Ytterbium	Yb	[Xe]6s ² 5d ¹ 4f ¹³	[Xe]4f ¹³		[Xe]4f ¹⁴
Lutetium	Lu	[Xe]6s ² 5d ¹ 4f ¹⁴	[Xe]4f ¹⁴		

Die wichtigste aperiodische physikalische Eigenschaft der Lanthanoide ist die sogenannte Lanthanoiden-Kontraktion. Darunter versteht man die Abnahme des REE³⁺-Ionenradius mit wachsender Kernladungszahl der Lanthanoide. Diese kommt dadurch zustande, dass die steigende Ladung des Atomkerns eine zunehmende Anziehungskraft auf die Elektronenhülle ausübt und dadurch die Elektronenhülle bzw. der Radius der Ionen kleiner wird [15]. Der Zusammenhang ist grafisch in Abb. 5 dargestellt.

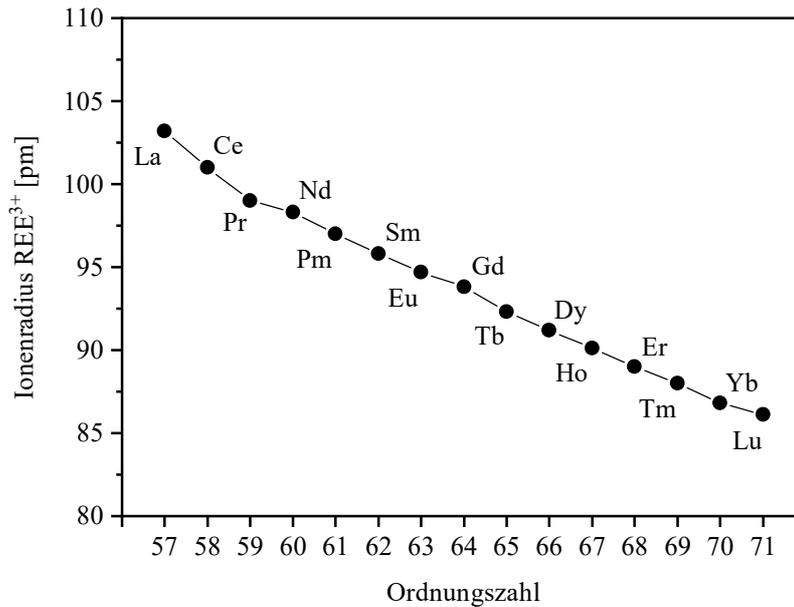


Abb. 5: Ionenradien der hexakoordinierten REE³⁺ Ionen [25]

Die charakteristischen Eigenschaften der REE-Ionen sind auf das Vorhandensein einer nicht vollständig gefüllten, tief liegenden 4f-Schale im Ion zurückzuführen. Die 4f-Orbitale liegen tief im Inneren des Atoms und werden durch vollständig gefüllte 5s²- und 5p⁶-Orbitale sehr gut gegenüber äußeren Feldern abgeschirmt. Zum einen wird dadurch eine Vielzahl von diskreten Energieniveaus erzeugt. Zum anderen werden diese Energieniveaus kaum von den Wirtsgittern beeinflusst. Dies führt zu einer Ähnlichkeit zwischen dem Energieniveaudiagramm eines freien REE³⁺ und dem des eingebauten REE³⁺.

Die drei beobachtbaren Hauptübergänge sind:

- Übergang 4f → 4f
- Übergang 4f → 5d
- Ladungstransferübergang (engl. charge transfer) vom Wirtsgitter auf den Aktivator

4f→4f-Übergang

Mit Ausnahme von Ce³⁺ und Yb³⁺ lassen sich bei REE³⁺ eine große Anzahl an 4f-Energieniveaus beobachten. Für Gd³⁺ gibt es bspw. bis zu 327 Niveaus. Die Übergänge innerhalb von 4f-Schalen sind strengstens verboten, da sich die Parität nicht ändert (Laporte-Auswahlregel). Diese verbotenen Übergänge werden trotzdem beobachtet, da bei der Wechselwirkung der Seltenerdionen mit dem Kristallfeld oder mit den Gitterschwingungen

Zustände entgegengesetzter Paritäten, wie z.B. 5d-Zustände, mit den 4f-Zuständen vermischt werden.

Dieke ermittelte die energetische Lage der 4f-Niveaus trivalenter Lanthanoid-Ionen aus einer Vielzahl an experimentellen Daten und fasste die Ergebnisse in einem nach ihm benannten Dieke-Diagramm (siehe Abb. 6) zusammen [26]. Dabei sind die Energieniveaus der REE³⁺ über einer vertikalen Energieskala aufgetragen. Es handelt sich dabei um eine eindimensionale Darstellung aller Energiezustände relativ zum energetischen Grundzustand. Der Energiezustand eines Atoms lässt sich quantenmechanisch über den Spindrehimpuls S mit der Spinmultiplizität $2S+1$, dem Bahndrehimpuls L sowie dem Gesamtdrehimpuls J beschreiben. Alle drei Drehimpulse können in einem Termsymbol $^{2S+1}L_J$ zusammengefasst werden. Das Diagramm ermöglicht eine schnelle Zuordnung der Absorptions- und Emissionslinien in den optischen Spektren von Verbindungen, die Seltenerdionen enthalten. Die Strichbreite der Energiezustände gibt die Größe der Kristallfeldaufspaltung wieder [27]. Aus dem Dieke-Diagramm kann man die Emissionslinien der Seltenen Erden in verschiedenen Wirtsgittern näherungsweise ermitteln, da die $f \rightarrow f$ -Übergänge der REE³⁺ kaum von den Wirtsgittern beeinflusst werden.

Die geringe Elektronen-Photonen-Kopplung der Absorptions- und Emissionsbanden der $f \rightarrow f$ -Übergänge lässt sich in den zugehörigen Spektren anhand von außerordentlich scharfen Peaks mit Halbwertsbreiten von nur ca. 1 cm^{-1} erkennen. Weiterhin ist diese geringe Kopplung Grund dafür, dass sich Lumineszenz viel häufiger bei REE³⁺ beobachtet lässt als bspw. bei den Übergangsmetallverbindungen. Die sichtbare $f \rightarrow f$ -Emission und deren große Häufigkeit haben dazu geführt, dass viele der heute verwendeten lumineszierenden Materialien REE³⁺ enthalten [15].

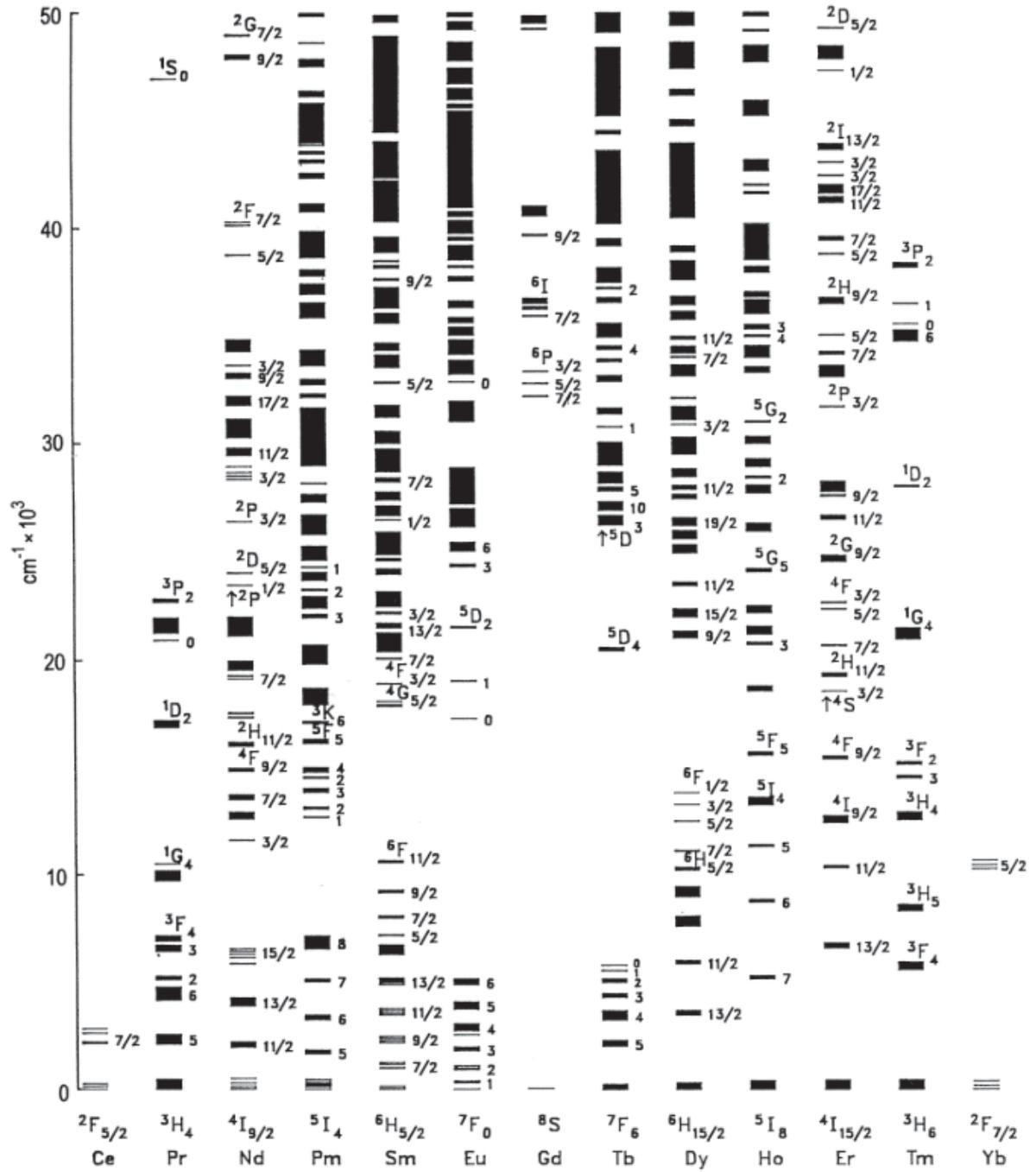


Abb. 6: Dicke-Diagramm für freie REE³⁺-Ionen [26]

4f→5d-Übergang

Man spricht von einem 4f→5d-Übergang, wenn eines der 4f-Elektronen auf das höher liegende 5d-Niveau angehoben wird. Dieser Übergang ist nach der Laporte-Auswahlregel erlaubt und deshalb sehr intensiv.

Die 5d-Orbitale sind nicht so stark durch andere Elektronenschalen abgeschirmt wie die 4f-Orbitale. Die resultierende starke Elektronen-Photonen-Kopplung und die Änderung des Gleichgewichtsabstandes während der Übergänge führen zu breiteren Banden in den Spektren. Als Folge der starken Kristallfeldwirkung hängt die Lage des 4f→5d-Übergangs stark vom Wirtsgitter ab.

Der 4f→5d-Übergang wird bei einer Linienbreite von mehr als 50000 cm⁻¹ beobachtet und ist somit nicht bei UV-Anregung zu sehen. Weiterhin findet er bei leicht oxidierbaren Ionen wie Ce³⁺, Pr³⁺ und Tb³⁺ statt [10, 15, 24].

Tab. 3: Vergleich von 4f→4f-Übergang und 4f→5d-Übergang [10]

	4f → 4f	4f → 5d
Dipoloszillatorstärke	10 ⁻⁶	10 ⁻¹ - 10 ⁻²
Elektronen-Photonen-Kopplung	schwach	stark
Emissionswellenlänge	200 - 500 nm	150 - 1000 nm
Linienbreite	10 cm ⁻¹	> 1000 cm ⁻¹
Lebensdauer	10 ⁻² - 10 ⁻⁵ s	10 ⁻⁸ - 10 ⁻⁶ s

Ladungstransferübergang (engl. charge transfer)

Hierbei handelt es sich um einen elektronischen Übergang aus den Orbitalen des Wirtsgitters in Orbitale des Aktivators bzw. REE³⁺ (4fⁿ→4fⁿ⁺¹L¹, L = Ligand). Im Wesentlichen ähnelt er sehr dem 4f→5d-Übergang: er ist energiereich bzw. intensiv, besitzt eine kurze Lebensdauer und erscheint in Spektren als breite Banden. Ladungstransferübergänge sind sehr von den Wirtsgittereigenschaften, insbesondere von Elektronennegativität und nephelauxetischen Effekten (partielle Verschiebung der Elektronendichte eines Zentralatoms auf die des umgebenden Liganden), abhängig. Allgemein gilt, dass Ladungstransferübergänge bei relativ leicht reduzierbaren Seltenerdionen wie Sm³⁺, Eu³⁺ und Yb³⁺ stattfinden [27, 15].

2.3.1. Sm³⁺-Lumineszenz (4f⁵)

Samarium wurde erstmals im Jahr 1880 von Paul Émil Lecoq de Boisbaudran aus dem Mineral Samarskit isoliert, aus welchem sich auch sein Name ableitet [28]. Es besitzt die Ordnungszahl

62 im Periodensystem der Elemente und die Elektronenkonfiguration $[\text{Xe}]4f^6 6s^2$. Samarium kann in den Oxidationsstufen +II und +III vorkommen, dabei ist +III stabiler. Bei einer UV-Anregung zeigen die mit Sm^{3+} dotierten Wirtsgitter scharfe Elektronenübergänge in sichtbaren und NIR-Bereichen. Abb. 7 stellt die für diese Arbeit relevanten Übergänge von Sm^{3+} in einem vereinfachten Dieke-Diagramm dar. Die Energien orientieren sich an den für CaAl_2O_4 ermittelten Werten. Diese sind aufgrund der geringen Abhängigkeit vom jeweiligen Wirtsgitter allgemein verwendbar [29–32].

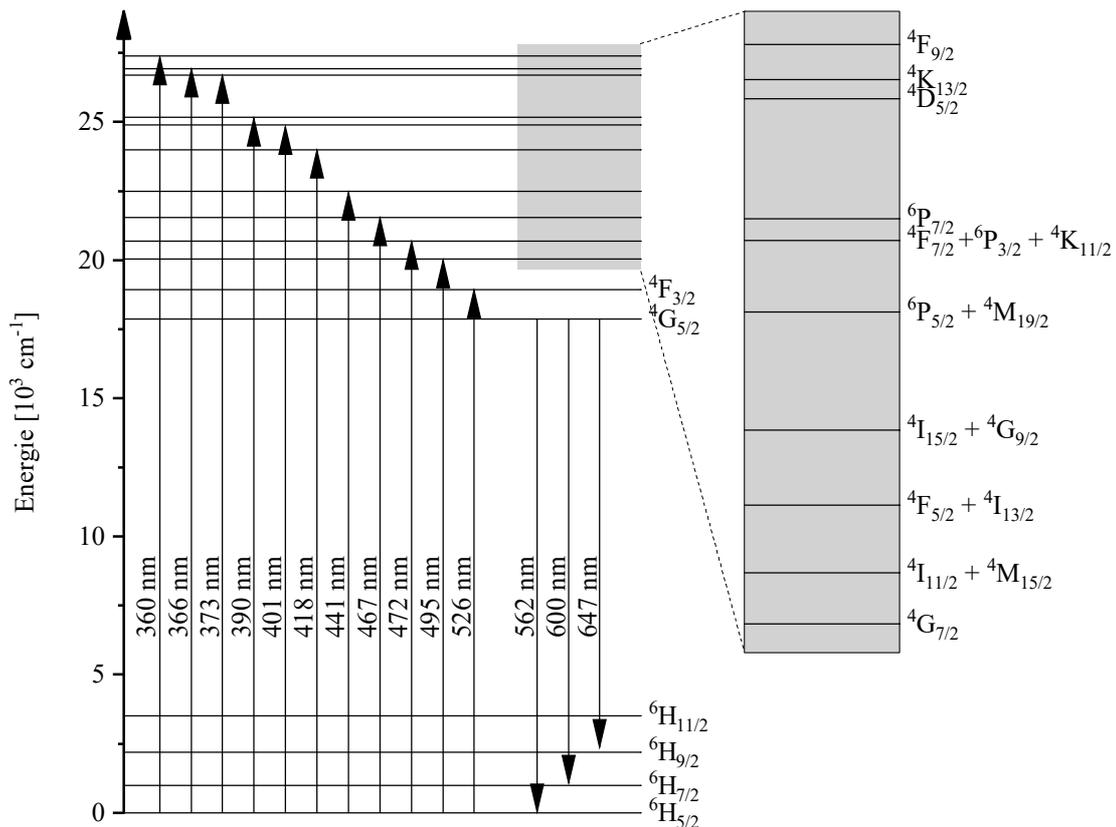


Abb. 7: Energieniveaudiagramm für Sm^{3+} in CaAl_2O_4

Sämtliche im sichtbaren Spektralbereich liegenden Übergänge sind paritätsverboten. Zudem ist der Großteil der Übergänge spinverboten, mit Ausnahme von ${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{P}_J$ ($J = 3/2, 5/2, 7/2$). Die wichtigen Übergänge für die Anregung sind mit Pfeilen nach oben dargestellt. Der intensivste Anregungspeak des Sm^{3+} -Ions ist einer Gruppe von Übergängen zugeschrieben, die unter anderem den spinerlaubten Übergang ${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{P}_{3/2}$ enthält. Die Anregungspeaks können aufgrund der sehr nah zueinander liegenden Energieniveaus nicht einem einzelnen Übergang zugeschrieben werden [26, 33]. Die orangene Emission von Sm^{3+} findet vom untersten der angeregten Zustände, dem ${}^4\text{G}_{5/2}$ Niveau, in das Grundzustandsmultipllett ${}^6\text{H}_J$ mit $J = 5/2, 7/2$ bis

9/2, statt [26]. Dabei sind die Übergänge ${}^4G_{5/2} \rightarrow {}^6H_{5/2}$ und ${}^4G_{5/2} \rightarrow {}^6H_{7/2}$ erlaubte magnetische Dipolübergänge mit der Auswahlregel $\Delta J = 0$ und ± 1 . Der Übergang ${}^4G_{5/2} \rightarrow {}^6H_{9/2}$ ist ein elektrischer Dipolübergang, der der Auswahlregel $\Delta J = 2$ gehorcht [34–36]. Die schärfste Emissionsintensität beobachtet man bei einer Wellenlänge von 600 nm (${}^4G_{5/2} \rightarrow {}^6H_{7/2}$) [37–39].

2.3.2. Dy³⁺-Lumineszenz (4f⁹)

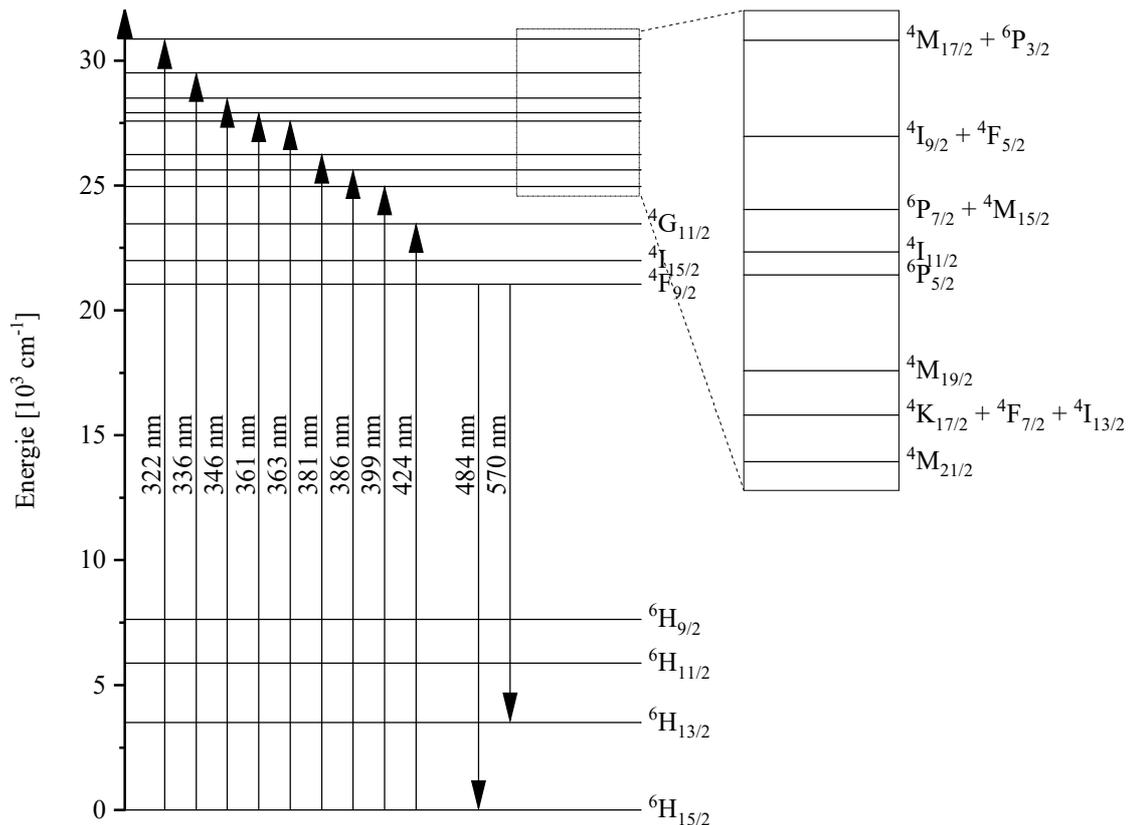


Abb. 8: Energieniveaudiagramm für Dy³⁺ in CaAl₂O₄

Dysprosium wurde 1886 von Paul Émil Lecoq de Boisbaudran mithilfe der Spektralanalyse entdeckt, und zwar als Begleitmittel des Holmiums in der Yttererde. Der Name Dysprosium kommt aus dem Griechischen und bedeutet „schwer zugänglich“, um die Schwierigkeiten in seiner Gewinnung zu betonen [40]. Es besitzt die Ordnungszahl 66 im Periodensystem der Elemente und die Elektronenkonfiguration [Xe]4f⁹6s². In seinen Verbindungen geht es die Oxidationsstufen +II, +III und +IV ein, wobei die Oxidationsstufe +III die häufigste und beständigste ist. Abb. 8 stellt die für diese Arbeit relevanten Übergänge von Dy³⁺ in einem vereinfachten Dieke-Diagramm dar. Die Zuordnung der Übergänge erfolgte anhand der Daten von Dieke und Carnall [26, 33]. Die für die Anregung wichtigen Übergänge sind mit Pfeilen dargestellt. Sie bestehen aus mehreren Banden mit Peaks bei 317, 322, 336, 346, 361, 363, 381,

386, 399 und 424 nm und entsprechen den elektronischen Übergängen von Dy^{3+} vom Grundzustand ${}^6\text{H}_{15/2}$ in den angeregten Zustand ${}^4\text{G}_{7/2} + {}^4\text{D}_{5/2}$ (317 nm), ${}^4\text{M}_{17/2} + {}^6\text{P}_{3/2}$ (322 nm), ${}^4\text{I}_{9/2} + {}^4\text{F}_{5/2}$ (336 nm), ${}^6\text{P}_{7/2} + {}^4\text{M}_{15/2}$ (346 nm), ${}^4\text{I}_{11/2}$ (361 nm), ${}^6\text{P}_{5/2}$ (363 nm), ${}^4\text{M}_{19/2}$ (381 nm), ${}^4\text{K}_{17/2} + {}^4\text{F}_{7/2} + {}^4\text{I}_{13/2}$ (386 nm), ${}^4\text{M}_{21/2}$ (399 nm) und ${}^4\text{G}_{11/2}$ (424 nm).

Wie man weiterhin in Abb. 8 sehen kann, erzeugt Dy^{3+} intensiv gelbe (${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{13/2}$) und blaue (${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{15/2}$) Emissionen. Die gelbe Emission gehört zum hypersensiblen Übergang mit $\Delta J = 2$ und ist ein elektrischer Dipolübergang, welcher stark von der Ligandenfeldumgebung von Dy^{3+} beeinflusst wird, während die blaue Emission von ${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{15/2}$ ein von der Ligandenfeldumgebung unabhängiger magnetischer Dipolübergang ist [41–43].

2.3.3. Eu^{3+} -Lumineszenz ($4f^6$)

Europium wurde 1901 von Eugène-Anatole Demarçay aus Samarium/Europium-Magnesium-Nitrat-Doppelsalzen durch fraktionierte Kristallisation isoliert. Es ist nach dem Kontinent Europa genannt [44]. Es besitzt die Ordnungszahl 63 im Periodensystem der Elemente und die Elektronenkonfiguration $[\text{Xe}]4f^76s^2$. In Verbindungen werden die zwei- und dreiwertige Oxidationsstufe bevorzugt. Abb. 9 stellt die für diese Arbeit relevanten Übergänge von Eu^{3+} in einem vereinfachten Dieke-Diagramm dar. Die Zuordnung der Übergänge erfolgte wiederum anhand der Daten von Dieke und Carnall [26, 33]. Im Wirtsgitter CaEuAlO_4 liegen die wesentlichen Anregungsübergänge von Eu^{3+} bei Wellenlängen von 395 nm (${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{L}_6$) und 465 nm (${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{D}_2$).

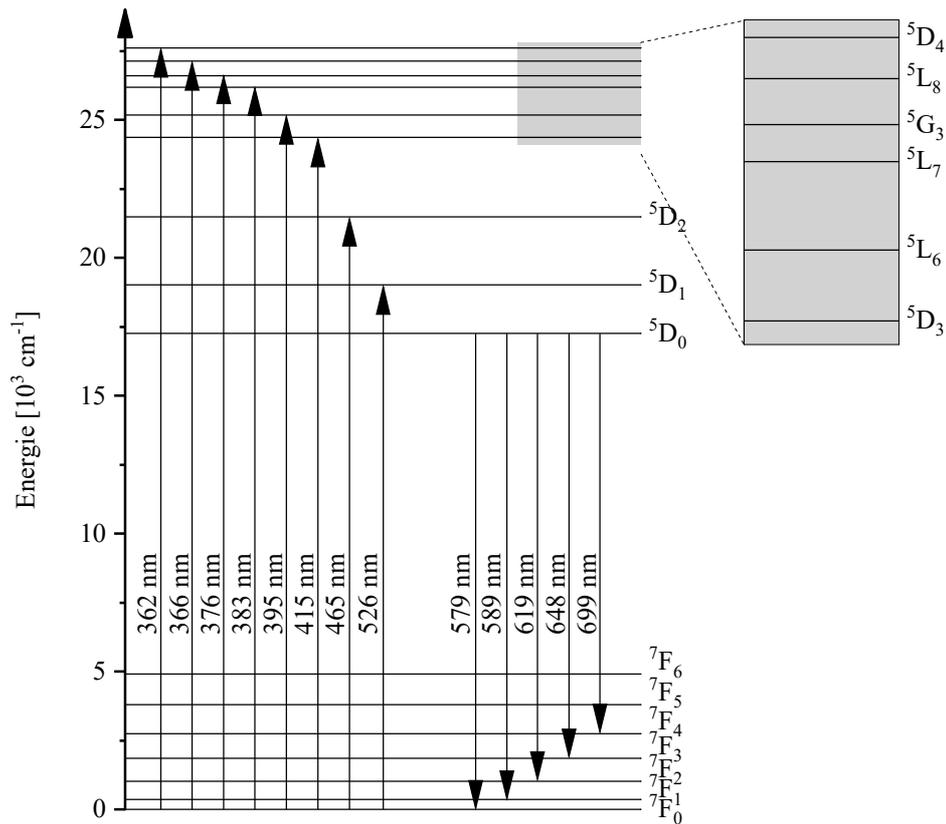


Abb. 9: Energieniveaudiagramm für Eu³⁺ in CaEuAlO₄

Die Emissionsübergänge finden vom angeregten Niveau 5D_0 zu niedrigen Niveaus 7F_J ($J = 0 - 4$) statt. Die meisten f→f-Übergänge der dreiwertigen Lanthanoide werden von der Umwelt kaum beeinflusst. Einige reagieren jedoch empfindlich auf die Umwelt und werden intensiver. Solche Übergänge werden als hypersensible Übergänge bezeichnet [45]. Ein solcher hypersensibler Übergang ist der elektrische Dipolübergang ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_2$ mit $\Delta J = 2$. Die Intensität des Übergangs variiert in Abhängigkeit von der lokalen Umgebung um Größenordnungen [31]. Im Gegensatz dazu ist der magnetischer Dipolübergang ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_1$ unempfindlich gegenüber der Ortssymmetrie, da er paritätserlaubt ist. Aus diesem Grund lässt sich bei Eu³⁺ anhand des Intensitätsverhältnisses der beiden Emissionsübergänge eine Aussage über die lokale Symmetrie von Eu³⁺ treffen.

3. Experimentelle Methoden

3.1. Röntgenpulverdiffraktometrie (PXRD)

Die Wellenlänge von Röntgenstrahlung entspricht etwa den Abständen der Gitterebenen eines Kristalls. Daher werden Röntgenstrahlen an den Netzebenen des Kristalls gebeugt. Diese Beugung bzw. sogenannte Diffraktion von Röntgenstrahlen an den Gitterebenen der kristallinen Stoffe gleicht formal einer Reflexion, sodass der Beugungswinkel gleich dem Einfallswinkel ist. Dabei werden die Röntgenstrahlen bei gegebener Wellenlänge λ nur unter bestimmten Beugungswinkeln θ gespiegelt, deren Größe von dem Netzebenenabstand d gemäß der Bragg-Gleichung

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (1)$$

abhängt. Dabei ist n eine ganze Zahl bzw. Ordnung des Reflexes [15]. Das beobachtete Beugungsmuster bzw. Diffraktogramm einer Substanz wird mit Beugungsmustern aus einer Datenbank (z.B. PDF-4/ICDD oder ICSD) verglichen, um die kristallinen Phasen zu identifizieren und die Reinheit der Messprobe zu bestimmen.

Die pulverdiffraktometrischen Untersuchungen wurden an einem Röntgendiffraktometer X'Pert³ Powder der Firma PANalytical mit Bragg-Brentano-Geometrie durchgeführt. Das Gerät war mit einem PIXcel^{1D} Detektor ausgestattet. Die Probenpräparation erfolgte mittels Backloading-Verfahren. Die Messparameter für die röntgenographische Untersuchung der Syntheseprodukte sind in Tab. 4 angegeben.

Zur qualitativen Phasenanalyse und Gitterparameterverfeinerung wurde das Programm HighScore Plus 4.8 der Firma PANalytical verwendet. Dabei erfolgte die Gitterparameterverfeinerung mittels Pawley-Fit nach der Methode der kleinsten Quadrate. Zur Korrektur des Probenhöhenfehlers wurde den Reinphasen bei der Probenpräparation zusätzlich Silizium ($a_0 = 5,4309 \text{ \AA}$, Fluka, 99,999 % z.A.) zugemischt. Für die bildliche Darstellung der Kristallstruktur wurde die Software VESTA (Version 4.3.0) verwendet [46].

Tab. 4: Messparameter für die röntgenographische Untersuchung der Edukte und Produkte

Einstellungen	Werte
Winkel 2θ [°]	5 - 70
Temperatur [°C]	25
Strahlung	Cu $K_{\alpha 1,2}$ ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$)
Spannung [kV]	45
Stromstärke [mA]	40
Schrittweise 2θ [°]	0,013
Messzeit [min]	17:32
Filter	Ni
Sollerschlitze [rad]	0,04
Divergenzblende [°]	1/8
Antistreublende [°]	1/4
Strahlenmaske [mm]	10
Probenträger	Standardprobenträger \varnothing 16 mm

3.2. Fourier-Transform-Infrarot-Spektroskopie (FTIR)

Die Infrarotspektroskopie ist ein physikalisches Analyseverfahren. Die Molekülschwingungen werden mit infraroter Strahlung (Wellenlänge: 800 nm – 1 mm) angeregt. Die Schwingungsfrequenz ist dabei abhängig von den schwingenden Massen und der Bindungsstärke. Somit lassen sich anhand der Absorptionsbanden die funktionellen Gruppen des Moleküls identifizieren und charakterisieren.

Zur Herstellung von Presslingen wurde ein fein zerriebenes Gemisch aus ca. 2 mg Pulverprobe und ca. 300 mg getrocknetem KBr-Pulver in die Pressform gegeben. Die zusammengesetzte Pressform wurde nach ausreichender Evakuierung (ca. 45 s) unter einer hydraulischen Presse für ca. 2 min mit einem Druck von 10 Torr belastet. Die präparierten KBr-Presslinge wurden an einem FTIR-Spektrometer Tensor II der Firma Bruker im Wellenlängenbereich von 400 cm^{-1} bis 4000 cm^{-1} gemessen.

3.3. Fluoreszenzspektroskopie

Die Fluoreszenzspektroskopie ist eine empfindliche Messmethode, um strukturelle und insbesondere dynamische Eigenschaften von Molekülen zu untersuchen [47]. Die Methode dient zur Untersuchung der Lumineszenzeigenschaften der dotierten Wirtsgitter. Dabei kann man zum einen die Anregungswellenlänge (i.d.R. bei der Wellenlänge maximaler Absorption) fixiert bleiben, während die Wellenlänge des emittierten Lichts aufgezeichnet wird (Emissionsspektrum). Zum anderen kann die Emissionswellenlänge (i.d.R. bei der Wellenlänge maximaler Emission) festgehalten und das Anregungsspektrum aufgenommen werden.

Alle Spektren wurden an einem FluoroMax-4 Spektrofluorometer der Firma Horiba Jobin Yvon Inc. bei Raumtemperatur aufgenommen. Als Anregungsquelle diente eine 150 W Xenonlampe, das emittierte Licht wurde in einem Winkel von 90° zum anregenden Licht detektiert. Eine stabilisierte Photodiode als Referenzdetektor kontrolliert die Intensität des Anregungslichts und ermöglicht so Fluoreszenzmessungen, die unabhängig von Intensitätsschwankungen der Lichtquelle sind. Die Pulverproben wurden zur Messung in einem Pulverprobenträger dicht gepresst (Abb. 10).

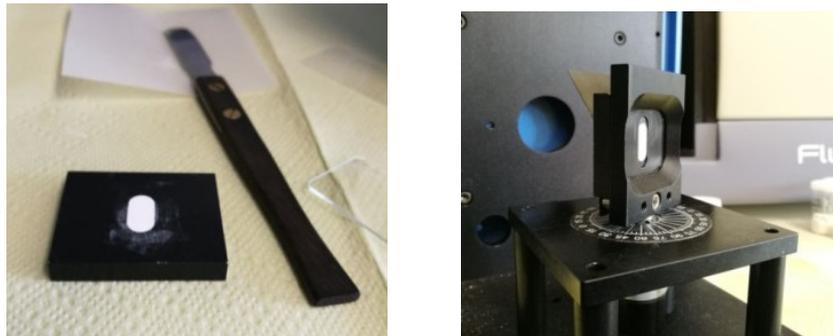


Abb. 10: Präparierte Pulverprobe (links) und senkrechter Probenträger für den Pulverprobenhalter

3.4. Rasterelektronenmikroskopie

Als Rasterelektronenmikroskop (REM) (englisch scanning electron microscope, SEM) bezeichnet man ein Elektronenmikroskop, bei dem die Oberfläche der Probe in einem Rasterabtastmuster mit einem fokussierten Elektronenstrahl abgetastet wird. Die Elektronen wechselwirken mit den Atomen in der Probe und erzeugen verschiedene Signale, die Informationen über die Oberflächentopographie und die Zusammensetzung der Probe enthalten. Die erzeugten Bilder der Objektoberflächen weisen eine hohe Schärfentiefe auf.

Verschiedene Syntheseprodukte wurden mittels REM optisch charakterisiert und die Partikelgröße ermittelt. Zusätzlich wurde mittels energiedispersiver Mikroanalyse (EDX) die Reinheit der Wirtsgitter überprüft. Die Messungen erfolgten an einem JEOL JSM 6300 Rasterelektronenmikroskop, das mit einem Quantax XFlash 5010 EDX-Detektor der Firma Bruker ausgestattet war.

4. Synthesemethode

4.1. Festkörpermethode

Die Festkörpermethode ist die zumeist verwendete Methode, um anorganische Leuchtstoffe basierend auf einer Vielzahl von Wirtsgittern wie bspw. Aluminaten, Silikaten, Boraten und Vanadaten zu synthetisieren. Ein schematischer Ablauf des Verfahrens ist in Abb. 11 gezeigt. Die Ausgangsstoffe werden als Oxide, Carbonate oder Nitrate stöchiometrisch in einem Achatmörser homogenisiert und zusammen aufgemahlen. Eine gute Homogenisierung und eine Vergrößerung der Oberfläche der Reaktanten erhöhen die Reaktionsgeschwindigkeit. Schließlich wird die gemahlene Mischung in einem Korund- oder Platintiegel im Muffelofen gesintert. Mehrmalige Aufmahlschritte zwischen dem Sintern sind notwendig, um reinphasige Wirtsgitter zu synthetisieren. Die Sintertemperatur variiert zwischen 1100 °C und 1500 °C.

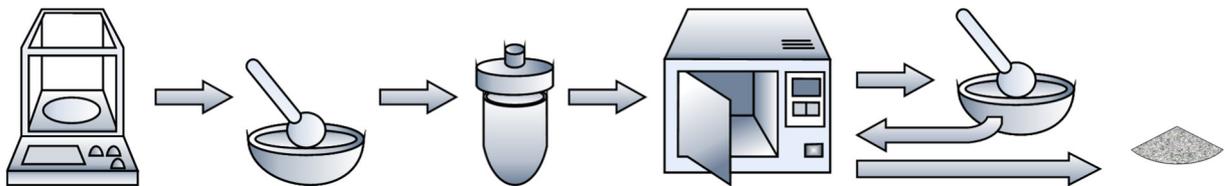


Abb. 11: Schematischer Ablauf der Festkörpersynthese

Die mittels Festkörpermethode durchgeführten Synthesen der Wirtsgitter (Tab. 5) und der dotierten Wirtsgitter (Tab. 6) sind im Folgenden aufgeführt.

Tab. 5: Theoretische chemische Zusammensetzung der mittels Festkörpermethode synthetisierten Wirtsgitter

theoretische chemische Zusammensetzung der Wirtsgitter

CaB_2O_4	SrB_2O_4	BaB_2O_4
$\text{Ca}_3\text{La}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Sr}_3\text{La}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Ba}_3\text{La}_2(\text{BO}_3)_4$
$\text{Ca}_3\text{Nd}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Sr}_3\text{Nd}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Ba}_3\text{Nd}_2(\text{BO}_3)_4$
$\text{Ca}_3\text{Sm}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Sr}_3\text{Sm}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Ba}_3\text{Sm}_2(\text{BO}_3)_4$
$\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$
$\text{Ca}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Sr}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Ba}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$
$\text{Ca}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Sr}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Ba}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$
$\text{Ca}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Sr}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Ba}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$
$\text{Ca}_3\text{Yb}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Sr}_3\text{Yb}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Ba}_3\text{Yb}_2(\text{BO}_3)_4$

Tab. 6: Mittels Festkörpermethode synthetisierte Leuchtstoffe

Dotierung	c(REE³⁺) [mol-%]	c(Na⁺) [mol-%]	chemische Zusammensetzung	Abkürzung
Wirtsgitter CaB₂O₄				
mit Sm ³⁺	0,25	0,25	Ca _{0,995} Sm _{0,0025} Na _{0,0025} B ₂ O ₄	CaB ₂ O ₄ :0,0025Sm
	0,50	0,50	Ca _{0,99} Sm _{0,005} Na _{0,005} B ₂ O ₄	CaB ₂ O ₄ :0,0050Sm
	1,00	1,00	Ca _{0,98} Sm _{0,01} Na _{0,01} B ₂ O ₄	CaB ₂ O ₄ :0,0100Sm
	1,50	1,50	Ca _{0,97} Sm _{0,015} Na _{0,015} B ₂ O ₄	CaB ₂ O ₄ :0,0150Sm
	2,00	2,00	Ca _{0,96} Sm _{0,02} Na _{0,02} B ₂ O ₄	CaB ₂ O ₄ :0,0200Sm
mit Dy ³⁺	0,25	0,25	Ca _{0,995} Dy _{0,0025} Na _{0,0025} B ₂ O ₄	CaB ₂ O ₄ :0,0025Dy
	0,50	0,50	Ca _{0,99} Dy _{0,005} Na _{0,005} B ₂ O ₄	CaB ₂ O ₄ :0,0050Dy
	1,00	1,00	Ca _{0,98} Dy _{0,01} Na _{0,01} B ₂ O ₄	CaB ₂ O ₄ :0,0100Dy
	1,50	1,50	Ca _{0,97} Dy _{0,015} Na _{0,015} B ₂ O ₄	CaB ₂ O ₄ :0,0150Dy
	2,00	2,00	Ca _{0,96} Dy _{0,02} Na _{0,02} B ₂ O ₄	CaB ₂ O ₄ :0,0200Dy
Wirtsgitter SrB₂O₄				
mit Sm ³⁺	0,25	0,25	Sr _{0,995} Sm _{0,0025} Na _{0,0025} B ₂ O ₄	SrB ₂ O ₄ :0,0025Sm
	0,50	0,50	Sr _{0,99} Sm _{0,005} Na _{0,005} B ₂ O ₄	SrB ₂ O ₄ :0,0050Sm
	1,00	1,00	Sr _{0,98} Sm _{0,01} Na _{0,01} B ₂ O ₄	SrB ₂ O ₄ :0,0100Sm
	1,50	1,50	Sr _{0,97} Sm _{0,015} Na _{0,015} B ₂ O ₄	SrB ₂ O ₄ :0,0150Sm
	2,00	2,00	Sr _{0,96} Sm _{0,02} Na _{0,02} B ₂ O ₄	SrB ₂ O ₄ :0,0200Sm
mit Dy ³⁺	0,25	0,25	Sr _{0,995} Dy _{0,0025} Na _{0,0025} B ₂ O ₄	SrB ₂ O ₄ :0,0025Dy
	0,50	0,50	Sr _{0,99} Dy _{0,005} Na _{0,005} B ₂ O ₄	SrB ₂ O ₄ :0,0050Dy
	1,00	1,00	Sr _{0,98} Dy _{0,01} Na _{0,01} B ₂ O ₄	SrB ₂ O ₄ :0,0100Dy
	1,50	1,50	Sr _{0,97} Dy _{0,015} Na _{0,015} B ₂ O ₄	SrB ₂ O ₄ :0,0150Dy
	2,00	2,00	Sr _{0,96} Dy _{0,02} Na _{0,02} B ₂ O ₄	SrB ₂ O ₄ :0,0200Dy
Wirtsgitter BaB₂O₄				
mit Sm ³⁺	0,25	0,25	Ba _{0,995} Sm _{0,0025} Na _{0,0025} B ₂ O ₄	BaB ₂ O ₄ :0,0025Sm
	0,50	0,50	Ba _{0,99} Sm _{0,005} Na _{0,005} B ₂ O ₄	BaB ₂ O ₄ :0,0050Sm
	1,00	1,00	Ba _{0,98} Sm _{0,01} Na _{0,01} B ₂ O ₄	BaB ₂ O ₄ :0,0100Sm
	1,50	1,50	Ba _{0,97} Sm _{0,015} Na _{0,015} B ₂ O ₄	BaB ₂ O ₄ :0,0150Sm
	2,00	2,00	Ba _{0,96} Sm _{0,02} Na _{0,02} B ₂ O ₄	BaB ₂ O ₄ :0,0200Sm
mit Dy ³⁺	0,25	0,25	Ba _{0,995} Dy _{0,0025} Na _{0,0025} B ₂ O ₄	BaB ₂ O ₄ :0,0025Dy
	0,50	0,50	Ba _{0,99} Dy _{0,005} Na _{0,005} B ₂ O ₄	BaB ₂ O ₄ :0,0050Dy
	1,00	1,00	Ba _{0,98} Dy _{0,01} Na _{0,01} B ₂ O ₄	BaB ₂ O ₄ :0,0100Dy
	1,50	1,50	Ba _{0,97} Dy _{0,015} Na _{0,015} B ₂ O ₄	BaB ₂ O ₄ :0,0150Dy
	2,00	2,00	Ba _{0,96} Dy _{0,02} Na _{0,02} B ₂ O ₄	BaB ₂ O ₄ :0,0200Dy

Tab. 6: Mittels Festkörpermethode synthetisierte Leuchtstoffe (Fortsetzung)

Dotierung	c(REE³⁺) [mol-%]	c(Na⁺) [mol-%]	chemische Zusammensetzung	Abkürzungen
Wirtsgitter Ca₃Eu₂(BO₃)₄				
mit Sm ³⁺	0,25	0,25	Ca ₃ Eu _{1,995} Sm _{0,005} B ₄ O ₁₂	Ca ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,005Sm
	0,50	0,50	Ca ₃ Eu _{1,99} Sm _{0,01} B ₄ O ₁₂	Ca ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,010Sm
	1,00	1,00	Ca ₃ Eu _{1,98} Sm _{0,02} B ₄ O ₁₂	Ca ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,020Sm
	1,50	1,50	Ca ₃ Eu _{1,97} Sm _{0,03} B ₄ O ₁₂	Ca ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,030Sm
	2,00	2,00	Ca ₃ Eu _{1,96} Sm _{0,04} B ₄ O ₁₂	Ca ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,040Sm
mit Dy ³⁺	0,25	0,25	Ca ₃ Eu _{1,995} Dy _{0,005} B ₄ O ₁₂	Ca ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,005Dy
	0,50	0,50	Ca ₃ Eu _{1,99} Dy _{0,01} B ₄ O ₁₂	Ca ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,010Dy
	1,00	1,00	Ca ₃ Eu _{1,98} Dy _{0,02} B ₄ O ₁₂	Ca ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,020Dy
	1,50	1,50	Ca ₃ Eu _{1,97} Dy _{0,03} B ₄ O ₁₂	Ca ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,030Dy
	2,00	2,00	Ca ₃ Eu _{1,96} Dy _{0,04} B ₄ O ₁₂	Ca ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,040Dy
Wirtsgitter Sr₃Eu₂(BO₃)₄				
mit Sm ³⁺	0,25	0,25	Sr ₃ Eu _{1,995} Sm _{0,005} B ₄ O ₁₂	Sr ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,005Sm
	0,50	0,50	Sr ₃ Eu _{1,99} Sm _{0,01} B ₄ O ₁₂	Sr ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,010Sm
	1,00	1,00	Sr ₃ Eu _{1,98} Sm _{0,02} B ₄ O ₁₂	Sr ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,020Sm
	1,50	1,50	Sr ₃ Eu _{1,97} Sm _{0,03} B ₄ O ₁₂	Sr ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,030Sm
	2,00	2,00	Sr ₃ Eu _{1,96} Sm _{0,04} B ₄ O ₁₂	Sr ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,040Sm
mit Dy ³⁺	0,25	0,25	Sr ₃ Eu _{1,995} Dy _{0,005} B ₄ O ₁₂	Sr ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,005Dy
	0,50	0,50	Sr ₃ Eu _{1,99} Dy _{0,01} B ₄ O ₁₂	Sr ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,010Dy
	1,00	1,00	Sr ₃ Eu _{1,98} Dy _{0,02} B ₄ O ₁₂	Sr ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,020Dy
	1,50	1,50	Sr ₃ Eu _{1,97} Dy _{0,03} B ₄ O ₁₂	Sr ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,030Dy
	2,00	2,00	Sr ₃ Eu _{1,96} Dy _{0,04} B ₄ O ₁₂	Sr ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,040Dy
Wirtsgitter Ba₃Eu₂(BO₃)₄				
mit Sm ³⁺	0,25	0,25	Ba ₃ Eu _{1,995} Sm _{0,005} B ₄ O ₁₂	Ba ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,005Sm
	0,50	0,50	Ba ₃ Eu _{1,99} Sm _{0,01} B ₄ O ₁₂	Ba ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,010Sm
	1,00	1,00	Ba ₃ Eu _{1,98} Sm _{0,02} B ₄ O ₁₂	Ba ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,020Sm
	1,50	1,50	Ba ₃ Eu _{1,97} Sm _{0,03} B ₄ O ₁₂	Ba ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,030Sm
	2,00	2,00	Ba ₃ Eu _{1,96} Sm _{0,04} B ₄ O ₁₂	Ba ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,040Sm
mit Dy ³⁺	0,25	0,25	Ba ₃ Eu _{1,995} Dy _{0,005} B ₄ O ₁₂	Ba ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,005Dy
	0,50	0,50	Ba ₃ Eu _{1,99} Dy _{0,01} B ₄ O ₁₂	Ba ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,010Dy
	1,00	1,00	Ba ₃ Eu _{1,98} Dy _{0,02} B ₄ O ₁₂	Ba ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,020Dy
	1,50	1,50	Ba ₃ Eu _{1,97} Dy _{0,03} B ₄ O ₁₂	Ba ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,030Dy
	2,00	2,00	Ba ₃ Eu _{1,96} Dy _{0,04} B ₄ O ₁₂	Ba ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ :0,040Dy

4.2. Pechini-Methode

Die Pechini-Methode ist eine Weiterentwicklung der Sol-Gel-Methode (engl. polymer precursor process oder citrate gel method). M.P. Pechini entwickelte die Methode, um Blei-Erdalkalititanate und -niobate zu synthetisieren [48]. Die Vorteile der Methode sind eine leichte Einstellung stöchiometrischer Verhältnisse sowie die sehr gute Homogenisierung der Ausgangssubstanzen (als Lösungen). Dadurch werden im Vergleich zur Festkörpersynthese niedrigere Sintertemperaturen und kürzere Sinterzeiten benötigt. Weiterhin entfallen die mehrmalige Zwischenmahlschritte.

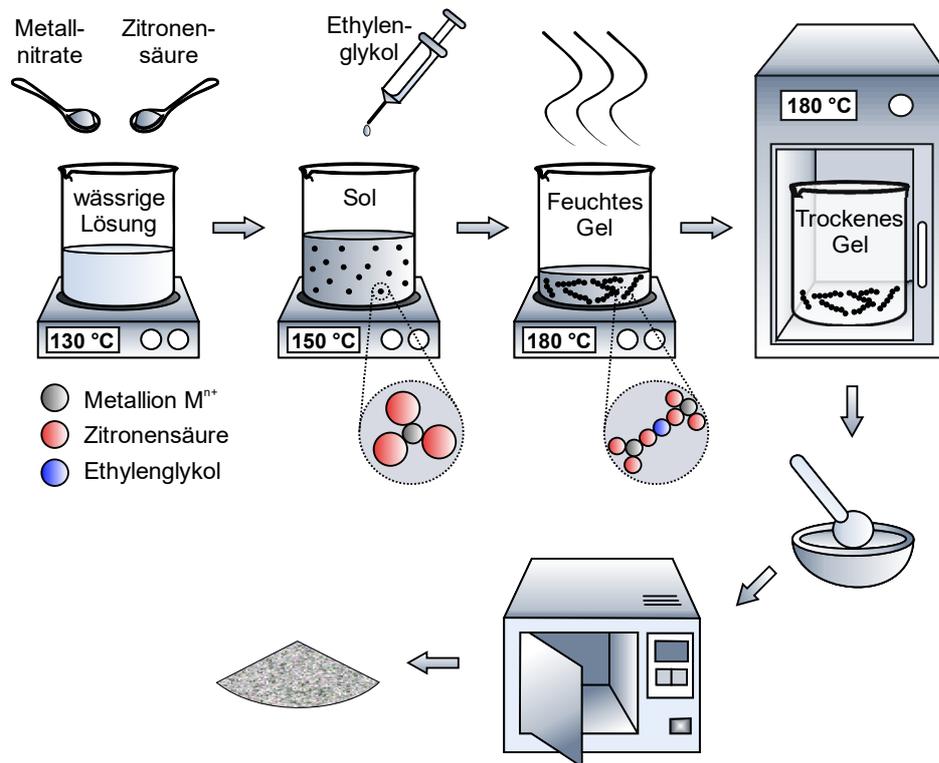


Abb. 12: Schematischer Ablauf der Pechini-Synthese

Der Prozess wird in einem Becherglas durchgeführt. Zunächst werden die benötigten Nitratsalze der eingesetzten Elemente in Wasser gelöst. Im Anschluss wird die Lösung mit Zitronensäure versetzt, deren Citratgruppen mit den gelösten Metallionen Komplexe bilden. Nach der Zugabe von Ethylenglykol beginnt die Polykondensationsreaktion, bei der durch die Reaktion der Carboxyl- mit den Hydroxygruppen eine Vernetzung der Reaktionspartner erfolgt. Das Verhältnis zwischen Metallkation, Zitronensäure und Ethylenglykol ist 1:4:7. Beim Verdampfen des Wassers entsteht eine gelartige Substanz, die im Anschluss vollständig getrocknet und kalziniert wird (Abb. 12). Mit der Pechini-Methode wurden die Wirtsgitter der Erdalkali-Aluminate (vgl. Tab.7 und Tab. 8) synthetisiert. Die Pechini Methode ist jedoch

ungeeignet für die Synthese der auf Boraten basierten Wirtsgittern, da sich beim Verdampfen des Wassers eine Glasschicht bildet, die nicht ohne weiteres aus dem Becherglas entnommen werden kann.

Tab.7: Theoretische chemische Zusammensetzung der mittels Pechini-Methode synthetisierten Wirtsgitter

CaAl ₂ O ₄	SrAl ₂ O ₄	BaAl ₂ O ₄
CaLa ₂ O ₄	SrLa ₂ O ₄	BaLa ₂ O ₄
CaNd ₂ O ₄	SrNd ₂ O ₄	BaNd ₂ O ₄
CaSm ₂ O ₄	SrSm ₂ O ₄	BaSm ₂ O ₄
CaEu ₂ O ₄	SrEu ₂ O ₄	BaEu ₂ O ₄
CaGd ₂ O ₄	SrGd ₂ O ₄	BaGd ₂ O ₄
CaDy ₂ O ₄	SrDy ₂ O ₄	BaDy ₂ O ₄
CaY ₂ O ₄	SrY ₂ O ₄	BaY ₂ O ₄
CaYb ₂ O ₄	SrYb ₂ O ₄	BaYb ₂ O ₄
CaSc ₂ O ₄	SrSc ₂ O ₄	BaSc ₂ O ₄
CaLaAlO ₄	SrLaAlO ₄	BaLaAlO ₄
CaNdAlO ₄	SrNdAlO ₄	BaNdAlO ₄
CaSmAlO ₄	SrSmAlO ₄	BaSmAlO ₄
CaEuAlO ₄	SrEuAlO ₄	BaEuAlO ₄
CaGdAlO ₄	SrGdAlO ₄	BaGdAlO ₄
CaDyAlO ₄	SrDyAlO ₄	BaDyAlO ₄
CaYAlO ₄	SrYAlO ₄	BaYAlO ₄
CaYbAlO ₄	SrYbAlO ₄	BaYbAlO ₄

Tab. 8: Mittels Pechini-Methode synthetisierte Leuchtstoffe

Dotierung	c(REE ³⁺) [mol-%]	c(Na ⁺) [mol-%]	chemische Zusammensetzung	Abkürzungen
Wirtsgitter CaAl ₂ O ₄				
mit Sm ³⁺	0,25	0,25	Ca _{0,995} Sm _{0,0025} Na _{0,0025} Al ₂ O ₄	CaAl ₂ O ₄ :0,0025Sm
	0,50	0,50	Ca _{0,99} Sm _{0,005} Na _{0,005} Al ₂ O ₄	CaAl ₂ O ₄ :0,0050Sm
	1,00	1,00	Ca _{0,98} Sm _{0,01} Na _{0,01} Al ₂ O ₄	CaAl ₂ O ₄ :0,0100Sm
	1,50	1,50	Ca _{0,97} Sm _{0,015} Na _{0,015} Al ₂ O ₄	CaAl ₂ O ₄ :0,0150Sm
	2,00	2,00	Ca _{0,96} Sm _{0,02} Na _{0,02} Al ₂ O ₄	CaAl ₂ O ₄ :0,0200Sm
mit Dy ³⁺	0,25	0,25	Ca _{0,995} Dy _{0,0025} Na _{0,0025} Al ₂ O ₄	CaAl ₂ O ₄ :0,0025Dy
	0,50	0,50	Ca _{0,99} Dy _{0,005} Na _{0,005} Al ₂ O ₄	CaAl ₂ O ₄ :0,0050Dy
	1,00	1,00	Ca _{0,98} Dy _{0,01} Na _{0,01} Al ₂ O ₄	CaAl ₂ O ₄ :0,0100Dy
	1,50	1,50	Ca _{0,97} Dy _{0,015} Na _{0,015} Al ₂ O ₄	CaAl ₂ O ₄ :0,0150Dy
	2,00	2,00	Ca _{0,96} Dy _{0,02} Na _{0,02} Al ₂ O ₄	CaAl ₂ O ₄ :0,0200Dy

Tab. 8: Mittels Pechini-Methode synthetisierte Leuchtstoffe (Fortsetzung)

Dotierung	c(REE³⁺) [mol-%]	c(Na⁺) [mol-%]	chemische Zusammensetzung	Abkürzungen
Wirtsgitter SrAl₂O₄				
mit Sm ³⁺	0,25	0,25	Sr _{0,995} Sm _{0,0025} Na _{0,0025} Al ₂	SrAl ₂ O ₄ :0,0025Sm
	0,50	0,50	Sr _{0,99} Sm _{0,005} Na _{0,005} Al ₂ O ₄	SrAl ₂ O ₄ :0,0050Sm
	1,00	1,00	Sr _{0,98} Sm _{0,01} Na _{0,01} Al ₂ O ₄	SrAl ₂ O ₄ :0,0100Sm
	1,50	1,50	Sr _{0,97} Sm _{0,015} Na _{0,015} Al ₂ O ₄	SrAl ₂ O ₄ :0,0150Sm
	2,00	2,00	Sr _{0,96} Sm _{0,02} Na _{0,02} Al ₂ O ₄	SrAl ₂ O ₄ :0,0200Sm
mit Dy ³⁺	0,25	0,25	Sr _{0,995} Dy _{0,0025} Na _{0,0025} Al ₂ O	SrAl ₂ O ₄ :0,0025Dy
	0,50	0,50	Sr _{0,99} Dy _{0,005} Na _{0,005} Al ₂ O ₄	SrAl ₂ O ₄ :0,0050Dy
	1,00	1,00	Sr _{0,98} Dy _{0,01} Na _{0,01} Al ₂ O ₄	SrAl ₂ O ₄ :0,0100Dy
	1,50	1,50	Sr _{0,97} Dy _{0,015} Na _{0,015} Al ₂ O ₄	SrAl ₂ O ₄ :0,0150Dy
	2,00	2,00	Sr _{0,96} Dy _{0,02} Na _{0,02} Al ₂ O ₄	SrAl ₂ O ₄ :0,0200Dy
Wirtsgitter BaAl₂O₄				
mit Sm ³⁺	0,25	0,25	Ba _{0,995} Sm _{0,0025} Na _{0,0025} Al ₂	BaAl ₂ O ₄ :0,0025Sm
	0,50	0,50	Ba _{0,99} Sm _{0,005} Na _{0,005} Al ₂ O ₄	BaAl ₂ O ₄ :0,0050Sm
	1,00	1,00	Ba _{0,98} Sm _{0,01} Na _{0,01} Al ₂ O ₄	BaAl ₂ O ₄ :0,0100Sm
	1,50	1,50	Ba _{0,97} Sm _{0,015} Na _{0,015} Al ₂ O ₄	BaAl ₂ O ₄ :0,0150Sm
	2,00	2,00	Ba _{0,97} Sm _{0,015} Na _{0,015} Al ₂ O ₄	BaAl ₂ O ₄ :0,0200Sm
mit Dy ³⁺	0,25	0,25	Ba _{0,995} Dy _{0,0025} Na _{0,0025} Al ₂	BaAl ₂ O ₄ :0,0025Dy
	0,50	0,50	Ba _{0,99} Dy _{0,005} Na _{0,005} Al ₂ O ₄	BaAl ₂ O ₄ :0,0050Dy
	1,00	1,00	Ba _{0,98} Dy _{0,01} Na _{0,01} Al ₂ O ₄	BaAl ₂ O ₄ :0,0100Dy
	1,50	1,50	Ba _{0,97} Dy _{0,015} Na _{0,015} Al ₂ O ₄	BaAl ₂ O ₄ :0,0150Dy
	2,00	2,00	Ba _{0,96} Dy _{0,02} Na _{0,02} Al ₂ O ₄	BaAl ₂ O ₄ :0,0200Dy
der Wirtsgitter CaEuAlO₄				
mit Sm ³⁺	0,25	0,25	CaEu _{0,9975} Sm _{0,0025} AlO ₄	CaEuAlO ₄ :0,0025Sm
	0,50	0,50	CaEu _{0,995} Sm _{0,005} AlO ₄	CaEuAlO ₄ :0,0050Sm
	1,00	1,00	CaEu _{0,99} Sm _{0,01} AlO ₄	CaEuAlO ₄ :0,0100Sm
	1,50	1,50	CaEu _{0,985} Sm _{0,015} AlO ₄	CaEuAlO ₄ :0,0150Sm
	2,00	2,00	CaEu _{0,98} Sm _{0,02} AlO ₄	CaEuAlO ₄ :0,0200Sm
mit Dy ³⁺	0,25	0,25	CaEu _{0,9975} Dy _{0,0025} AlO ₄	CaEuAlO ₄ :0,0025Dy
	0,50	0,50	CaEu _{0,995} Dy _{0,005} AlO ₄	CaEuAlO ₄ :0,0050Dy
	1,00	1,00	CaEu _{0,99} Dy _{0,01} AlO ₄	CaEuAlO ₄ :0,0100Dy
	1,50	1,50	CaEu _{0,985} Dy _{0,015} AlO ₄	CaEuAlO ₄ :0,0150Dy
	2,00	2,00	CaEu _{0,98} Dy _{0,02} AlO ₄	CaEuAlO ₄ :0,0200Dy

Tab. 8: Mittels Pechini-Methode synthetisierte Leuchtstoffe (Fortsetzung)

Dotierung	c(REE³⁺) [mol-%]	c(Na⁺) [mol-%]	chemische Zusammensetzung	Abkürzungen
Wirtsgitter SrEuAlO₄				
mit Sm ³⁺	0,25	0,25	SrEu _{0,9975} Sm _{0,0025} AlO ₄	SrEuAlO ₄ :0,0025Sm
	0,50	0,50	SrEu _{0,995} Sm _{0,005} AlO ₄	SrEuAlO ₄ :0,0050Sm
	1,00	1,00	SrEu _{0,99} Sm _{0,01} AlO ₄	SrEuAlO ₄ :0,0100Sm
	1,50	1,50	SrEu _{0,985} Sm _{0,015} AlO ₄	SrEuAlO ₄ :0,0150Sm
	2,00	2,00	SrEu _{0,985} Sm _{0,015} AlO ₄	SrEuAlO ₄ :0,0200Sm
mit Dy ³⁺	0,25	0,25	SrEu _{0,9975} Dy _{0,0025} AlO ₄	SrEuAlO ₄ :0,0025Dy
	0,50	0,50	SrEu _{0,995} Dy _{0,005} AlO ₄	SrEuAlO ₄ :0,0050Dy
	1,00	1,00	SrEu _{0,99} Dy _{0,01} AlO ₄	SrEuAlO ₄ :0,0100Dy
	1,50	1,50	SrEu _{0,985} Dy _{0,015} AlO ₄	SrEuAlO ₄ :0,0150Dy
	2,00	2,00	SrEu _{0,98} Dy _{0,02} AlO ₄	SrEuAlO ₄ :0,0200Dy
Wirtsgitter SrEu₂O₄				
mit Sm ³⁺	0,25	0,25	SrEu _{1,995} Sm _{0,005} O ₄	SrEu ₂ O ₄ :0,005Sm
	0,50	0,50	SrEu _{1,99} Sm _{0,01} O ₄	SrEu ₂ O ₄ :0,010Sm
	1,00	1,00	SrEu _{1,98} Sm _{0,02} O ₄	SrEu ₂ O ₄ :0,020Sm
	1,50	1,50	SrEu _{1,97} Sm _{0,03} O ₄	SrEu ₂ O ₄ :0,030Sm
	2,00	2,00	SrEu _{1,96} Sm _{0,04} O ₄	SrEu ₂ O ₄ :0,040Sm
mit Dy ³⁺	0,25	0,25	SrEu _{1,995} Dy _{0,005} O ₄	SrEu ₂ O ₄ :0,005Dy
	0,50	0,50	SrEu _{1,99} Dy _{0,01} O ₄	SrEu ₂ O ₄ :0,010Dy
	1,00	1,00	SrEu _{1,98} Dy _{0,02} O ₄	SrEu ₂ O ₄ :0,020Dy
	1,50	1,50	SrEu _{1,97} Dy _{0,03} O ₄	SrEu ₂ O ₄ :0,030Dy
	2,00	2,00	SrEu _{1,96} Dy _{0,04} O ₄	SrEu ₂ O ₄ :0,040Dy
Wirtsgitter BaEu₂O₄				
mit Sm ³⁺	0,25	0,25	BaEu _{1,995} Sm _{0,005} O ₄	BaEu ₂ O ₄ :0,005Sm
	0,50	0,50	BaEu _{1,99} Sm _{0,01} O ₄	BaEu ₂ O ₄ :0,010Sm
	1,00	1,00	BaEu _{1,98} Sm _{0,02} O ₄	BaEu ₂ O ₄ :0,020Sm
	1,50	1,50	BaEu _{1,97} Sm _{0,03} O ₄	BaEu ₂ O ₄ :0,030Sm
	2,00	2,00	BaEu _{1,96} Sm _{0,04} O ₄	BaEu ₂ O ₄ :0,040Sm
mit Dy ³⁺	0,25	0,25	BaEu _{1,995} Dy _{0,005} O ₄	BaEu ₂ O ₄ :0,005Dy
	0,50	0,50	BaEu _{1,99} Dy _{0,01} O ₄	BaEu ₂ O ₄ :0,010Dy
	1,00	1,00	BaEu _{1,98} Dy _{0,02} O ₄	BaEu ₂ O ₄ :0,020Dy
	1,50	1,50	BaEu _{1,97} Dy _{0,03} O ₄	BaEu ₂ O ₄ :0,030Dy
	2,00	2,00	BaEu _{1,96} Dy _{0,04} O ₄	BaEu ₂ O ₄ :0,040Dy

4.3. Verwendete Chemikalien

Sämtliche in dieser Arbeit verwendete Chemikalien sind in Tab. 9 aufgeführt. Sie wurden röntgenographisch auf mögliche Verunreinigungen und mittels Glühverlust mit Ausnahme von Natriumnitrat auf ihren Wassergehalt untersucht. Dabei stellte sich heraus, dass es sich bei dem als Lanthanoxid deklarierten Material der Firma Omikron um Lanthanhydroxid ($\text{La}(\text{OH})_3$) handelte. Dies wurde bei den stöchiometrischen Berechnungen berücksichtigt.

Bei Natriumnitrat wurde der Na-Gehalt spektroskopisch bestimmt. Dafür wurde 0,0502 g NaNO_3 in 1 L Reinstwasser gelöst (entspricht 13,53 ppm Na), der Na-Gehalt wurde anschließend mittels ICP-OES zu 13,81 ppm bestimmt. Dieser Wert wurde bei den stöchiometrischen Berechnungen berücksichtigt.

Tab. 9: Hersteller und Reinheitsgrade der verwendeten Chemikalien

Verbindungsname	Summenformel	Molare Masse [g/mol]	Reinheitsgrad	Hersteller
Calciumnitrat-Tetrahydrat	$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	236,15	p.A.	Carl Roth
Strontiumnitrat	$\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$	211,63	p.A.	Sigma
Bariumnitrat	$\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$	261,34	p.A.	Carl Roth
Aluminiumnitrat	$\text{Al}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$	375,13	p.A.	Carl Roth
Borsäure	H_3BO_3	61,83	p.A.	Merck
Zitronensäure	$\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$	192,13	$\geq 99,5 \%$	Carl Roth
Ethylenglycol	$\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2$	62,07	$\geq 99 \%$	Carl Roth
Natriumnitrat	NaNO_3	84,99	p.A.	AppliChem
Europium(III)oxid	Eu_2O_3	351,93	99,9 %	ChemPUR
Dysprosium(III)oxid	Dy_2O_3	373,00	99,9 %	Aldrich
Gadolinium(III)oxid	Gd_2O_3	362,50	$\geq 99,9 \%$	Aldrich
Lanthanoxid*	La_2O_3	189,93	99,9 %	Omikron
Neodym(III)oxid	Nd_2O_3	336,48	99,9 %	ChemPUR
Samarium(III)oxid	Sm_2O_3	348,72	99,9 %	Aldrich
Scandium(III)oxid	Sc_2O_3	137,91	99,999 %	Aldrich
Ytterbium(III)nitrat-Pentahydrat	$\text{Yb}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	449,13	99,9 %	ChemPUR
Yttrium(III)nitrat-Hexahydrat	$\text{Y}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	383,01	99,8 %	Aldrich

5. Ergebnisse und Diskussion

Die Darstellung der Ergebnisse ist in sechs Abschnitte unterteilt (vgl. Abb. 13). Die Wirtsgitter mit der allgemeinen Formel $M^{2+}M^{3+}_2O_4$ werden in den Abschnitten 5.1 – 5.3 behandelt. Die eingesetzten Synthesemethoden sind dabei jeweils angegeben. Für die Dotierung mit Sm^{3+} bzw. Dy^{3+} wurden die Wirtsgitter MA_2O_4 , MB_2O_4 ($M = Ca, Sr, Ba$), $SrEu_2O_4$ und $BaEu_2O_4$ ausgewählt. Ziel der Versuche an $SrEu_2O_4$ und $BaEu_2O_4$ war es, den Einfluss von Sm^{3+} und Dy^{3+} auf die Emission von Eu^{3+} in Wirtsgittern zu untersuchen. Insgesamt wurden fünf Dotierungskonzentrationen je Wirtsgitter und Aktivator festgelegt: 0,25 mol-%, 0,50 mol-%, 1,00 mol-%, 1,50 mol-%, und 2,00 mol-%. Dabei entsteht bei Erdalkali-Aluminaten und -Boraten durch die Substitution der zweiwertigen Erdalkalimetalle M^{2+} durch dreiwertige Seltenerdmetalle Sm^{3+} bzw. Dy^{3+} eine Ladungsungleichheit. Diese wurde durch den Einbau von Na^+ in den Leuchtstoff kompensiert.

Die Ergebnisse der Untersuchung der Mischreihen $SrAl_2O_4 - SrEu_2O_4$ und $SrB_2O_4 - SrEu_2O_4$ sind in Abschnitt 5.4 beschrieben. Die Synthese und Charakterisierung der isotypischen Verbindungen zu den intermediären Verbindungen, $SrEuAlO_4$ und $Sr_3Eu_2(BO_3)_4$, werden in den Abschnitten 5.5 und 5.6 dargestellt. Von den stabilen Wirtsgittern wurden diejenigen ausgewählt, die Europium enthalten. Diese wurden anschließend mit Sm^{3+} bzw. Dy^{3+} dotiert – es handelt sich dabei um die Wirtsgitter $CaEuAlO_4$, $SrEuAlO_4$, und $M_3Eu_2(BO_3)_4$ ($M = Ca, Sr, Ba$). Ziel dieser Versuche war es, den Einfluss des Gehalts an Sm^{3+} bzw. Dy^{3+} auf die Emissionseigenschaften von Eu^{3+} in tetragonalem Erdalkali-Europiumaluminat und orthorhombischem Erdalkali-Europiumborat zu charakterisieren.

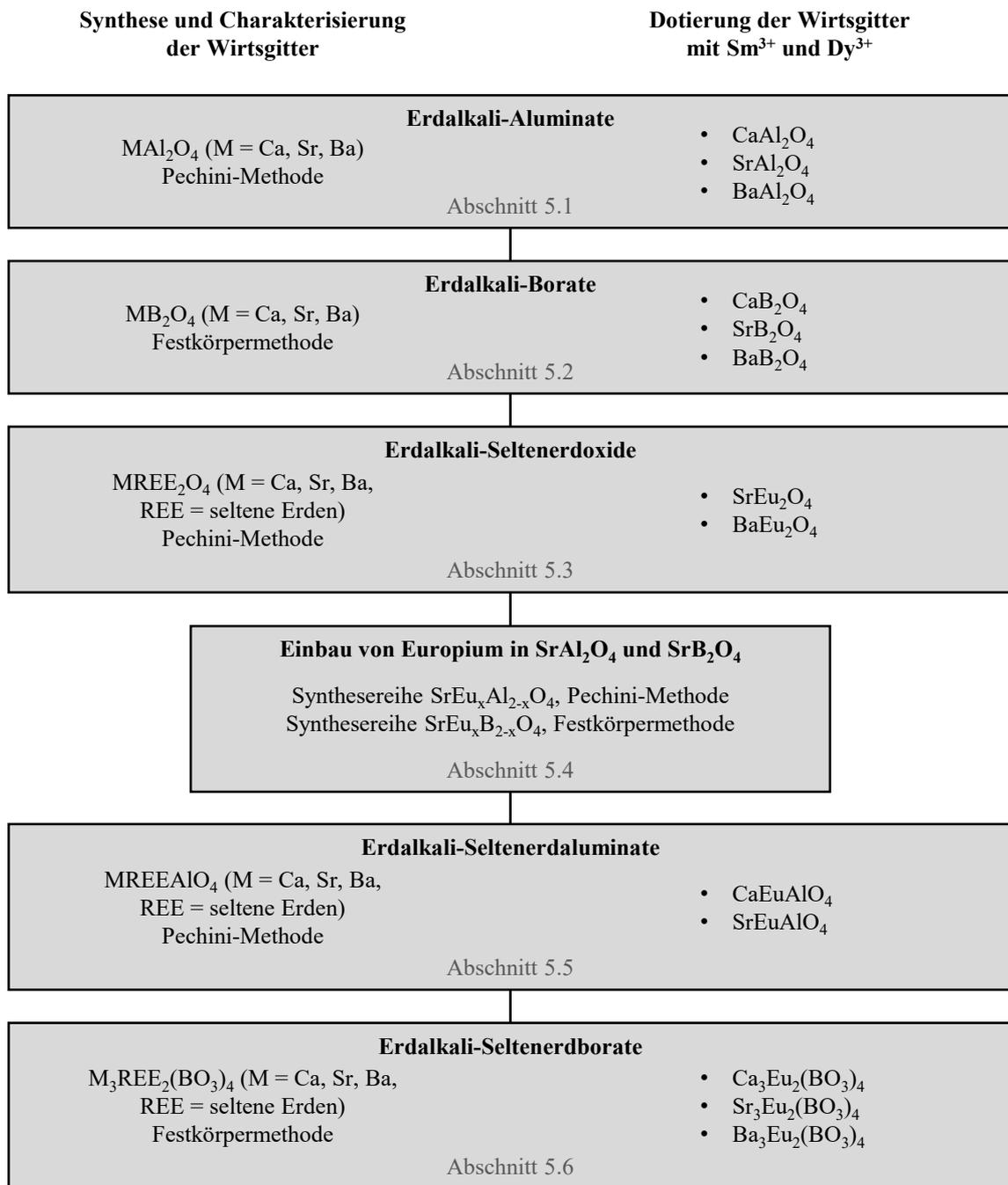


Abb. 13: Struktur des Ergebniskapitels

5.1. Erdalkali-Aluminate

5.1.1. Einleitung

Erdalkali-Aluminate sind eine wichtige Klasse lumineszierender Materialien, die seit in letzten Jahrzehnten zunehmend in Leuchtstofflampen und Plasmabildschirmen verwendet werden. Die verschiedenen Verbindungen der Aluminate zeichnen sich durch ihre gute thermische Stabilität sowie stabile physikalische und chemische Eigenschaften aus. Zu diesen binären Erdalkali-Aluminaten gehören beispielsweise Erdalkali-Monoaluminat MA_2O_4 und -hexaaluminat $MA_{12}O_{19}$. In der vorliegenden Arbeit werden ausschließlich Erdalkali-Monoaluminat betrachtet.

Die Struktur von MA_2O_4 ($M = Ca, Sr, Ba$) besteht aus einem dreidimensionalen Gerüst von AlO_4 -Tetraedern, wobei jeder Sauerstoff mit den entsprechenden zwei Aluminiumionen geteilt wird, sodass jedes Tetraeder eine negative Nettoladung besitzt. Ladungsausgleich wird durch die zweiwertigen Kationen erreicht, welche die Zwischengitterplätze innerhalb des Wirtsgitters besetzen. Die Strukturen der Erdalkali-Aluminate wurden in der Literatur von mehreren Autoren beschrieben. Calciumaluminat kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe $P2_1/n$ [49, 50]. Eine metastabile orthorhombische Modifikation wurde von Raab und Pöllmann bei einer Temperatur von 900 °C synthetisiert [51]. $SrAl_2O_4$ kristallisiert monoklin in $P2_1$ oder $P2_1/n$ bei Raumtemperatur und durchläuft einen Phasenübergang von der monoklinisch verzerrten Struktur zur hexagonalen Tridymitstruktur bei etwa 650 °C [52]. $BaAl_2O_4$ kristallisiert in einem hexagonalen Kristallgitter [53, 54].

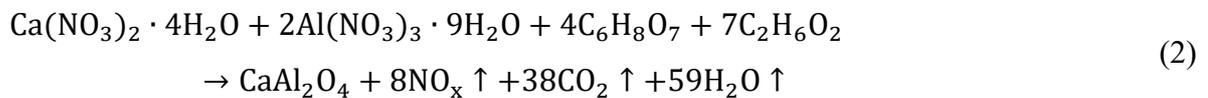
Nach dem ersten Bericht von Frohlich aus dem Jahr 1946 über die Möglichkeit der Verwendung von Strontium-Aluminat als Wirtsgitter ist das Interesse an den mit seltenen Erden dotierten Erdalkali-Aluminaten weiterhin sehr groß. Dieses hohe Interesse ist im Wesentlichen auf die hohe Lumineszenzeffizienz unter UV-Anregung sowie die Fähigkeit, ihre Phosphoreszenz über mehrere Stunden aufrechtzuerhalten, zurückzuführen. In Arbeiten von Matsuzawa et al. [55] zu $SrAl_2O_4:Eu^{2+},Dy^{3+}$ aus dem Jahr 1996 ist bspw. ein Nachleuchten von bis zu 10 Stunden dokumentiert. Seitdem versucht eine Vielzahl von Autoren den Mechanismus der lang anhaltenden Phosphoreszenz dieser Materialien nachzuvollziehen [56].

In der vorliegenden Arbeit wurden MA_2O_4 ($M = Ca, Sr, Ba$) mittels Pechini-Methode reinphasig synthetisiert und anschließend mit Sm^{3+} bzw. Dy^{3+} dotiert. Anhand der

Untersuchung der Lumineszenzeigenschaften kann anschließend die optimale Konzentration des jeweiligen Aktivators festgelegt werden.

5.1.2. Synthese und Charakterisierung von Erdalkali-Aluminaten

Die Erdalkali-Aluminate MA_2O_4 ($M = Ca, Sr, Ba$) wurden mittels Pechini-Methode synthetisiert. In Tab. 10 sind die Synthesebedingungen der jeweiligen Phase aufgeführt. Die chemische Reaktionsgleichung für die Pechini-Methode ist beispielhaft für die Synthese von Calciumaluminat in Formel (2) dargestellt. Die Molverhältnisse von Erdalkalikalium, Zitronensäure und Ethylenglykol von 1:4:7 für die Polykondensationsreaktion wurden in der Formel berücksichtigt.



Tab. 10: Bedingungen für die Synthese von MA_2O_4 ($M = Ca, Sr, Ba$)

Phase	Sintertemperatur	Gesamte Sinterzeit
$CaAl_2O_4$	1200 °C	6 h
$SrAl_2O_4$	1200 °C	6 h
$BaAl_2O_4$	1200 °C	6 h

Calciumaluminat kristallisiert im monoklinen System in der Raumgruppe $P2_1/n$. Das gemessene Röntgenpulverdiffraktogramm (Abb. 14) zeigt eine gute Übereinstimmung mit Literaturdaten (ICDD 01-070-0134 [57]). Die verfeinerten Gitterparameter betragen $a = 8,700(7) \text{ \AA}$, $b = 8,091(2) \text{ \AA}$, $c = 17,478(5) \text{ \AA}$ und $\beta = 119,64(8)^\circ$. Die Calciumatome befinden sich auf drei verschiedenen Gitterplätzen Ca1, Ca2 und Ca3 in der Kristallstruktur. In Abb. 15 sind die verschiedenen Positionen von Calcium dargestellt. Ca1 und Ca2 sind von sechs und Ca3 von neun Sauerstoffatomen umgeben.

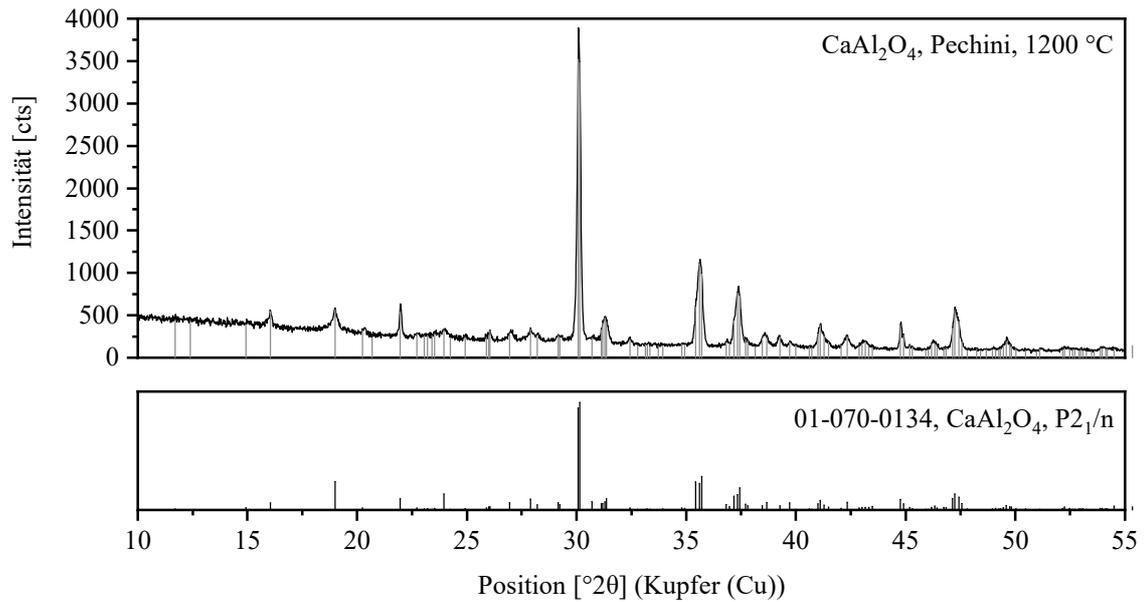


Abb. 14: Röntgendiffraktogramm von CaAl_2O_4

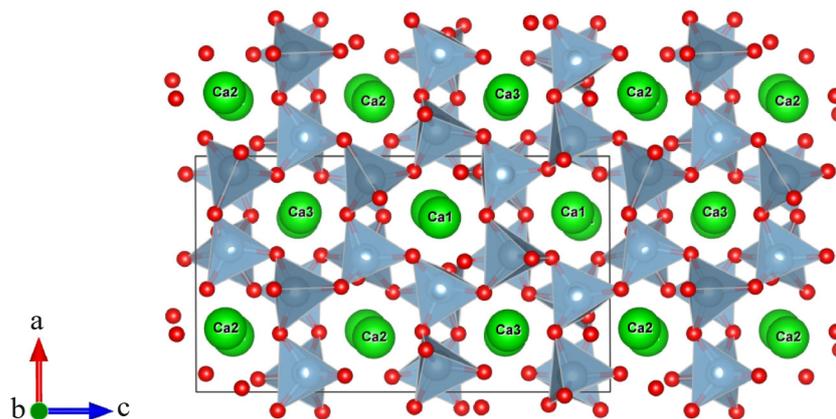


Abb. 15: Kristallstruktur von CaAl_2O_4

Abb. 16 zeigt das Röntgendiffraktogramm von Strontiumaluminat bei Synthesetemperaturen zwischen 900 °C und 1200 °C. Bei 900 °C ist bei einem Winkel 2θ von 32,016 ° noch unreaktiertes Al_2O_3 zu sehen. Dieses verschwindet mit steigender Sintertemperatur, ab 1100 °C erhält man das reinphasige SrAl_2O_4 . Es kristallisiert in einer monoklinen Struktur mit der Raumgruppe $P2_1$ (ICDD 01-074-0794 [58]). Die verfeinerten Gitterparameter betragen $a = 5,151(2) \text{ \AA}$, $b = 8,833(9) \text{ \AA}$ und $c = 8,444(8) \text{ \AA}$. Das dreidimensionale Netzwerk besteht aus einem AlO_4 -Tetraeder mit großen Hohlräumen, in dem sich die 9-fach koordinierten Atompositionen Sr1 und Sr2 befinden. Die zwei Stellen Sr1 und Sr2 unterscheiden sich lediglich durch eine leichte Verzerrung ihrer quadratischen Ebene (vgl. Abb. 17).

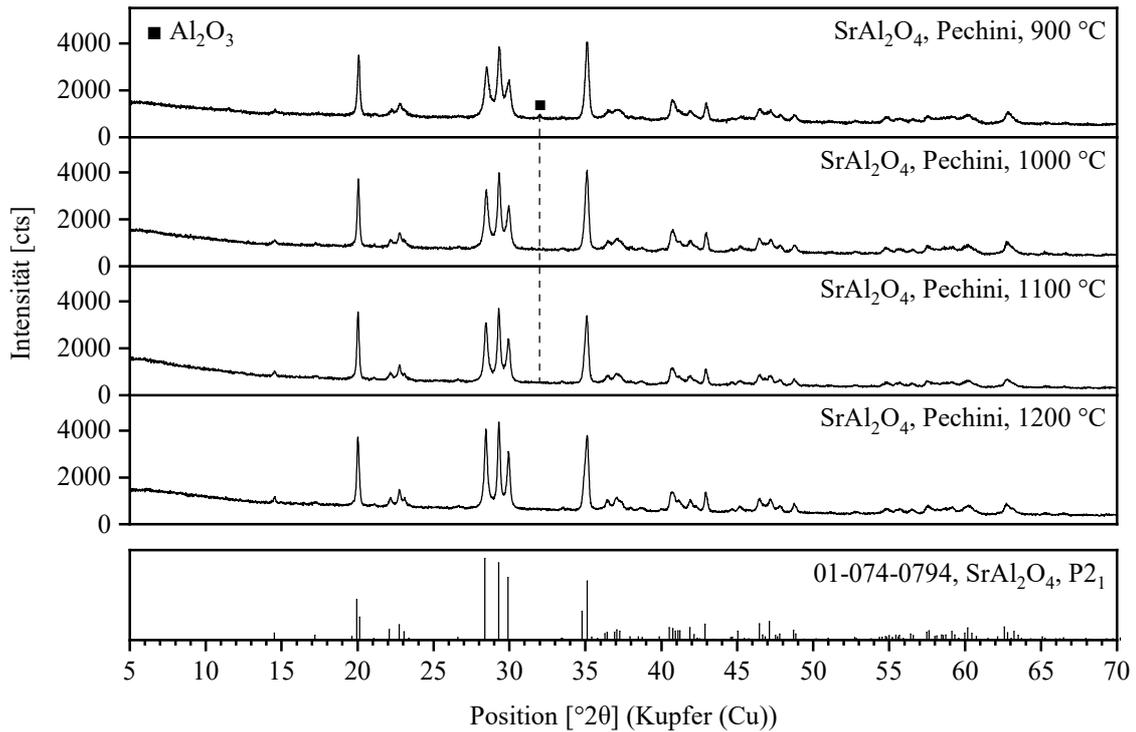


Abb. 16: Röntgendiffraktogramm von SrAl₂O₄ im Bereich 10 - 60 °2θ, Sintertemperatur 900 °C – 1200 °C

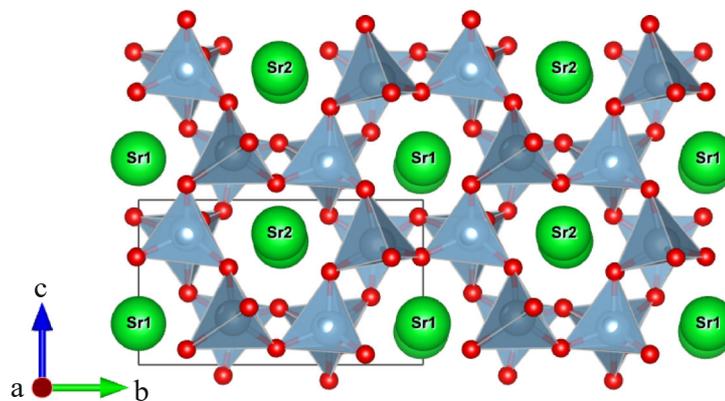


Abb. 17: Kristallstruktur von SrAl₂O₄

Bei der Synthese von Bariumaluminat (siehe Abb. 18) ist bei 900 °C noch eine große Menge Bariumcarbonat vorhanden (u.a. 23,910 °2θ und 24,31 °2θ). Ab 1000 °C verschwinden die Peaks des Bariumcarbonats und bei 1200 °C liegt das reinphasige BaAl₂O₄ (ICDD 01-082-1349 [59]) vor. Es kristallisiert im hexagonalen System mit der Raumgruppe P6₃. Die verfeinerten Gitterparameter betragen $a = 10,449(6)$ Å und $c = 8,793(9)$ Å. In Abb. 19 ist die Kristallstruktur des hexagonalen Wirtsgitters Bariumaluminat mit zwei Ba²⁺-Stellen, die jeweils von neun Sauerstoffen umgeben sind, dargestellt.

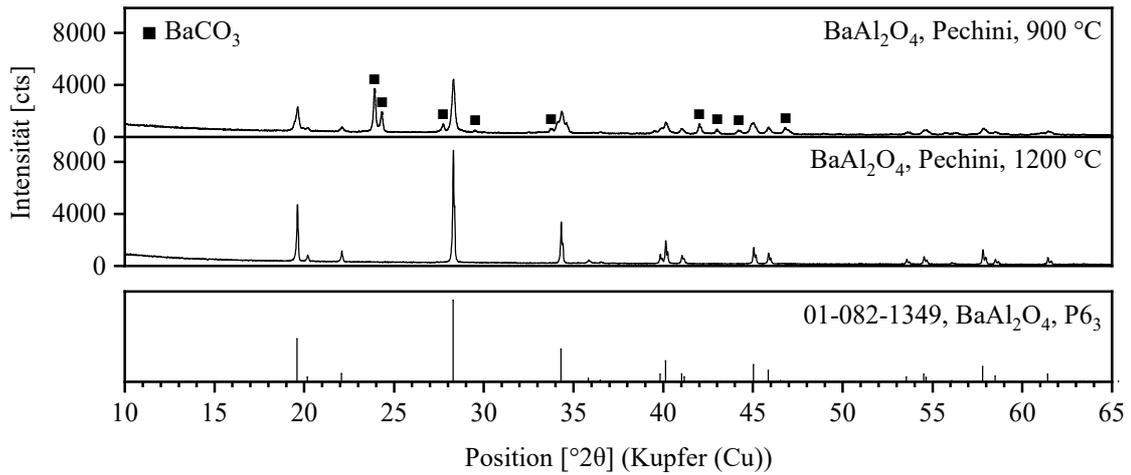


Abb. 18: Röntgendiffraktogramme von BaAl_2O_4 im Bereich 10 - 60 $^\circ 2\theta$, Sintertemperatur 900 $^\circ\text{C}$ – 1200 $^\circ\text{C}$

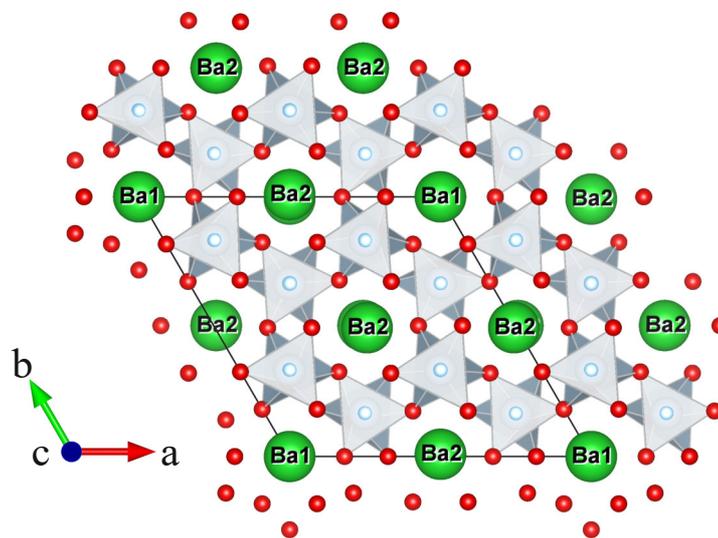
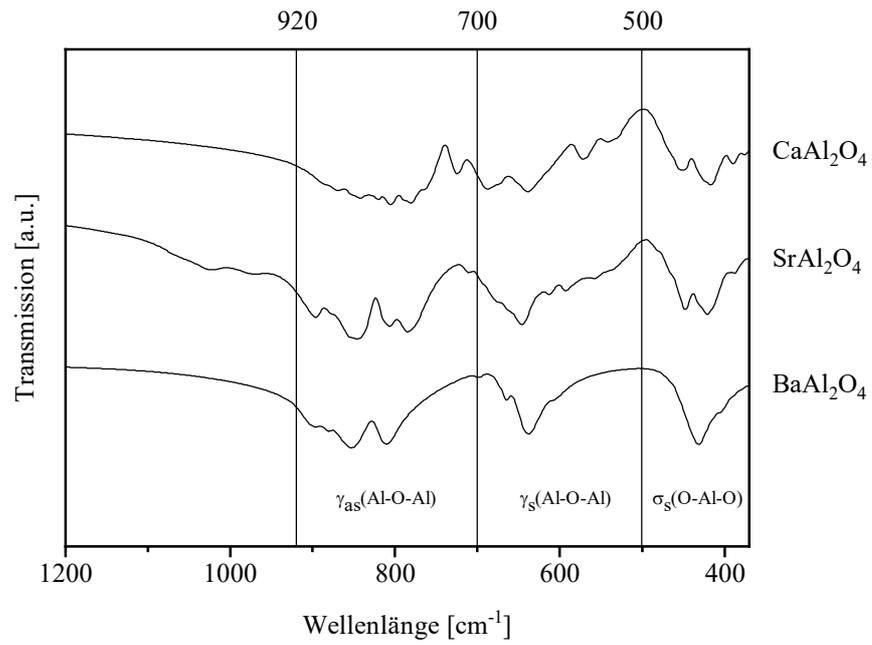
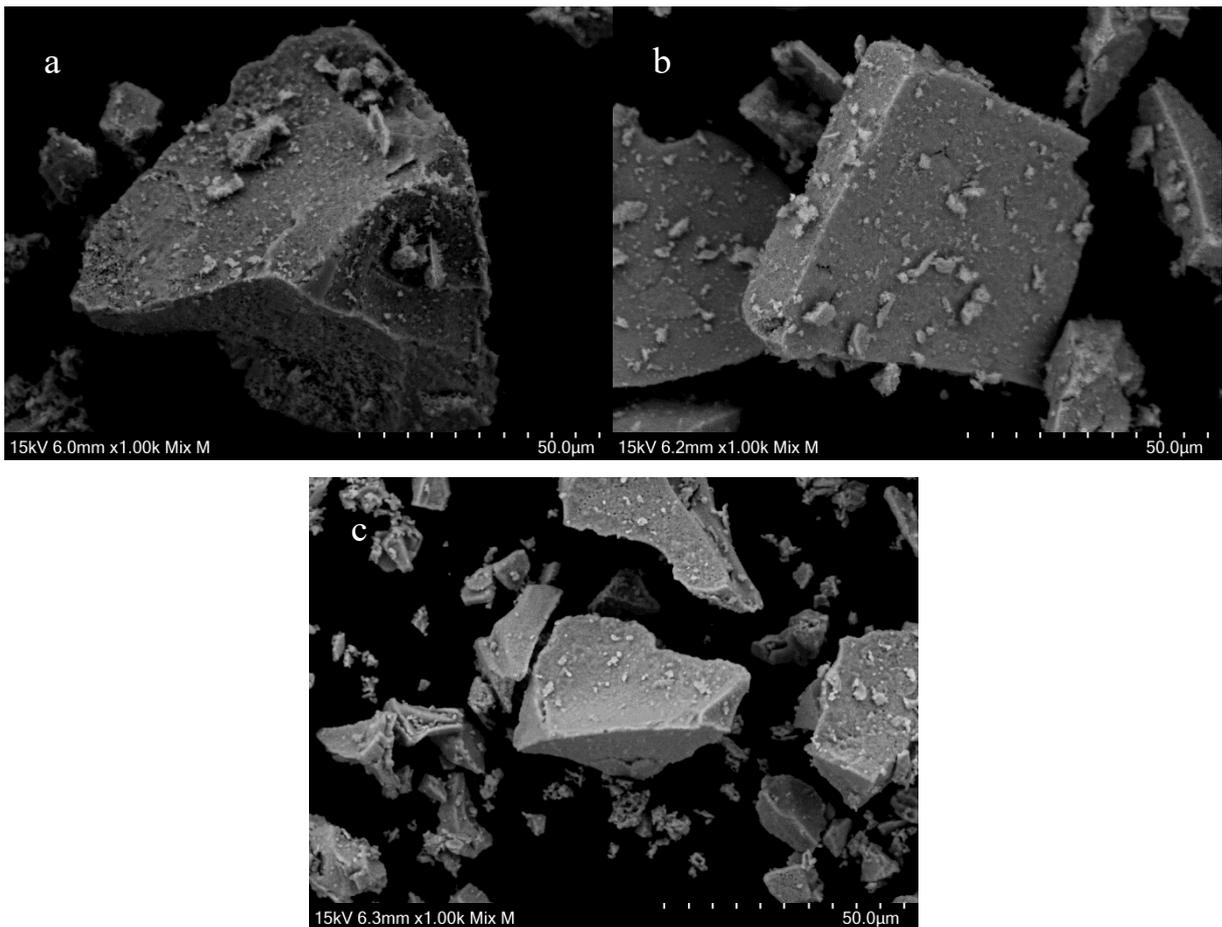


Abb. 19: Kristallstruktur von BaAl_2O_4

Mit Hilfe der FTIR-Spektroskopie wurden die Absorptionsbanden der Wirtsgitter MAl_2O_4 untersucht (siehe Abb. 20). Die Spektren im Bereich zwischen 1200 und 400 cm^{-1} bestehen aus drei Gruppen von Absorptionsbanden, die in den Bereichen 920 bis 700, 700 bis 500 und 500 bis 400 cm^{-1} liegen. Die Zuordnung der Peaks zur asymmetrischen Deformationsschwingung Al-O-Al, symmetrischen Deformationsschwingung Al-O-Al und symmetrischen Streckschwingung O-Al-O erfolgte nach Cheng et al. [60]. Diese Banden stammen aus dem tetraedrisch koordinierten Aluminium.

Abb. 20: FTIR-Spektren von CaAl_2O_4 , SrAl_2O_4 und BaAl_2O_4 Abb. 21: REM-Aufnahmen von a) CaAl_2O_4 , b) SrAl_2O_4 und c) BaAl_2O_4

Die Oberflächenmorphologie der präparierten Pulver wurde mittels REM analysiert. Abb. 21 zeigt die Aufnahmen des Wirtgitters: in allen drei Proben neigen die Partikel zur Agglomeration und bilden kleine Cluster ungleichmäßiger Form und Größe. Die Morphologie der Phosphore ist unregelmäßig mit einem Durchmesser von zwei bis mehrere Mikrometer.

5.1.3. Sm^{3+} -Lumineszenz in MAl_2O_4 (M = Ca, Sr, Ba)

Mit Sm^{3+} dotierte Erdalkali-Aluminate wurden mittels Pechini-Methode bei $1200\text{ }^\circ\text{C}$ synthetisiert. Zur Ladungskompensation wurde Na^+ zugegeben. Abb. 22 zeigt die Röntgendiffraktogramme von mit Sm^{3+} dotierten Erdalkali-Aluminaten. In der ersten Spalte ist das Wirtsgitter CaAl_2O_4 , in der zweiten SrAl_2O_4 und in der dritten BaAl_2O_4 dargestellt. Die erste Zeile enthält die undotierten Wirtsgitter ($x = 0,00$), mit zunehmender Zeilenzahl steigt die Dotierungskonzentration der Wirtsgitter bis $2,00\text{ mol-}\%$ Sm^{3+} ($x = 0,02$).

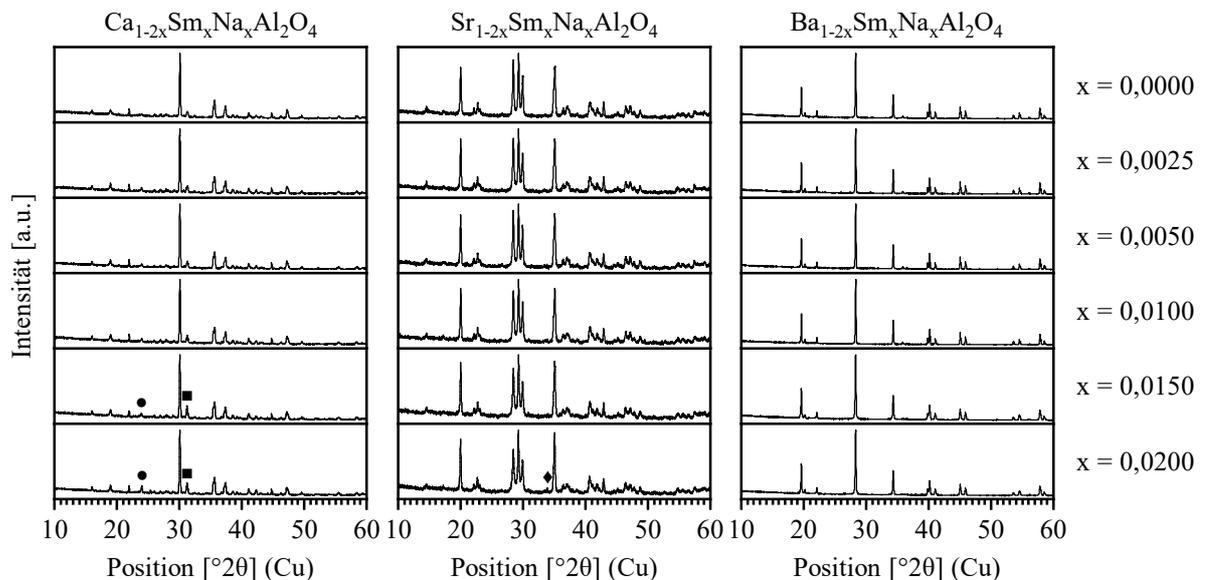


Abb. 22: Röntgendiffraktogramme von mit Sm^{3+} dotierten MAl_2O_4 (● = CaAl_4O_7 ; ■ = $\text{CaSmAl}_3\text{O}_7$; ◆ = SmAlO_3)

Beim Einbau von Samarium in das Wirtsgitter CaAl_2O_4 ließ sich bis zu einem Gehalt von $1,00\text{ mol-}\%$ Sm^{3+} röntgenographisch lediglich CaAl_2O_4 nachweisen, sodass angenommen werden kann, dass Sm^{3+} in die Struktur von CaAl_2O_4 aufgenommen wurde. Bei einem Gehalt von $1,50\text{ mol-}\%$ Sm^{3+} konnten die Nebenphasen $\text{CaSmAl}_3\text{O}_7$ (bei $31,22\text{ }^\circ2\theta$ ($hkl = 211$)) und CaAl_4O_7 (bei $25,42\text{ }^\circ2\theta$ ($hkl = -311$)) nachgewiesen werden. Diese sind in Abb. 22 mit einem Viereck bzw. einem Kreis gekennzeichnet. Die Anregungs- und Emissionsspektren von mit $0,25\text{ mol-}\%$ Sm^{3+} -dotiertem CaAl_2O_4 sind in Abb. 23 dargestellt. Das Anregungsspektrum (graue Linie) wurde für die Emission bei 600 nm und das Emissionsspektrum (schwarze Linie)

für Anregung bei 401 nm aufgenommen. Die Lage der Übergänge ist in guter Übereinstimmung mit Literaturwerten [61, 62]. Die den jeweiligen Anregungs- und Emissionslinien zugewordnenen Übergänge sind in Tab. 11 aufgeführt. Es existieren drei prominente Gruppen von Emissionslinien im Bereich von circa 550 bis 700 nm, die dem intra-4f-Orbitalübergang vom $^4G_{5/2}$ -Niveau zum 6H_J -Niveau ($J = 7/2, 9/2, 11/2$) zugeordnet werden können. Die höchste Emissionsintensität kann auf den Übergang $^4G_{5/2} \rightarrow ^6H_{7/2}$ bei 600 nm zurückgeführt werden. Die Emissionsspektren von $\text{CaAl}_2\text{O}_4:x\text{Sm}$ ($x = 0,0025; 0,0050$ und $0,0100$) im Bereich von 525 bis 675 nm sind in Abb. 24 dargestellt. Die höchste Emissionsintensität konnte bei $\text{CaAl}_2\text{O}_4:0,0100\text{Sm}^{3+}$ erzielt werden.

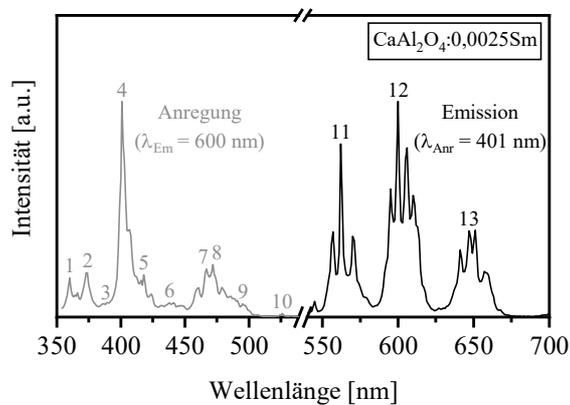


Abb. 23: Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{CaAl}_2\text{O}_4:0,0025\text{Sm}$, Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 11

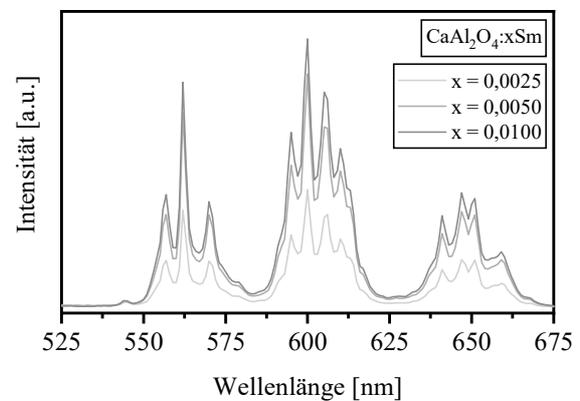
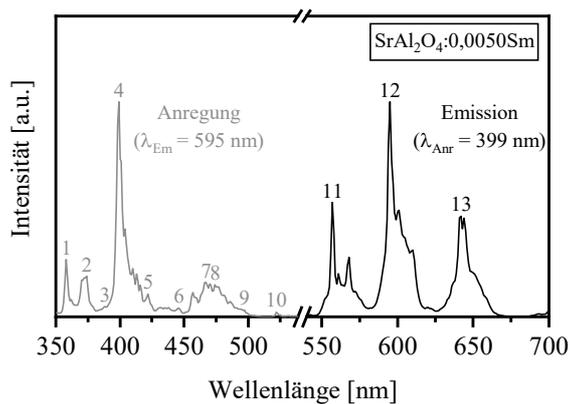
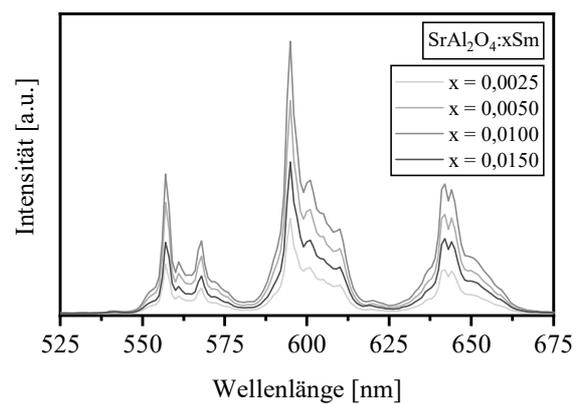


Abb. 24: Emissionsspektren von $\text{CaAl}_2\text{O}_4:x\text{Sm}$ ($\lambda_{\text{Anr}} = 401 \text{ nm}$)

Im Fall von mit Sm^{3+} dotiertem SrAl_2O_4 entsteht die Nebenphase SmAlO_3 (bei $33,91^\circ 2\theta$ ($hkl = 020$)) ab einer Dotierung mit 2,00 mol-% Sm^{3+} . Diese Nebenphase ist in Abb. 22 mit einem Dreieck markiert. Anregungs- und Emissionsspektrum zeigen einen Anregungspeak bei 399 nm ($^6H_{5/2} \rightarrow ^4F_{7/2} + ^6P_{3/2} + ^4K_{11/2}$) bzw. Emissionspeaks bei 557 nm ($^4G_{5/2} \rightarrow ^6H_{5/2}$), 595 nm ($^4G_{5/2} \rightarrow ^6H_{7/2}$) und 642 nm ($^4G_{5/2} \rightarrow ^6H_{9/2}$). Die Zuordnung der weiteren Peaks ist in Tab. 11 aufgelistet. Die Intensitätsverhältnisse der Sm^{3+} -Peaks bei CaAl_2O_4 und SrAl_2O_4 sind im Bereich um 600 nm sehr unterschiedlich. Dies lässt sich u.a. auf Defekte und Symmetrieverzerrungen zurückführen, die entstehen, wenn Sm^{3+} die Position von Ca^+ oder Sr^+ einnimmt. Das Ergebnis der Messung der Fluoreszenzintensitäten von $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ ($x = 0,0025; 0,0050; 0,0100$ und $0,0150$) ist in Abb. 26 dargestellt. Die Fluoreszenzintensität steigt mit zunehmendem Gehalt an Sm^{3+} bis 1,00 mol-%.

Tab. 11: Beobachtete Sm^{3+} -Übergänge in CaAl_2O_4 und SrAl_2O_4 (Nummerierung siehe Abb. 23 und Abb. 25)

Peak Nr.	Übergang	beobachtete Wellenlänge [nm] im Wirtsgitter	
		CaAl_2O_4	SrAl_2O_4
1	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{F}_{9/2}$	360	358
2	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{D}_{5/2}$	373	374
3	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{P}_{7/2}$	390	388
4	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{F}_{7/2} + {}^6\text{P}_{3/2} + {}^4\text{K}_{11/2}$	401	399
5	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{P}_{5/2} + {}^4\text{M}_{19/2}$	418	422
6	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{G}_{9/2} + {}^4\text{I}_{15/2}$	442	446
7	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{F}_{5/2} + {}^4\text{I}_{13/2}$	467	467
8	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{11/2} + {}^4\text{M}_{15/2}$	472	474
9	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{G}_{7/2}$	496	497
10	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{F}_{3/2}$	526	522
11	${}^4\text{G}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{5/2}$	562	557
12	${}^4\text{G}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{7/2}$	600	595
13	${}^4\text{G}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{9/2}$	647	642

Abb. 25: Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{SrAl}_2\text{O}_4:0,0050\text{Sm}$, die Übergänge der nummerierten Peaks sind in Tab. 11 angegebenAbb. 26: Emissionsspektren von $\text{SrAl}_2\text{O}_4:x\text{Sm}$ ($\lambda_{\text{Anr}} = 399 \text{ nm}$)

Im Wirtsgitter BaAl_2O_4 wurde bis zu 2,00 mol-% Sm^{3+} ohne das Entstehen von Nebenphasen eingebaut. Die Röntgendiffraktogramme für diese Synthesereihe sind in Abb. 22 (dritte Spalte) zu sehen. Bei der Fluoreszenzmessung an $\text{BaAl}_2\text{O}_4:0,01\text{Sm}$ konnte keine Fluoreszenz nachgewiesen werden. Die Variation der Samarium-Konzentration auf 0,25 mol-% und 2,00 mol-% veränderte das Ergebnis nicht. Als repräsentatives Beispiel sind die Emissionsspektren von mit 1,00 mol-% Sm^{3+} dotiertem BaAl_2O_4 bei Anregungswellenlängen von 399, 401 und 403 nm gezeigt. Die Verschiebung der Emissionspeaks mit der Änderung der

Anregungswellenlänge zeigt, dass es sich nicht um Emissionspeaks, sondern um Raman-Peaks handelt.

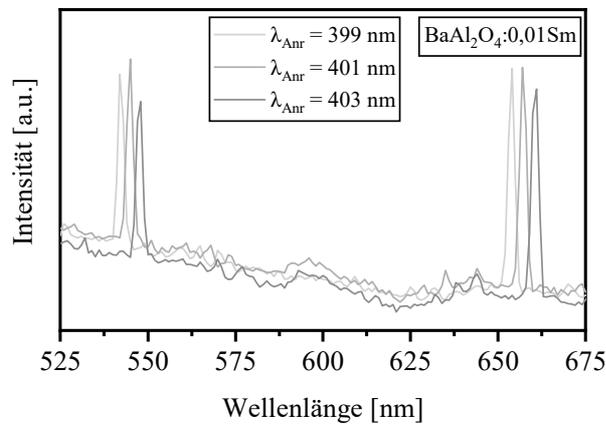


Abb. 27: Emissionsspektren von mit 1,00 mol-% Sm^{3+} dotiertem BaAl_2O_4 bei verschiedenen Anregungswellenlängen

5.1.4. Dy^{3+} -Lumineszenz in MAl_2O_4 (M = Ca, Sr, Ba)

Die Leuchtstoffe $\text{MAl}_2\text{O}_4:\text{xDy}$ ($x = 0,0025; 0,005; 0,01; 0,015$ und $0,02$) wurden mittels Pechini-Methode bei 1200 °C synthetisiert. Zur Ladungskompensation wurde Na^+ zugegeben. Abb. 28 zeigt die Röntgendiffraktogramme der mit Dy^{3+} dotierten Erdalkali-Aluminate MAl_2O_4 , wobei die erste Spalte M = Ca, die zweite Spalte M = Sr und die dritte Spalte M = Ba enthält. In der ersten Zeile sind die undotierten Wirtsgitter ($x = 0,000$) zu sehen. Bei allen drei Wirtsgittern konnten ab einer Dotierung von $1,50$ mol-% Dy^{3+} röntgenographisch Nebenphasen nachgewiesen werden. Dementsprechend erfolgte die Fluoreszenzmessung lediglich bei Dy^{3+} -Dotierungen bis $1,00$ mol-%.

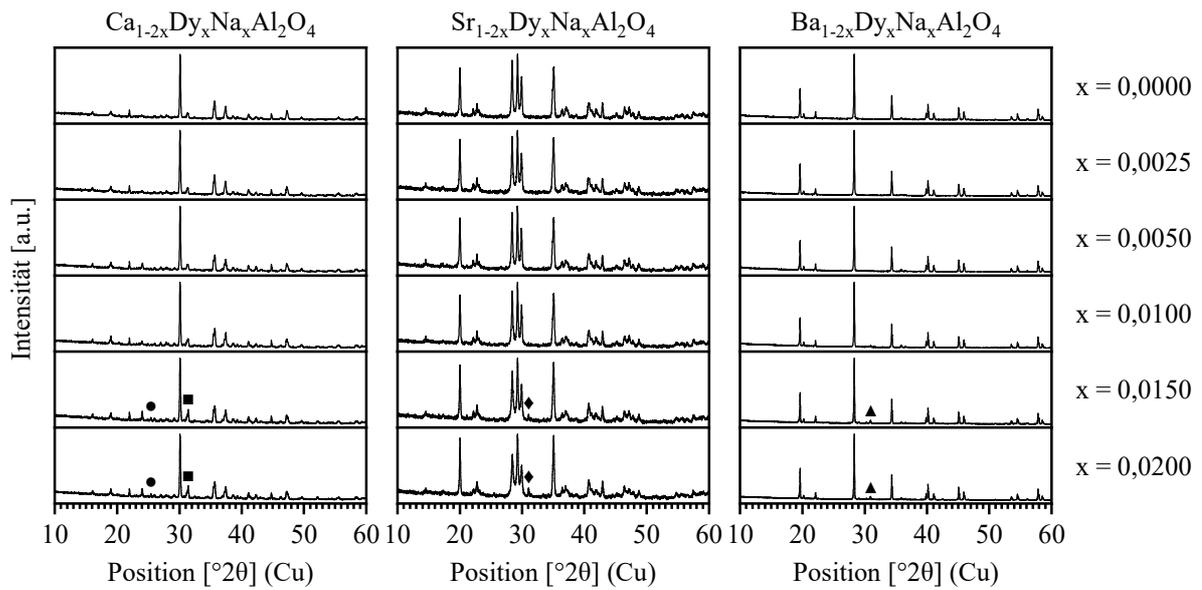


Abb. 28: Röntgendiffraktogramme von mit Dy^{3+} dotiertem MAl_2O_4 (● = CaAl_4O_7 ; ■ = $\text{CaDyAl}_3\text{O}_7$; ◆ = $\text{SrDyAl}_3\text{O}_7$; ▲ = $\text{Ba}_6\text{Dy}_2\text{Al}_4\text{O}_{15}$)

CaAl_2O_4 :Dy-Leuchtstoffe wurden mittels Pechini-Methode bei einer Temperatur von 1200 °C hergestellt. Abb. 29 zeigt die Anregungs- und Emissionsspektren von mit 0,50 mol-% Dy^{3+} dotiertem CaAl_2O_4 . Die charakteristischen Absorptionspeaks von Dy^{3+} befinden sich bei 322, 336, 346, 361, 386 und 424 nm im Anregungsspektrum. Die den jeweiligen Emissionslinien zugeordneten Übergänge sind in Tab. 12 aufgeführt [63–67]. Die Emissionsspektren zeigen zwei intensive Emissionspeaks bei 484 (blau) und 570 nm (gelb) bei einer Anregungswellenlänge von 346 nm, die den elektronischen Übergängen der Dy^{3+} -Ionen (${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{15/2}$ bzw. ${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{13/2}$) entsprechen. Der Übergang ${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{15/2}$ entspricht dem magnetischen Dipolübergang, während die Übergänge ${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{13/2}$ dem erzwungenen elektrischen Dipolübergang (hypersensitiv) entsprechen, der der Auswahlregel ($\Delta S = 0$, $\Delta L = 2$, $\Delta J = 2$) unterliegt [68, 69]. Die optimale Dy^{3+} -Konzentration für CaAl_2O_4 beträgt 1,00 mol-%, wie in Abb. 30 erkennbar ist. Oberhalb von 1,00 mol-% Dy^{3+} konnten Sekundärphasen wie $\text{CaDyAl}_3\text{O}_7$ (bei 31,45 °2θ ($hkl = 211$)) und CaAl_4O_7 (bei 25,42 °2θ ($hkl = -311$)) nachgewiesen werden. Diese sind in Abb. 28 jeweils mit einem Viereck bzw. einem Kreis gekennzeichnet.

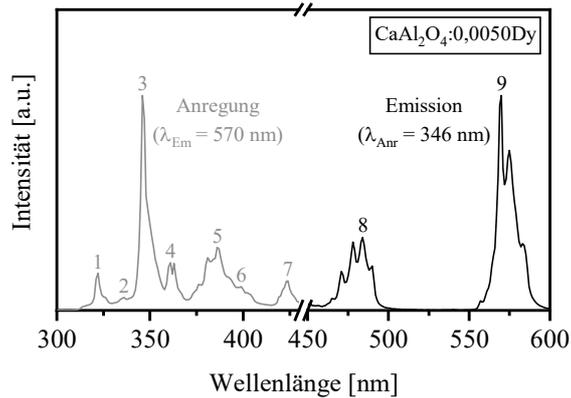


Abb. 29: Anregungs- und Emissionsspektrum von mit 0,50 mol-% Dy^{3+} dotiertem CaAl_2O_4 , Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 12

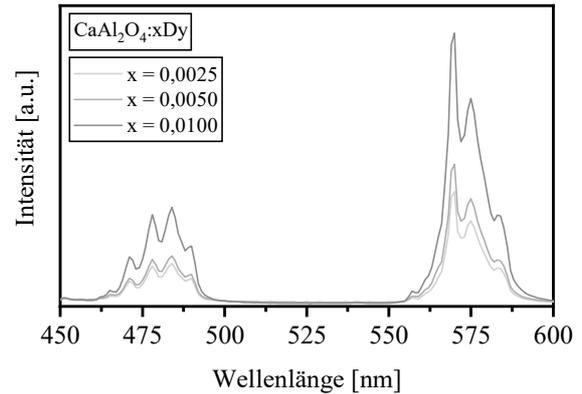


Abb. 30: Emissionsspektren von $\text{CaAl}_2\text{O}_4:\text{xDy}$ ($\lambda_{\text{Anr}} = 346 \text{ nm}$), Raumtemperatur

Tab. 12: Beobachtete Dy^{3+} Übergänge in MAl_2O_4 (M = Ca, Sr, Ba; Nummerierung siehe Abb. 29, Abb. 31, Abb. 34 und Abb. 35)

Peak Nr.	Übergang	beobachtete Wellenlänge [nm] im Wirtsgitter		
		CaAl_2O_4	SrAl_2O_4	BaAl_2O_4
1	${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^4\text{M}_{17/2} + {}^6\text{P}_{3/2}$	322	322	324
2	${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{9/2} + {}^4\text{F}_{5/2}$	336	336	335
3	${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^6\text{P}_{7/2} + {}^4\text{M}_{15/2}$	346	346	349
4	${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{11/2}$	361	361	365
5	${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^4\text{K}_{17/2} + {}^4\text{F}_{7/2} + {}^4\text{I}_{13/2}$	386	385	386
6	${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^4\text{M}_{21/2}$	399	400	400
7	${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^4\text{G}_{11/2}$	424	424	421
8	${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{15/2}$	484	477	479
9	${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{13/2}$	570	568	573

Das Anregungs- sowie Emissionsspektrum von $\text{SrAl}_2\text{O}_4:0,005\text{Dy}$ ist in Abb. 31 abgebildet. Das Anregungsspektrum zeigt Peaks bei 322, 336, 346, 361, 385 und 424 nm und ähnelt dem von $\text{CaAl}_2\text{O}_4:0,005\text{Dy}$ sehr stark. Die zwei Emissionspeaks liegen bei 477 und 568 nm. Die höchste Emissionsintensität konnte bei einer Dotierkonzentration von 1,00 mol-% Dy^{3+} erreicht werden. Bei 1,50 mol-% Dy^{3+} konnte $\text{SrDyAl}_3\text{O}_7$ (bei $31,08^\circ 2\theta$ ($hkl = 211$)) als Sekundärphase nachgewiesen werden.

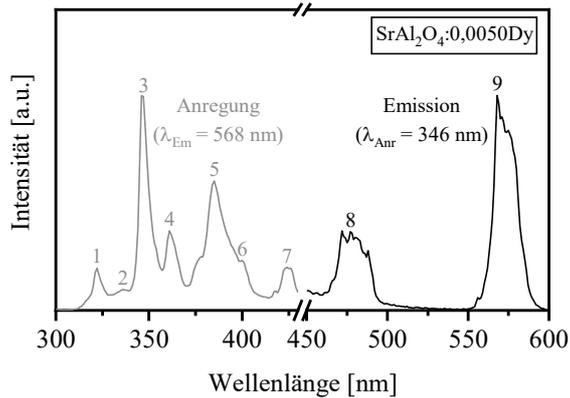


Abb. 31: Anregungs- und Emissionsspektrum von mit 0,50 mol-% Dy^{3+} dotiertem SrAl_2O_4 , Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 12

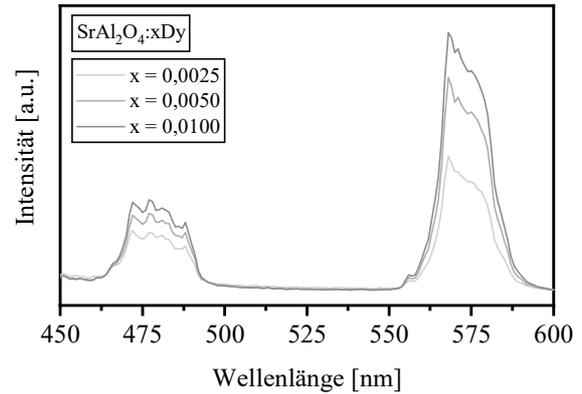


Abb. 32: Emissionsspektren von $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ ($\lambda_{\text{Anr}} = 346 \text{ nm}$), Raumtemperatur

Dy^{3+} -dotiertes BaAl_2O_4 wurde mittels Pechini-Methode bei einer Temperatur von $1200 \text{ }^\circ\text{C}$ synthetisiert. Ab einer Zugabemenge von 1,50 mol-% Dy^{3+} konnte die Entstehung der Nebenphase $\text{Ba}_6\text{Dy}_2\text{Al}_4\text{O}_{15}$ nachgewiesen werden (vgl. Dreieck bei $30,97 \text{ }^\circ 2\theta$ ($hkl = 311$) in Abb. 28).

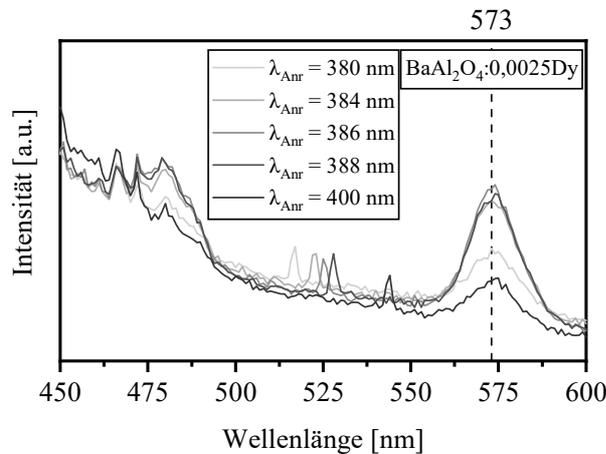


Abb. 33: Emissionsspektren von $\text{BaAl}_2\text{O}_4:0,0025\text{Dy}$ bei unterschiedlichen Anregungswellenlängen, Raumtemperatur

Die Suche nach der optimalen Anregungswellenlänge gestaltete sich schwierig, da die Emissionsintensität sehr gering war. Emissionsspektren von mit 0,25 mol-% Dy^{3+} dotiertem BaAl_2O_4 bei einer Anregungswellenlänge im Bereich von 380 bis 400 nm, die aus einer 3D-Anregungs-Emissionsmessung stammen, sind in Abb. 33 dargestellt. Einige der Emissionspeaks verschieben sich mit zunehmender Anregungswellenlänge, es handelt sich dabei um Raman-Peaks. Der Emissionspeak bei 573 nm verschiebt sich bei Änderung der Anregungswellenlänge nicht, lediglich die Intensität variiert. Das Anregungsspektrum bei

$\lambda_{Em} = 573 \text{ nm}$ (vgl. Abb. 34) zeigt ein Maximum bei 386 nm, das mit früheren Anregungsmessungen übereinstimmt. Die Zuordnung der Peaks ist in Tab. 12 aufgelistet. Die Messung des mit 0,25 mol-%, 0,50 mol-% und 1,00 mol-% Dy^{3+} dotierten BaAl_2O_4 resultierte in einer Abnahme der Emissionsintensität mit zunehmender Dotierungskonzentration. Die höchste Emissionsintensität konnte bei einem Gehalt von 0,25 mol-% Dy^{3+} erreicht werden.

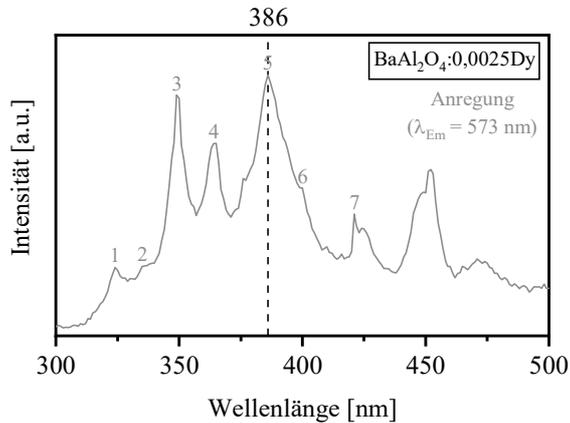


Abb. 34: Anregungsspektrum von $\text{BaAl}_2\text{O}_4:0,0025\text{Dy}$ mit ($\lambda_{Em} = 573 \text{ nm}$), Raumtemperatur

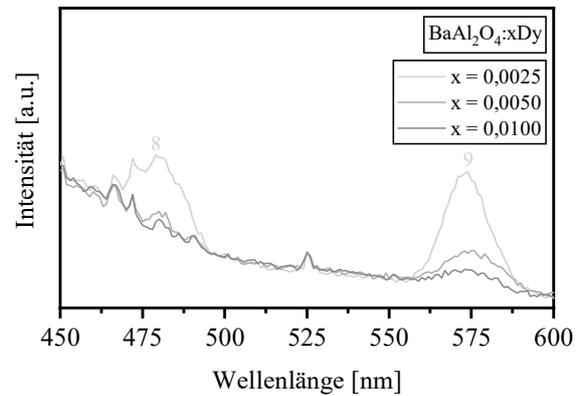


Abb. 35: Emissionsspektren von $\text{BaAl}_2\text{O}_4:x\text{Dy}$ ($\lambda_{Anr} = 386 \text{ nm}$), Raumtemperatur

5.1.5. Zusammenfassung und Diskussion

Die Erdalkali-Aluminate MAl_2O_4 ($\text{M} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) wurden reinphasig mittels Pechini-Methode synthetisiert. Die Vorteile der Pechini-Methode spiegeln sich in den erforderlichen Synthesebedingungen wider. Bei der klassischen Festkörpersynthese werden zum Erreichen eines guten Syntheseergebnisses Temperaturen von bis zu $1650 \text{ }^\circ\text{C}$ über einen Zeitraum von bis zu 72 h benötigt [70]. Die hervorragende Homogenisierung zu Beginn der Synthese ist ein entscheidender Faktor für die kürzere Gesamtsinterzeit und niedrigere Sintertemperatur. Die Röntgendiffraktogramme bestätigten die monokline Struktur von CaAl_2O_4 und SrAl_2O_4 mit der Raumgruppe $\text{P}2_1/n$ (Nr. 14) bzw. $\text{P}2_1$ (Nr. 4) sowie die hexagonale Struktur für BaAl_2O_4 mit der Raumgruppe $\text{P}6_3$ (Nr. 173). Mit Hilfe von FTIR konnte weiterhin die tetraedrische Anordnung von Aluminium in den Wirtsgittern anhand der charakteristischen Al-O-Schwingungen bestätigt werden.

Bei der Dotierung der Wirtsgitter der Erdalkali-Aluminate mit Samarium und Dysprosium wurde Ladungsausgleich durch den Einsatz von einwertigem Natrium erreicht. In der Literatur kommen auch weitere Alkalimetalle wie Lithium und Kalium zum Einsatz. Dabei wurde festgestellt, dass die Wahl des Kations zum Ladungsausgleich Auswirkung auf die

Lumineszenzeigenschaften der Leuchtstoffe hat [71–74]. Natrium wurde aufgrund seines zu Erdalkalimetallen ähnlichen Ionenradius (166 pm) gewählt.

Tab. 13: Zusammenfassung der Synthese- und Lumineszenzeigenschaften der Leuchtstoffe $\text{MAl}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ und $\text{MAl}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ (M = Ca, Sr, Ba)

Wirtsgitter	Aktivator	optimale λ_{Anr} [nm]	Aktivatorkonzentration [mol-%]				
			0,25	0,50	1,00	1,50	2,00
CaAl_2O_4	Sm^{3+}	401			Max.	NP: CaAl_4O_7 ; $\text{CaSmAl}_3\text{O}_7$	
SrAl_2O_4	Sm^{3+}	399			Max.		NP: SmAlO_3
BaAl_2O_4	Sm^{3+}	-	n. d.				
CaAl_2O_4	Dy^{3+}	346			Max.	NP: CaAl_4O_7 ; $\text{CaDyAl}_3\text{O}_7$	
SrAl_2O_4	Dy^{3+}	346			Max.	NP: $\text{SrDyAl}_3\text{O}_7$	
BaAl_2O_4	Dy^{3+}	386	Max.			NP: $\text{Ba}_6\text{Dy}_2\text{Al}_4\text{O}_{15}$	

NP: Nebenphase

grau hinterlegt: Fluoreszenz detektiert

n. d.: keine Fluoreszenz detektiert

Max.: maximale Fluoreszenzintensität

Die Dotierung der Calcium-, Strontium- und Bariummonoaluminate mit dreiwertigem Samarium bzw. Dysprosium erfolgte mittels Pechini-Methode bei 1200 °C für 6 h. Die maximale Konzentration der Seltenen Erden betrug 2,00 mol-%. Dabei konnte, mit Ausnahme von $\text{BaAl}_2\text{O}_4:\text{Dy}$, die Entstehung von Sekundärphasen beobachtet werden. Ab einer Dotierung mit 1,50 mol-% wurden bei $\text{CaAl}_2\text{O}_4:\text{Sm}$, $\text{CaAl}_2\text{O}_4:\text{Dy}$, $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ und $\text{BaAl}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ Nebenphasen wie bspw. $\text{CaSmAl}_3\text{O}_7$ und CaAl_4O_7 detektiert. Bei $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ konnte erst ab einem Gehalt von 2,00 mol-% die Entstehung von SmAlO_3 festgestellt werden. Der Abgleich der erzielten Ergebnisse mit Literaturdaten gestaltet sich aufgrund der schlechten Veröffentlichungslage schwierig. Bei den meisten dokumentierten Ergebnissen wurde die Dotierungskonzentration auf 1,00 mol-% festgelegt und die Lumineszenzeigenschaften studiert [70]. Lumineszenzmessungen erfolgten lediglich an röntgenographisch reinphasigen Leuchtstoffen, sodass sich die Emissionen einem Aktivator-Ion im bestimmtem Wirtsgitter zuordnen lassen.

Die optimale Anregungswellenlängen betragen für $\text{CaAl}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ 401 nm und für $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ 399 nm. Diese entsprechen dem Übergang ${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{F}_{7/2} + {}^6\text{P}_{3/2} + {}^4\text{K}_{11/2}$ von Sm^{3+} . Beide Emissionsspektren zeigen, dass der magnetische Dipolübergang (ca. 600 nm, ${}^4\text{G}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{7/2}$) intensiver ist als der elektrische Dipolübergang (ca. 645 nm, ${}^4\text{G}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{9/2}$). Dies zeigt, dass Sm^{3+} bei den beiden untersuchten Wirtsgittern hauptsächlich das Symmetriezentrum des Gitters einnimmt. Die maximale Fluoreszenzintensität konnte jeweils bei einer Sm-Konzentration von 1,00 mol-% erzielt werden. Im Gegensatz dazu wurde bei $\text{BaAl}_2\text{O}_4:\text{xSm}$ keine Fluoreszenz

detektiert. In der Literatur wurde BaAl_2O_4 zumeist mit Eu^{2+} und mit weiteren dreiwertigen Seltenen Erden, wie z. B. mit Sm^{3+} , co-dotiert. Dabei ist Eu^{2+} das Lumineszenzzentrum, Sm^{3+} fungiert als Trap bzw. Elektronenfalle, um den Nachleuchteffekt zu erhöhen. Es gibt keine Referenzen über mit Sm^{3+} dotiertes BaAl_2O_4 , mit Ausnahme der Arbeit von Benourджа et al. [75]. Dieser stellte $\text{BaAl}_2\text{O}_4:0,02\text{Sm}$ mittels Festkörpersynthese und Verbrennungssynthese (sol combustion) her. Ähnlich wie in der vorliegenden Arbeit waren die Leuchtstoffe dabei röntgenographisch reinphasig. Die für Sm^{3+} typischen Übergänge im Bereich zwischen 600 und 650 nm wurden bei einer Anregung durch Elektronenstrahlung (Kathodenlumineszenz) detektiert. Der Einfluss der Synthesemethode bzw. Synthesebedingungen auf die Lumineszenzeigenschaften wurde dabei mehrfach betont.

Die optimale Anregungswellenlänge für $\text{CaAl}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ und $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ betrug 346 nm. Die dabei beobachteten intensiven Emissionen im Bereich zwischen 480 und 570 nm entsprechen dem blauen (${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{15/2}$) und gelben (${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{13/2}$) Übergang von Dy^{3+} . Die höchste Emissionsintensität wurde bei den Proben mit einer Dotierung von 1,00 mol-% erreicht. Diese Dotierung stellt gleichzeitig den maximalen Dotierungsgehalt für röntgenographisch reine Phasen dar. Ziyauddin et al. synthetisierten $\text{CaAl}_2\text{O}_4:\text{x}\text{Dy}$ mit einem wesentlich geringeren Dy-Gehalt von 0,01 bis 0,2 mol-% [76]. Die mittels Verbrennungsmethode synthetisierten Leuchtstoffe zeigten eine optimale Dotierungskonzentration von 0,02 mol-%. Das starke Rauschen im Untergrund der Messungen lässt dabei auf generell niedrige Emissionsintensitäten schließen. Da sich sowohl Synthesemethode als auch Synthesetemperatur wesentlich von denen in dieser Arbeit unterscheiden ist ein direkter Vergleich der Ergebnisse nicht sinnvoll.

Das synthetisierte $\text{BaAl}_2\text{O}_4:\text{x}\text{Dy}$ ($x = 0,0025, 0,0050$ und $0,0100$) zeigte generell sehr schwache Emissionen. Bei einer Dotierung mit 0,25 mol-% Dy^{3+} konnte die höchste Intensität gemessen werden. Der Vergleich zur Literatur ist aufgrund der oben erwähnten zusätzlichen Dotierung mit Eu^{2+} nicht möglich. Lediglich die Arbeit von Zhai et al. zu monodotiertem BaAl_2O_4 kann zum Abgleich herangezogen werden. Mittels Verbrennungsmethode wurden 4 mol-% Dy^{3+} in BaAl_2O_4 eingebaut, ohne dass sich die Struktur änderte [77]. Dabei wurde ebenfalls lediglich eine sehr schwache Emission bei einer Anregungswellenlänge von 575 nm detektiert (vgl. 573 nm in dieser Arbeit).

5.2. Erdalkali-Borate

5.2.1. Einleitung

Im Bereich der Erdalkali-Borate existiert eine große Anzahl borhaltiger Oxyanionen. Die drei Baueinheiten, aus denen alle Oxoborate aufgebaut sind, sind die trigonal planare Einheit $(\text{BO}_3)^{3-}$, die tetraedrische Einheit $(\text{BO}_4)^{5-}$ und die planarringförmige Einheit $(\text{B}_3\text{O}_6)^{3-}$. Diese Einheiten können in einer Verbindung entweder isoliert oder miteinander verknüpft vorkommen. So sind bspw. in CaB_2O_4 $(\text{BO}_3)^{3-}$ -Ionen kettenförmig aneinandergereiht, während im $\text{Mg}_2\text{B}_2\text{O}_5$ zwei kondensierte $(\text{BO}_3)^{3-}$ -Gruppen vorliegen [78]. Verbindungen auf Boratbasis sind aufgrund ihrer hervorragenden physikalischen, piezoelektrischen und optischen Eigenschaften von großem Interesse [79–86]. Zu den bekanntesten Verbindungen gehört β - BaB_2O_4 , welches einer der wichtigsten nichtlinearen optischen Kristalle für die Frequenzumwandlung im UV-Bereich, im sichtbaren Bereich und im nahen IR ist.

Für den Einsatz in Leuchtstoffen wurden viele Borate als Wirtsgitter aufgrund ihrer großen Bandlücke, ihrer thermischen und chemischen Stabilität sowie ihrer geringen Herstellungskosten ausgewählt [87–92]. Erwähnenswert dabei sind $(\text{Y,Gd})\text{BO}_3:\text{Eu}^{3+}$, ein bekannter rot-emittierender Leuchtstoff in quecksilberfreien Leuchtstoffröhren und Plasmadisplays, und $\text{SrB}_2\text{O}_4:\text{Pb}^{2+}$ für UV-Lampenanwendungen.

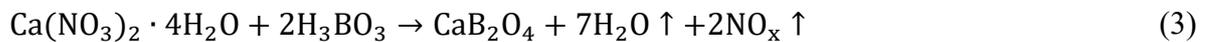
Von dieser Vielzahl an Borat-Verbindungen sind für den folgenden Abschnitt die Erdalkali-Borate mit der allgemeinen Formel MB_2O_4 ($\text{M} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) von Bedeutung. CaB_2O_4 kristallisiert abhängig vom Synthesedruck in vier verschiedenen Modifikationen [93, 94]. Beim Atmosphärendruck ist CaB_2O_4 isostrukturell zu SrB_2O_4 . Es besitzt eine orthorhombische Struktur mit der Raumgruppe Pbcn . Alle Boratome sind in dieser Struktur dreieckig angeordnet; Calcium bzw. Strontium ist jeweils von acht Sauerstoffen umgeben. Bei BaB_2O_4 sind drei Modifikationen bekannt, wobei γ - BaB_2O_4 beim Erhitzen über $600\text{ }^\circ\text{C}$ vollständig in β - BaB_2O_4 umgewandelt wird. β -Bariumborat unterscheidet sich von der α -Modifikation durch die Position der Bariumionen innerhalb des Kristalls. Beide Phasen sind doppelbrechend, jedoch besitzt die α -Phase eine zentrische Symmetrie und weist daher andere nichtlineare Eigenschaften im Vergleich zur β -Phase auf. Die Kristallstruktur der Hochtemperaturphase α - BaB_2O_4 gehört zur Raumgruppe $\text{R}\bar{3}\text{c}$ (Nr. 167) und besteht aus planaren $(\text{B}_3\text{O}_6)^{3-}$ -Ringen [95]. Ähnlich wie die α -Form besitzt die Niedertemperaturphase β -Bariumborat eine trigonale Kristallstruktur mit der Raumgruppe $\text{R}3\text{c}$ (Nr. 161). Die Struktur enthält nahezu planare trimere

Ionen $(B_3O_6)^{3-}$. Jedes Bariumatom wird von acht Sauerstoffatomen benachbarter Anionen koordiniert [96, 97].

Im folgenden Abschnitt werden die Ergebnisse der mittels Festkörpermethode synthetisierten und anschließend mit Sm^{3+} bzw. Dy^{3+} dotierten MB_2O_4 ($M = Ca, Sr, Ba$) dargestellt.

5.2.2. Synthese und Charakterisierung von Erdalkali-Boraten

Die Wirtsgitter der Erdalkali-Metaborate MB_2O_4 ($M = Ca, Sr, Ba$) wurden mittels Festkörpermethode bei Normaldruck synthetisiert. Dabei ist das mehrmalige Aufmahlen der Ausgangsoxide für die Gewinnung der monophasigen Phase entscheidend. Die chemische Reaktionsgleichung für die Festkörpermethode ist beispielhaft für die Synthese von Calciumborat in Formel (3) dargestellt.



Weiterhin darf die Heizrate des Muffelofens bei einer Sintertemperatur von 900 °C 5 °C/min nicht überschreiten, denn schon das kurzzeitige Überheizen des Muffelofens auf 910 °C führt dazu, dass die Erdalkali-Borate im Korundtiegel schmelzen. Die angewendeten Synthesebedingungen sind in Tab. 14 angegeben.

Tab. 14: Bedingungen für die Synthese von MB_2O_4 ($M = Ca, Sr, Ba$)

Phase	Sintertemperatur	Gesamte Sinterzeit	Anzahl der Aufmahlschritte
CaB_2O_4	900 °C	6 h	4
SrB_2O_4	900 °C	8 h	4
BaB_2O_4	900 °C	6 h	4

Der Versuch der Synthese von Calciumborat mittels Pechini-Methode führte dazu, dass der Verlust an leichtflüchtigem Bor im Trockenschrank über Nacht sehr hoch war. Es konnten anschließend lediglich CaO und $Ca_3B_2O_6$ als Synthesergebnis nachgewiesen werden. Bei der Festkörpersynthese wurden stöchiometrische Mengen an $Ca(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$ und H_3BO_3 gründlich pulverisiert und gemischt. Zusätzlich wurde ein Überschuss an H_3BO_3 in Höhe von 5 mol-% hinzugefügt, um das Verflüchtigen des Bors während des Syntheseprozesses im Muffelofen zu kompensieren. In den folgenden Synthesen, welche Borsäure als Ausgangssubstanz beinhalteten, wurde stets ein Überschuss von 5 mol-% H_3BO_3 verwendet.

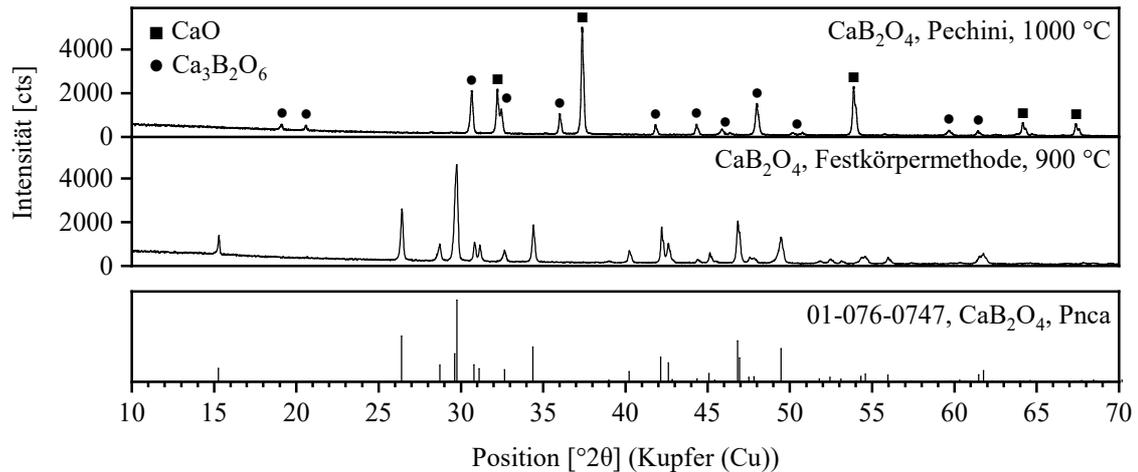


Abb. 36: Röntgendiffraktogramm von CaB_2O_4 , im Bereich 10 - 70 $^\circ 2\theta$, Vergleich der Synthesergebnisse von Pechini- und Festkörpermethode

Das Röntgenpulverdiffraktogramm von Calciumborat (vgl. Abb. 36) stimmt gut mit der ICSD-Karte 01-076-0747 überein [94]. Calciumborat kristallisiert im orthorhombischen Kristallsystem (Raumgruppe $Pbcn$) mit $Z = 4$. Im Gitter ist jedes Ca^{2+} -Ion von acht Sauerstoffatomen umgeben. Drei Sauerstoffatome bilden ein fast gleichseitiges Dreieck um jedes Boratom. Die dreieckigen BO_3^- teilen sich ein Sauerstoffatom und bilden dadurch die $-\text{O}-\text{B}-\text{O}-\text{B}-$ Ketten, die parallel zu $[001]$ entlang der c -Achse verlaufen. Die in die Kette eingebauten Sauerstoffatome sind in Abb. 37 als O2 gekennzeichnet.

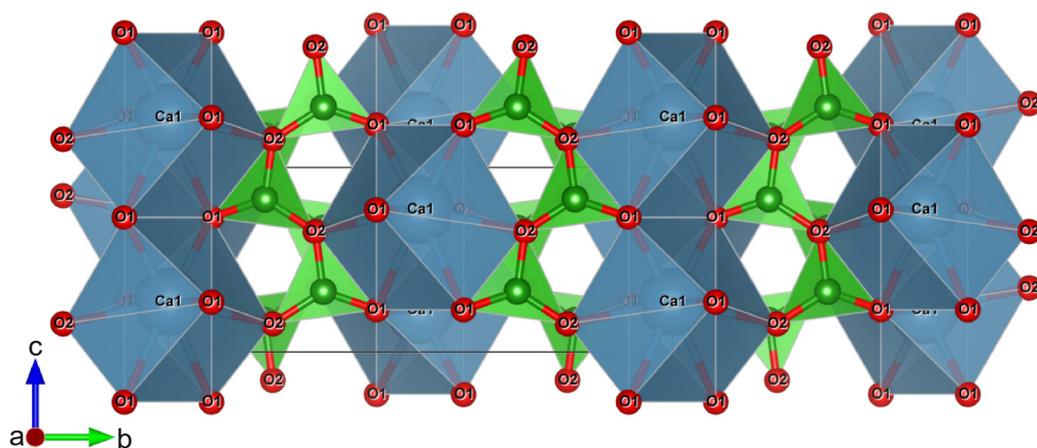


Abb. 37: Kristallstruktur von CaB_2O_4

Die Röntgendiffraktogramme der Synthesversuche des Wirtsgitters Strontiumborat im Temperaturbereich von 700 $^\circ\text{C}$ bis 900 $^\circ\text{C}$ sind in Abb. 38 dargestellt. Bei 700 $^\circ\text{C}$ entstehen das gewünschte Produkt SrB_2O_4 sowie die Nebenprodukte $\text{Sr}_3\text{B}_2\text{O}_6$ und $\text{Sr}_2\text{B}_2\text{O}_5$. Diese

verschwinden mit steigender Temperatur, ab 900 °C liegt reinphasiges Strontiumborat vor. Das Diffraktogramm stimmt mit der Literatur (ICSD: 01-084-2175) überein [98].

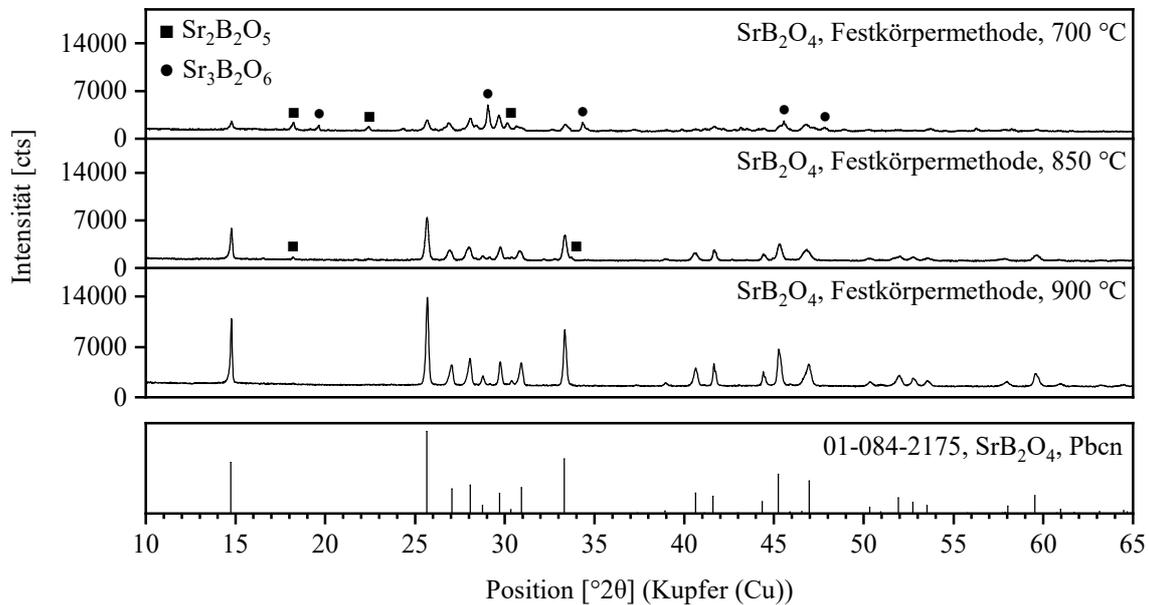


Abb. 38: Röntgendiffraktogramm von SrB₂O₄ im Bereich 10 - 70 °2θ, Sintertemperatur 700 °C – 900 °C

Bei Calciumborat und Strontiumborat handelt es sich um isostrukturelle Verbindungen [99], d.h. sie gehören zum selben Strukturtyp (Pbcn). Vergleicht man die Diffraktogramme der beiden Stoffe, so ist der Hauptpeak von 29,740 °2θ (CaB₂O₄) zu 25,685 °2θ (SrB₂O₄) verschoben. Diese Verschiebung des Diffraktogramms zu kleineren Winkeln ist auf die Zunahme des Zellvolumens zurückzuführen, welches wiederum an den unterschiedlichen Ionenradien von Calcium und Strontium liegt. Die verfeinerten Gitterparameter sind in Tab. 15 angegeben.

Tab. 15: verfeinerte Gitterparameter von CaB₂O₄, SrB₂O₄ und BaB₂O₄

Gitterparameter		CaB ₂ O ₄	SrB ₂ O ₄	BaB ₂ O ₄
Raumgruppe		Pbcn	Pbcn	R3c
Zellvolumen [Å ³]		308,64(6)	342,51(1)	1730,28(9)
V ₀ /Z		77,16	85,63	96,13
Z		4	4	18
Zelle	a [Å]	11,597(4)	11,992(3)	12,528(3)
	b [Å]	4,279(1)	4,329(9)	12,528(3)
	c [Å]	6,219(8)	6,596(1)	12,729(2)
	α [°]	90,00	90,00	90,00
	β [°]	90,00	90,00	90,00
	γ [°]	90,00	90,00	120,00

Die entlang der c-Achse laufenden $(\text{BO}_2)_n$ -Ketten von CaB_2O_4 und SrB_2O_4 wurden mittels FTIR untersucht. Die Zuordnung der Absorptionsbanden, aufgeführt in Tab. 16, erfolgte u.a. nach Rulmont und Almou [99–102]: zwei verschiedene B-O-Valenzschwingungen wurden beobachtet, zum einen in der Region um 1450 cm^{-1} und zum anderen in der Region um 1150 cm^{-1} (siehe Abb. 39). Diese spiegeln die zwei verschiedenen Positionen von Sauerstoff in der Phase wider, die in Abb. 37 mit O1 und O2 bezeichnet sind. Dabei ist O2 der Brückensauerstoff in den langen $(\text{BO}_2)_n$ -Kette. Die unterschiedlichen Bindungslängen B-O1 ($1,321(3)\text{ \AA}$ für CaB_2O_4 und $1,325(1)\text{ \AA}$ für SrB_2O_4) und B-O2 ($1,388(0)\text{ \AA}$ für CaB_2O_4 und $1,394(1)\text{ \AA}$ für SrB_2O_4) sind verantwortlich für die Aufspaltung der B-O-Valenzschwingungen. Weiterhin werden Deformationsschwingungen im Bereich zwischen 770 und 635 cm^{-1} beobachtet.

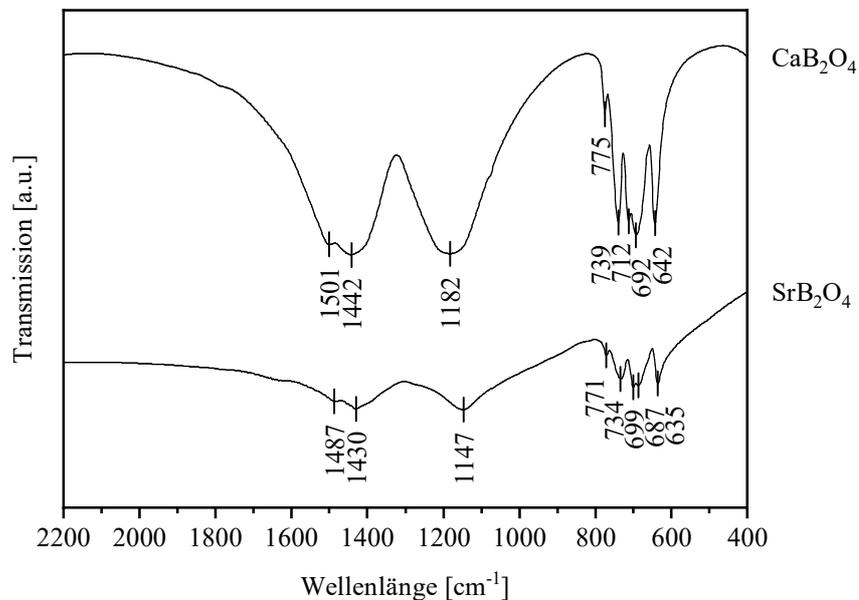


Abb. 39: FTIR-Spektren von CaB_2O_4 und SrB_2O_4

Tab. 16: FTIR-Absorptionsbanden von CaB_2O_4 und SrB_2O_4

Bandenlage [cm^{-1}]		Zuordnung
CaB_2O_4	SrB_2O_4	
1501; 1442	1487; 1430	B-O1 Valenzschwingungen
1182	1147	B-O2 Valenzschwingung (Kette)
775; 739; 712; 692; 642	771; 734; 699; 687; 635	B-O Deformationsschwingungen

Der erste Syntheserversuch zur Herstellung von BaB_2O_4 erfolgte wiederum mittels Pechini-Methode bei einer Sintertemperatur von 1000 °C . Ähnlich wie bei CaB_2O_4 ließen sich im Produkt lediglich BaCO_3 und $\text{Ba}_4\text{B}_2\text{O}_7$ nachweisen, was auf einen starken Verlust an Bor

während der langen Verweilzeit im Trockenschrank zurückzuführen ist. Wie das Röntgenpulverdiffraktogramm (Abb. 40) zeigt, konnte nach der Festkörpersynthese bei 700 °C neben der Hauptphase BaB_2O_4 auch eine kleine Menge an $\text{Ba}_2\text{B}_2\text{O}_5$ gefunden werden, die nach Sinterung bei 900 °C komplett zu BaB_2O_4 weiterreagierte (BaB_2O_4 : ICSD 01-080-1489 [97, 103]). Es handelt sich hierbei um Niedertemperatur-Beta-Borate, die in der Literatur als β -Bariumborate (BBO) bekannt sind [104, 105]. Die verfeinerten Gitterparameter sind in Tab. 15 angegeben. Die synthetisierte Phase BaB_2O_4 hat eine trigonale Kristallstruktur mit der Raumgruppe R3c. Sie ist aus Ba^{2+} -Kationen und $(\text{BO}_3)^{3-}$ -Anionen mit BO_3 als Grundstruktureinheit aufgebaut. In der BO_3 -Einheit wirken die drei Sauerstoffatome als Brückenelement in der Netzwerkverbindung und dehnen sich zu planaren anionischen Ringgruppen $(\text{B}_3\text{O}_6)^{3-}$ aus [83]. Somit ist jedes Bariumatom von acht Sauerstoffatomen umgeben (vgl. Abb. 41).

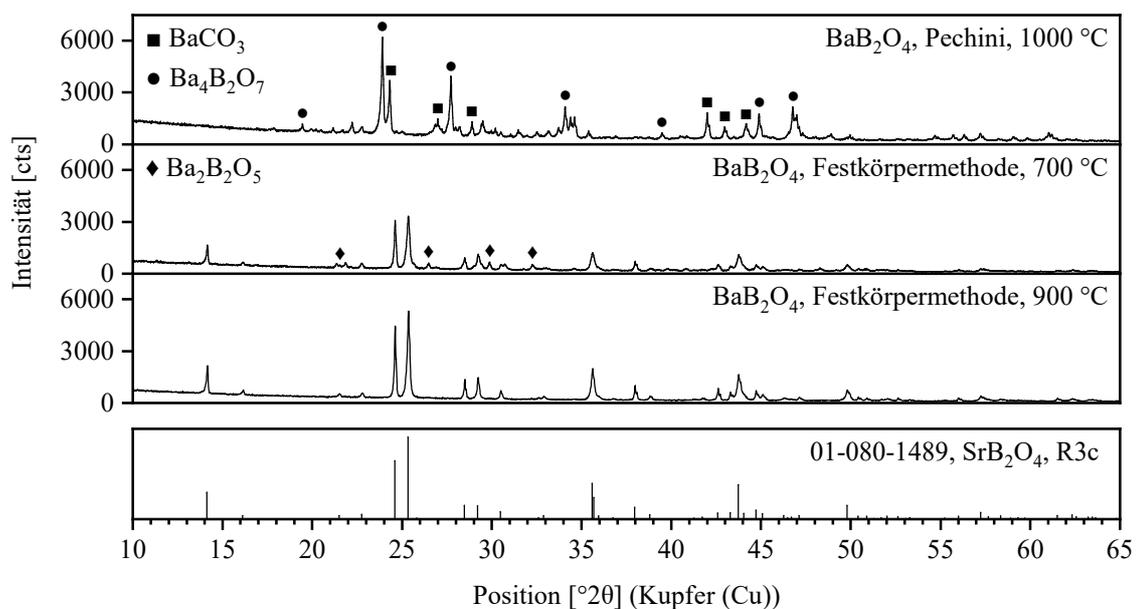
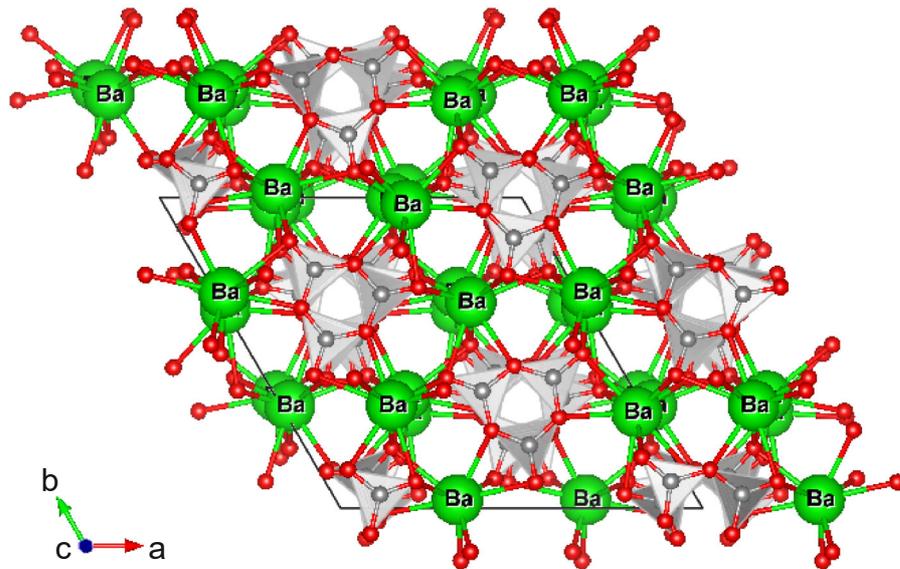
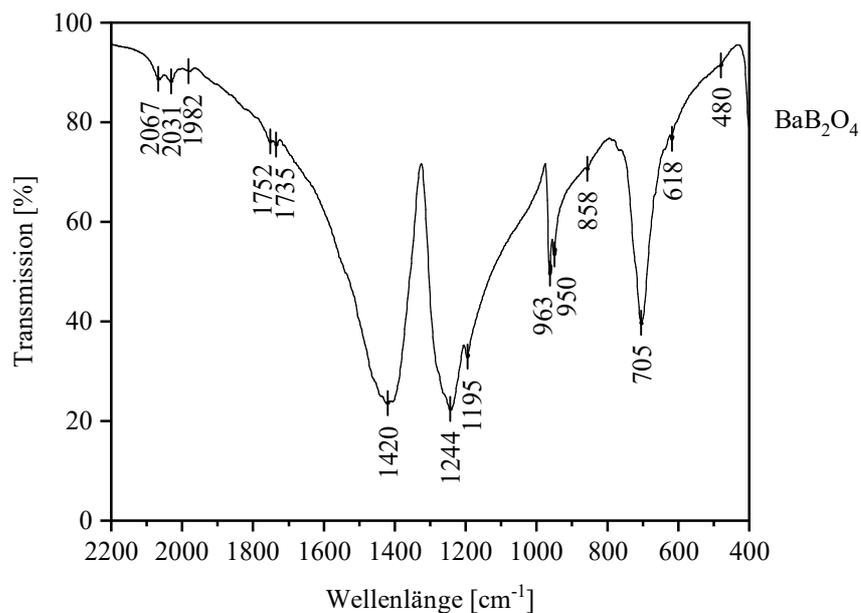


Abb. 40: Röntgendiffraktogramm von BaB_2O_4 im Bereich 10 - 70 ° 2θ

Abb. 41: Kristallstruktur von BaB_2O_4

Das FTIR-Spektrum von Bariumborat ist in Abb. 42 dargestellt. Die Zuordnung der Absorptionsbanden erfolgte nach Babeela et al. und Zhang et al. [80, 106]. Die Banden bei 1244 und 1195 cm^{-1} können der charakteristischen B-O-Valenzschwingung in der $(\text{BO}_3)^{3-}$ -Einheit, die Bestandteil des $(\text{B}_3\text{O}_6)^{3-}$ -Rings ist, zugeordnet werden. Die bei 705 cm^{-1} beobachteten starken Absorptionsbanden sind auf O-B-O-Deformationsschwingung derselben Einheit zurückzuführen. Die Absorptionsspitzen bei 963 und 1420 cm^{-1} können der Valenzschwingung der B-O-Bindungen des Rings zugeordnet werden.

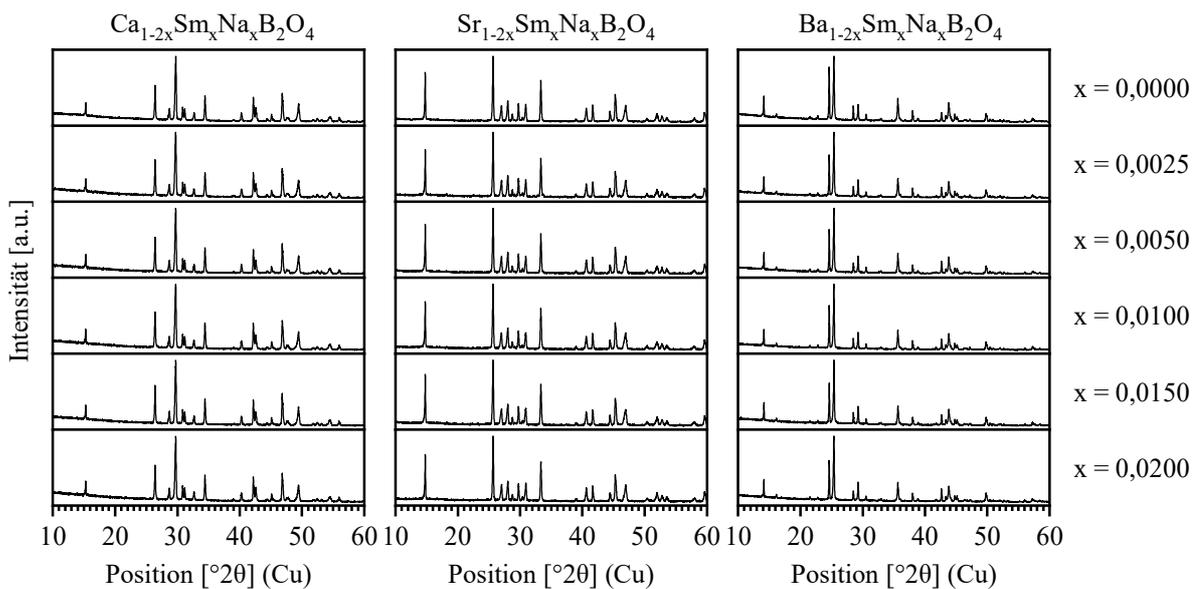
Abb. 42: FTIR-Spektrum von BaB_2O_4

Tab. 17: FTIR-Absorptionsbanden von BaB₂O₄

Bandenlage [cm ⁻¹]	Zuordnung
1420	B-O Valenzschwingung
1244	B-O Valenzschwingung von (B ₃ O ₆) ³⁻ Rings
1195	B-O Valenzschwingung von (B ₃ O ₆) ³⁻ Rings
963	B-O Valenzschwingung
705	B-O Deformationsschwingung von (B ₃ O ₆) ³⁻ Rings

5.2.3. Sm³⁺-Lumineszenz in MB₂O₄ (M = Ca, Sr, Ba)

Unter den Seltenerdmetallen ist Sm³⁺ ein wichtiger Aktivator für die Erzeugung roten Lichts. Die Substitution der zweiwertigen Erdalkalimetalle M²⁺ durch die dreiwertigen Seltenerdmetalle Sm³⁺ erfordert eine Ladungskompensation, die durch die Zugabe von einwertigem Na⁺ erreicht wurde. Die Synthese der Reihe M_{1-2x}Sm_xNa_xB₂O₄ (M = Ca, Sr, Ba und 0,00 < x < 0,02) erfolgte mittels Festkörpermethode bei 900 °C. Abb. 43 zeigt die zugehörigen Röntgendiffraktogramme der Leuchtstoffe. Dabei steht jede Spalte für ein Wirtsgitter: in der ersten Spalte sind die Substitutionen im Wirtsgitter CaB₂O₄, in der zweiten Spalte im Wirtsgitter SrB₂O₄ und in der dritten Spalte im Wirtsgitter BaB₂O₄ dargestellt. Mit zunehmender Zeilenzahl steigt der Dotierungsgehalt mit Sm³⁺. In der ersten Zeile sind die Röntgendiffraktogramme der undotierten Wirtsgitter (x = 0,00) und in der untersten Zeile die der Wirtsgittern mit 2,00 mol-% Sm³⁺ (x = 0,02) zu sehen. Bei allen Wirtsgittern konnte röntgenographisch keine Nebenphase nachgewiesen werden, sodass davon auszugehen ist, dass Sm³⁺ vollständig in die Struktur von MB₂O₄ eingebaut wurde.

Abb. 43: Röntgendiffraktogramme von mit Sm³⁺ dotierten MB₂O₄

Die Anregungs- und Emissionsspektren von $\text{CaB}_2\text{O}_4:0,01\text{Sm}$ sind in Abb. 44 dargestellt. Das Anregungsspektrum wurde bei einer Emissionswellenlänge von 599 nm im Bereich von 350 bis 530 nm aufgenommen. Zu sehen sind die $4f \rightarrow 4f$ -Übergänge des Sm^{3+} -Ions, wobei der Peak bei 401 nm (${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{K}_{11/2}$) der stärkste ist. Das Emissionsspektrum, welches bei einer Anregungswellenlänge von 401 nm aufgenommen wurde, besteht aus Peaks bei 563, 599 und 646 nm, die den Übergangszuständen ${}^4\text{G}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{5/2}$, ${}^4\text{G}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{7/2}$ und ${}^4\text{G}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{9/2}$ des Sm^{3+} -Ions entsprechen [107]. Im Vergleich dazu zeigten auch die Anregungs- und Emissionsspektren der Wirtsgitter SrB_2O_4 (Abb. 46) und BaB_2O_4 (Abb. 48) die charakteristischen $4f \rightarrow 4f$ -Übergänge des Sm^{3+} -Ions. Die Zuordnung der Peaks ist in Tab. 18 aufgeführt [36, 108, 43].

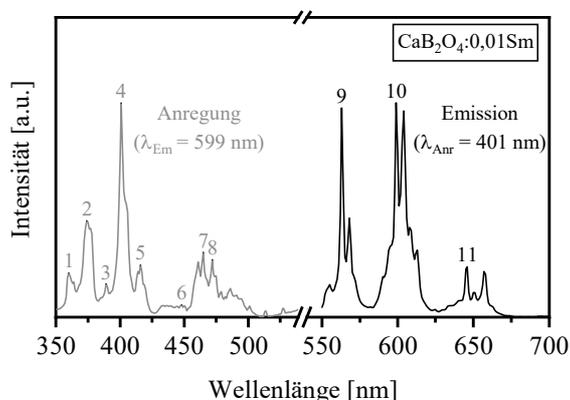


Abb. 44: Anregungs- und Emissionsspektrum von mit 1,00 mol-% Sm^{3+} dotiertem CaB_2O_4 , Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 18

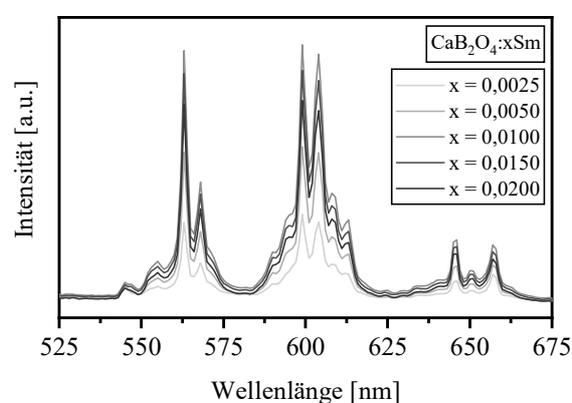


Abb. 45: Emissionsspektren von $\text{CaB}_2\text{O}_4:x\text{Sm}$ ($\lambda_{\text{AnR}} = 401 \text{ nm}$), Raumtemperatur

Tab. 18: Beobachtete Sm^{3+} -Übergänge in MB_2O_4 (M = Ca, Sr, Ba; Nummerierung siehe Abb. 44, Abb. 46 und Abb. 48)

Peak Nr.	Übergang	beobachtete Wellenlänge [nm] in Wirtsgittern		
		CaB_2O_4	SrB_2O_4	BaB_2O_4
1	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{F}_{9/2}$	360	359	361
2	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{D}_{5/2}$	375	374	374
3	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{P}_{7/2}$	389	389	389
4	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{F}_{7/2} + {}^6\text{P}_{3/2} + {}^4\text{K}_{11/2}$	401	400	401
5	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{P}_{5/2} + {}^4\text{M}_{19/2}$	416	413	418
6	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2} + {}^4\text{G}_{9/2}$	448	440	437
7	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{F}_{5/2} + {}^4\text{I}_{13/2}$	465	460	461
8	${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{11/2} + {}^4\text{M}_{15/2}$	472	472	477
9	${}^4\text{G}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{5/2}$	563	562	561
10	${}^4\text{G}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{7/2}$	599	602	595
11	${}^4\text{G}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{9/2}$	646	644	477

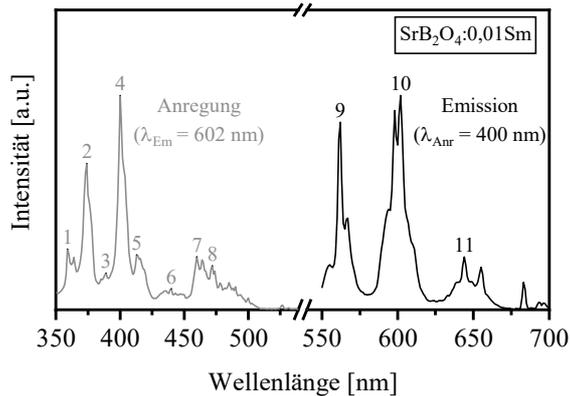


Abb. 46: Anregungs- und Emissionsspektrum von mit 1,00 mol-% Sm^{3+} dotiertem SrB_2O_4 , Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 18

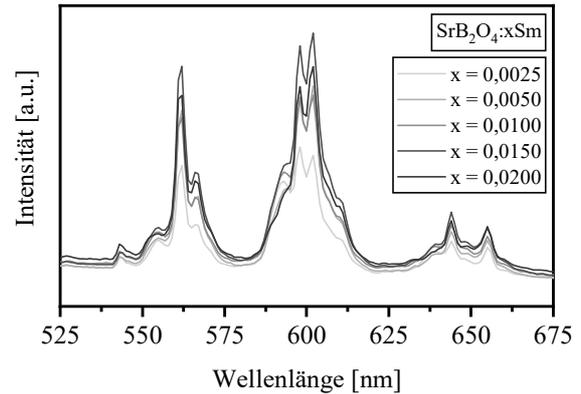


Abb. 47: Emissionsspektren von $\text{SrB}_2\text{O}_4:\text{xSm}$ ($\lambda_{\text{Anr}} = 400 \text{ nm}$)

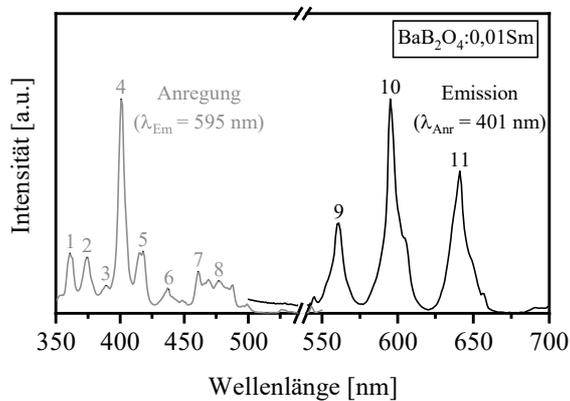


Abb. 48: Anregungs- und Emissionsspektrum von mit 1,00 mol-% Sm^{3+} dotiertem BaB_2O_4 , Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 18

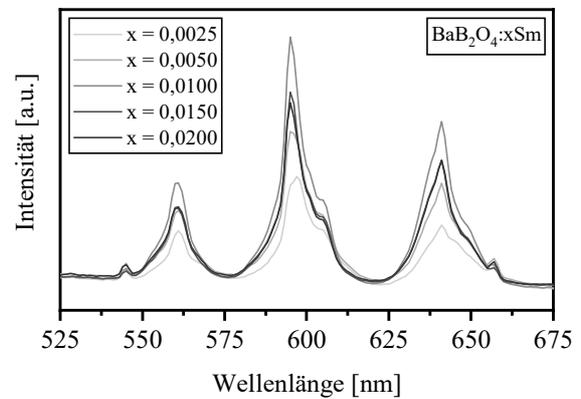


Abb. 49: Emissionsspektren von $\text{BaB}_2\text{O}_4:\text{xSm}$ ($\lambda_{\text{Anr}} = 401 \text{ nm}$)

Eine Serie von Erdalkali-Boraten mit unterschiedlichem Sm^{3+} -Gehalt wurde synthetisiert, um die Auswirkung des Samariumgehalts auf die Lumineszenzeigenschaften von $\text{MB}_2\text{O}_4:\text{xSm}^{3+}$ zu untersuchen. Dabei wurde die Konzentration von Sm^{3+} im Bereich zwischen 0,25 und 2,00 mol-% variiert. Die Emissionsspektren zeigen, dass die Emissionsintensität anfangs mit steigender Sm^{3+} -Konzentration zunimmt. Sobald die optimale Konzentration erreicht ist nimmt die Intensität mit weiterem Einbau von Sm^{3+} wieder ab. Dies ist auf den Quencheffekt zurückzuführen, welcher hauptsächlich durch die strahlungsfreien Energietransfers zwischen Sm^{3+} -Ionen verursacht wird. Mit zunehmender Konzentration wird der Abstand zwischen den Sm^{3+} -Ionen kleiner, was zu einer höheren Wahrscheinlichkeit derartiger Energieübertragungen führt. Die maximale Intensität wird bei $\text{CaB}_2\text{O}_4:0,010\text{Sm}$ (Abb. 45), $\text{SrB}_2\text{O}_4:0,015\text{Sm}$ (Abb. 47) und $\text{BaB}_2\text{O}_4:0,010\text{Sm}$ (Abb. 49) erreicht.

5.2.4. Dy³⁺-Lumineszenz in MB₂O₄ (M = Ca, Sr, Ba)

Aufgrund des angeregten Niveaus ⁴F_{9/2} sind dreiwertige Seltenerdionen Dy³⁺ ausgezeichnete Aktivatoren in vielen lumineszierenden Materialien. In dieser Arbeit wurde Dy³⁺ bis zu einem Gehalt von 2,00 mol-% in Erdalkali-Borate CaB₂O₄, SrB₂O₄ und BaB₂O₄ eingebaut. Zur Ladungskompensation wurde Na⁺ verwendet.

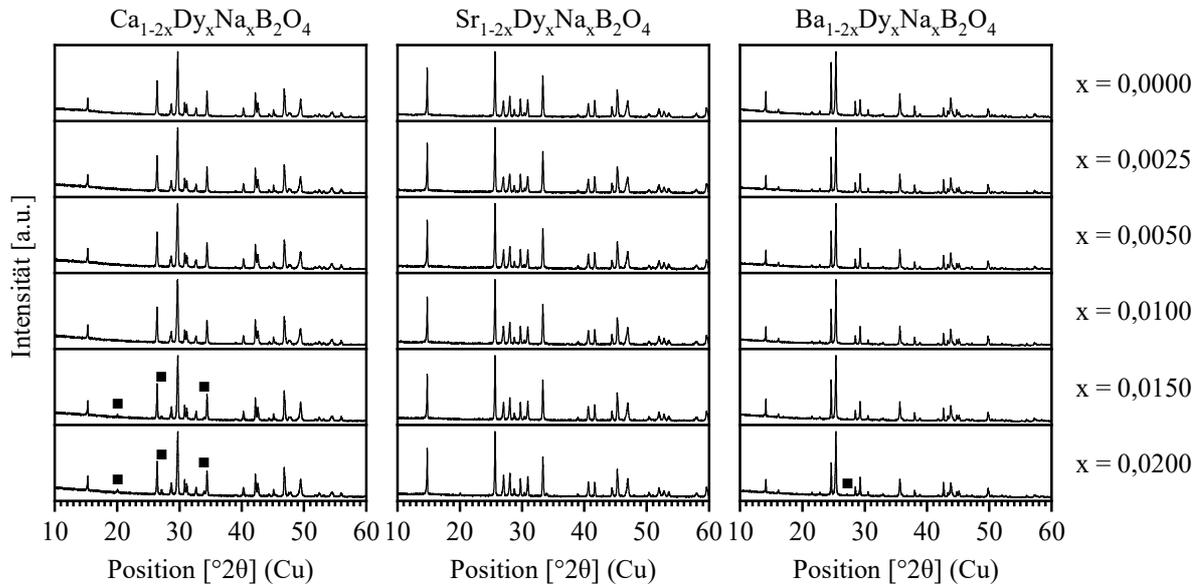


Abb. 50: Röntgendiffraktogramme von mit Dy³⁺ dotiertem MB₂O₄ (■ = DyBO₃, Hauptpeak bei 27,16 °2θ (*hkl* = 100))

Im Wirtsgitter CaB₂O₄ konnte bis zu 1,00 mol-% Dy³⁺ eingebaut werden. Ab einem Gehalt von 1,50 mol-% Dy³⁺ konnte die Nebenphase DyBO₃ (Hauptpeak bei 27,16 °2θ (*hkl* = 100)) röntgenographisch nachgewiesen werden (vgl. Abb. 50). Im Gegensatz dazu konnte in SrB₂O₄ bis zu 2,00 mol-% Dy³⁺ ohne Bildung einer Nebenphase eingebaut werden. Bei BaB₂O₄ ließ sich bei einem Gehalt von 2,00 mol-% Dy³⁺ die Nebenphase DyBO₃ röntgenographisch nachweisen. Diese Nebenphase ist in Abb. 50 mit einem Viereck gekennzeichnet.

Das Anregungs- und Emissionsspektrum von CaB₂O₄:1,00Dy ist Abb. 51 dargestellt. Der intensivste Peak im Anregungsspektrum liegt bei einer Wellenlänge von 360 nm und entspricht dem Übergang ⁶H_{15/2} → ⁴I_{11/2} von Dy³⁺. Das Emissionsspektrum wurde im Bereich zwischen 450 und 600 nm aufgenommen. Es enthält Peaks bei 478 und 574 nm, welche den Übergängen ⁴F_{9/2} → ⁶H_{15/2} bzw. ⁴F_{9/2} → ⁶H_{13/2} entsprechen [109]. Tab. 19 beinhaltet die Zuordnung der jeweiligen Übergänge zu den entsprechenden Wellenlängen. Die Messung des Emissionsspektrums in Abhängigkeit von der Dy³⁺-Konzentration zeigte, dass die höchste Intensität bei einem Gehalt von 1,00 mol-% Dy³⁺ erreicht wird. Wegen der sekundär gebildeten

Phase DyBO_3 wurde auf die Durchführung von Fluoreszenzmessungen bei Proben mit einem Dy^{3+} -Gehalt von mehr als 1,50 mol-% verzichtet.

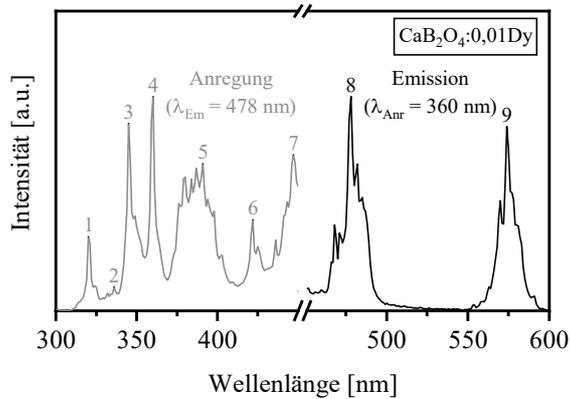


Abb. 51: Anregungs- und Emissionsspektrum von mit 1,00 mol-% Dy^{3+} dotiertem CaB_2O_4 . Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 19

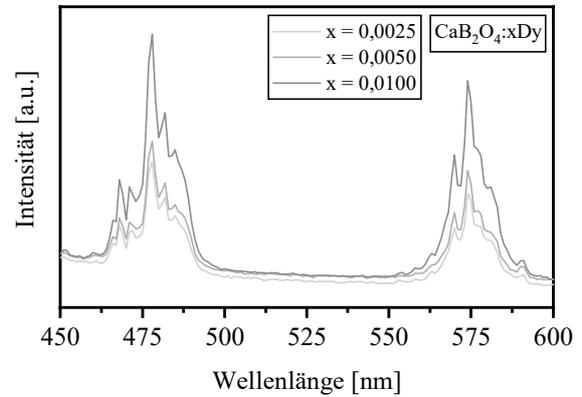


Abb. 52: Emissionsspektren von $\text{CaB}_2\text{O}_4:\text{xDy}$ ($\lambda_{\text{Anr}} = 360 \text{ nm}$)

Tab. 19: Dy^{3+} Übergänge in CaB_2O_4 (Nummerierung siehe Abb. 51)

Peak Nr.	Übergang	Wellenlänge [nm] in CaB_2O_4
1	${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^4\text{M}_{17/2} + {}^6\text{P}_{3/2}$	320
2	${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{9/2} + {}^4\text{F}_{5/2}$	336
3	${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^6\text{P}_{7/2} + {}^4\text{M}_{15/2}$	345
4	${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{11/2}$	360
5	${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^4\text{K}_{17/2} + {}^4\text{F}_{7/2} + {}^4\text{I}_{13/2}$	391
6	${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^4\text{G}_{11/2}$	422
7	${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$	447
8	${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{15/2}$	478
9	${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{13/2}$	574

Bei den mit Dy^{3+} dotierten Wirtsgittern SrB_2O_4 und BaB_2O_4 konnte keine Fluoreszenz nachgewiesen werden. Beispielhaft dafür sind in Abb. 53 und Abb. 54 die Ergebnisse der Fluoreszenzmessung an $\text{BaB}_2\text{O}_4:0,010\text{Dy}$ dargestellt. Das Anregungsspektrum wurde bei 572 nm im Bereich zwischen 300 und 500 nm aufgenommen. In diesem Bereich sind die charakteristischen Übergänge der Dy^{3+} -Ionen zu erwarten. Die Peakintensitäten waren sehr niedrig, dennoch wurde kontrolliert, ob es sich bei 349 nm um eine mögliche Anregungswellenlänge handelt. Das Emissionsspektrum wurde bei 349 und 360 nm aufgenommen und zeigte, dass es sich um Raman-Peaks handelt, da sich die Emissionspeaks mit den

Anregungswellenlängen verschieben. Eine Variation der Dotierungskonzentration änderte das Ergebnis nicht.

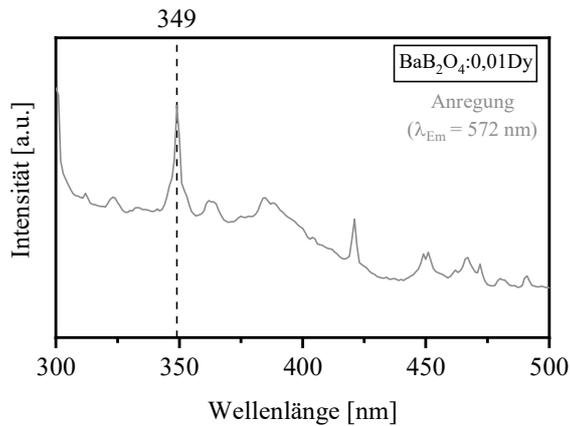


Abb. 53: Anregungs- und Emissionsspektrum von mit 1,00 mol-% Dy^{3+} dotiertem BaB_2O_4

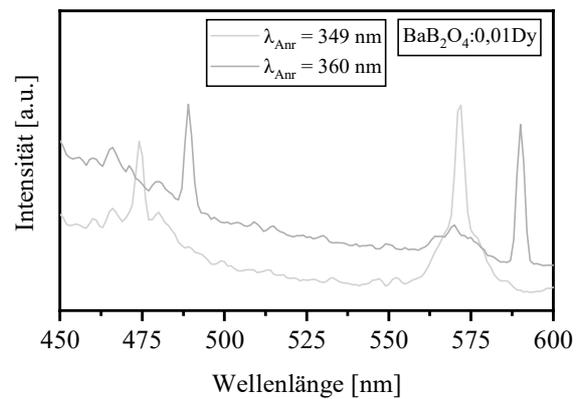


Abb. 54: Emissionsspektren von $\text{BaB}_2\text{O}_4:0,010\text{Dy}$ bei Anregungswellenlängen 349 und 360 nm

5.2.5. Zusammenfassung und Diskussion

Calcium- und Strontiumborate kristallisieren im orthorhombischen Kristallsystem Pbcn (Nr. 60) und BaB_2O_4 in der trigonalen Kristallstruktur R3c (Nr. 161). Der verschiedene BO-Aufbau wurde mittels FTIR untersucht. Bei den isostrukturellen Verbindungen CaB_2O_4 und SrB_2O_4 läuft eine $(\text{BO}_2)_n$ -Kette entlang der c-Achse, während sich bei BaB_2O_4 die Boratome in $(\text{B}_3\text{O}_6)^{3-}$ -Ringen anordnen. Weitere Modifikationen der Erdalkali-Borate wurden auf diesem Syntheseweg nicht hergestellt.

Tab. 20: Zusammenfassung der Synthese- und Lumineszenzeigenschaften der Leuchtstoffe $\text{MB}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ und $\text{MB}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ (M = Ca, Sr, Ba)

Wirtsgitter	Aktivator	optimale λ_{Anr} [nm]	Aktivatorkonzentration [mol-%]				
			0,25	0,50	1,00	1,50	2,00
CaB_2O_4	Sm^{3+}	401			Max.		
SrB_2O_4	Sm^{3+}	400				Max.	
BaB_2O_4	Sm^{3+}	401			Max.		
CaB_2O_4	Dy^{3+}	360			Max.	NP: DyBO_3	
SrB_2O_4	Dy^{3+}	-	n. d.				
BaB_2O_4	Dy^{3+}	-	n. d.				NP: DyBO_3

NP: Nebenphase

grau hinterlegt: Fluoreszenz detektiert

n. d.: keine Fluoreszenz detektiert

Max.: maximale Fluoreszenzintensität

Die Ergebnisse zur Untersuchung der Lumineszenzeigenschaften von $\text{MB}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ und $\text{MB}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ (M = Ca, Sr, Ba) sind in Tab. 20 zusammengefasst. Bei der Synthese wurde wiederum Natrium zum Ladungsausgleich zugegeben. Bis zu 2,00 mol-% Sm^{3+} konnten in CaB_2O_4 , SrB_2O_4 und BaB_2O_4 ohne Änderung der Wirtsgitterstruktur und ohne die Entstehung

von Nebenphasen eingebaut werden. Der intensivste Anregungsübergang lag bei 401 nm für $\text{CaB}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ und $\text{BaB}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ und 400 nm für $\text{SrB}_2\text{O}_4:\text{Sm}$. Dieser entspricht dem elektronischen Übergang ${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{F}_{7/2} + {}^6\text{P}_{3/2} + {}^4\text{K}_{11/2}$ von Sm^{3+} . Die optimale Dotierungskonzentration lag bei 1,00 mol-% für $\text{CaB}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ und $\text{BaB}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ und 1,50 mol-% für $\text{SrB}_2\text{O}_4:\text{Sm}$. Für die ersten beiden Stoffe existiert keine Referenzliteratur. Da es sich bei BaB_2O_4 um einen der wichtigsten nichtlinearen optischen Kristalle handelt wurde das System bereits untersucht. Komatsu et al. strukturierten Sm-dotiertes $\beta\text{-BaB}_2\text{O}_4$ ($42\text{BaO}\cdot 8\text{Sm}_2\text{O}_3\cdot 50\text{B}_2\text{O}_3$) mit Hilfe eines kontinuierlichen Yb:YVO₄-Faserlasers und untersuchten das Emissionsspektrum, das mittels Lasermikroskop ($\lambda = 488$ nm) aufgenommen wurde [110]. Die Emissionsspektren bestehen aus den Übergängen ${}^4\text{G}_{5/2} \rightarrow {}^6\text{H}_J$ ($J = 5/2, 7/2, 9/2$) und zeigen lediglich eine leichte Abweichung von max. 4 nm im Vergleich zu den Werten aus dieser Arbeit.

Bei der Dotierung der Erdalkali-Borate mit Dysprosium entstanden Nebenphasen bei CaB_2O_4 ab 1,50 mol-% Dy^{3+} und bei BaB_2O_4 ab 2,00 mol-% Dy^{3+} . Für $\text{CaB}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ betrug die optimale Anregungswellenlänge 360 nm (${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{11/2}$), die optimale Dotierungskonzentration war 1,00 mol-%. Der dominante Anteil an blauen Emissionen (Übergang ${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{15/2}$) deutet drauf hin, dass die Dy^{3+} -Ionen sich an einer lokal hochsymmetrischen Position befinden. Unerwartet war die ausbleibende Fluoreszenz bei $\text{SrB}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ und $\text{BaB}_2\text{O}_4:\text{Dy}$. Um ein Zerfallen der Proben als Ursache auszuschließen, wurden diese vor den Fluoreszenzmessungen abermals gesintert und röntgenographisch deren Reinheit kontrolliert. Es existieren keine vergleichbaren Erkenntnisse in der Fachliteratur. Wirtsgitter aus Literaturdaten wurden ausschließlich mit anderen Seltenen Erden co-dotiert, der auftretende Energietransfer wurde charakterisiert [111, 87]. Möglicherweise ist die Emission der dotierten Wirtsgitter so schwach, dass man den Dotierungsgehalt erhöhen müsste, um einen Effekt zu erkennen. Eventuell ist jedoch die Synthesemethode nicht geeignet für die Herstellung dieser Leuchtstoffe. Für $\text{CaB}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ dokumentierten von Mohan et al. ihre Erkenntnisse [112]. Die maximale Dotierungskonzentration lag dabei bei 1,00 mol-%. Als Synthesemethode kam, wie in dieser Arbeit, die Festkörper-Methode zum Einsatz, anstatt Na^+ wurde Li^+ zur Ladungskompensation eingesetzt. Der Dotierungsgehalt lag zwischen 2 und 10 mol-%. Bei den Messergebnissen fällt auf, dass die Untergründe der Spektren sich stark unterscheiden. Trotzdem erfolgte ein direkter Vergleich der Spektren, wobei die Probe mit 4 mol-% Dy^{3+} die höchste Intensität zeigte. Trotz des schlechten Verhältnisses von Intensität zu Untergrundrauschen wurde diese Probe als Optimum bezeichnet. Die Ergebnisse der genannten Autoren sind deshalb zumindest zweifelhaft.

5.3. Erdalkali-Seltenerd-Oxide

5.3.1. Einleitung

Binäre Seltenerd-Oxide $MREE_2O_4$ ($M = Ca, Sr, Ba$; REE = Rare Earth Elements (Seltene Erden)), die in der $CaFe_2O_4$ -Struktur kristallisieren, besitzen aufgrund ihrer besonderen Natur vielfältige potentielle Anwendungen, insbesondere in der Photolumineszenz. Über die Synthese und Kristallstruktur von $MREE_2O_4$ wird in zahlreichen Literaturquellen berichtet [113–120]. Für den Einsatz als Leuchtstoffe wurden die Strukturen und Lumineszenzeigenschaften von SrY_2O_4 , $SrLu_2O_4$, BaY_2O_4 und $BaGd_2O_4$ umfassend untersucht [121–125, 121, 126, 126, 127]. Kobayashi et al. untersuchten die Ionenleitfähigkeit von $BaREE_2O_4$ (für REE = La, Nd, Sm, Gd, Ho und Y) und stellten eine Beziehung zwischen der Ionenleitfähigkeit und den Ionenradien der Seltenen Erden fest [128]. Die Strukturparameter von $SrREE_2O_4$ (für R = Gd, Dy, Ho, Er, Tm, Yb) [129] und $BaREE_2O_4$ (für REE = Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho) [130] wurden durch Pulverneutronenbeugung verfeinert und ihre magnetischen Eigenschaften systematisch untersucht. In jüngster Zeit wurde $BaREE_2O_4$ (für REE = La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Y) zum ersten Mal in einkristalliner Form mittels Metallflusstechnik synthetisiert und die strukturellen und magnetischen Eigenschaften beschrieben [131].

Insgesamt lässt sich feststellen, dass eine Vielzahl an Veröffentlichungen zu magnetischen und weiteren physikalischen Eigenschaften von $MREE_2O_4$ -Verbindungen existiert, während über die Lumineszenzeigenschaften dieser Verbindungen nur in begrenztem Umfang geforscht wurde. Dotiert mit Seltenen Erden sind die ternären Oxide $MREE_2O_4$ jedoch ausgezeichnete lumineszierende Materialien [132–134]. Mit Eu^{3+} dotiertes $BaGd_2O_4$, $BaLa_2O_4$ und $SrLa_2O_4$ wurde von Mari et al. mittels Verbrennungsmethode synthetisiert und zeigte starke Lichtemissionen [135].

Im Rahmen dieser Arbeit erfolgte die Synthese der $MREE_2O_4$ (für $M = Ca, Sr, Ba$ und REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb) mittels Pechini-Methode. Die fein abgestuften Ionenradien der Seltenen Erdmetalle stellen eine gute Voraussetzung für Struktursystematik zum $CaFe_2O_4$ -Typ dar. Die Lumineszenzeigenschaften der mit Sm^{3+} bzw. Dy^{3+} dotierten Verbindungen $SrEu_2O_4$ und $BaEu_2O_4$ wurden untersucht.

5.3.2. Synthese und Charakterisierung von Erdalkali-Seltenerd-Oxiden

In diesem Kapitel wird die Synthese von $MREE_2O_4$ ($M = Ca, Sr, Ba$) behandelt. Die Synthese erfolgte mithilfe der Pechini-Methode, die im Vergleich zur Festkörpersynthese eine kürzere Sinterzeit und niedrigere Sintertemperaturen benötigt.

$CaREE_2O_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y, Yb, Sc)

Die Tabelle fasst die Ergebnisse der Synthese der Calciumseltenerdoxide zusammen. Dabei sind sowohl die angewandten Synthesebedingungen als auch die Endprodukte angegeben.

Tab. 21: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe $CaO \cdot REE_2O_3$

Einwaage- stöchiometrie	Angewandte Synthesebedingungen	Ergebnisse
$CaO \cdot La_2O_3$	1200 °C; 4 h / 1400 °C, 4h	$CaO + La_2O_3$
$CaO \cdot Nd_2O_3$	1300 °C; 4 h / 1400 °C, 4 h / gepresst als Tablette	$CaO + Nd_2O_3$
$CaO \cdot Sm_2O_3$	1200 °C; 4 h / 1300 °C, 10 h / gepresst als Tablette	$CaO + Sm_2O_3$
$CaO \cdot Eu_2O_3$	1100 °C; 4 h / 1300 °C, 2-10 h / gepresst als Tablette / Variation des EG/ZS - Verhältnisses	$CaO + Eu_2O_3$
$CaO \cdot Gd_2O_3$	1200 °C; 4 h / 1400 °C, 2 h	$CaO + Gd_2O_3$
$CaO \cdot Dy_2O_3$	1300 °C, 10 h / Tablette	$CaO + Dy_2O_3$
$CaO \cdot Y_2O_3$	1000 °C; 4 h / 1100 °C, 4 h / 1300 °C, 4 h Tablette, schnelles Abkühlen	$CaO + Y_2O_3$
$CaO \cdot Yb_2O_3$	1400 °C; 4 h / 1450 °C, 10 h / schnelles Abkühlen	$CaO + Yb_2O_3$
$CaO \cdot Sc_2O_3$	800 – 1400 °C / 100 °C Schritte	$CaSc_2O_4$

Bei der Reihe der $CaREE_2O_4$ war einzig die Phase $CaSc_2O_4$ unter den Synthesebedingungen stabil. Bei weiteren Phasen wurden sowohl die Sintertemperatur als auch die Sinterzeit und die Abkühlzeit variiert: als Ergebnis lagen jedoch lediglich die Ausgangsoxide vor. Als Beispiel ist das Röntgendiffraktogramm von $CaO \cdot La_2O_3$, gesintert bei 1200 °C, 1300 °C und 1400 °C, in Abb. 55 dargestellt. Ausgehend von den Ausgangsstoffen $CaNO_3 \cdot 4H_2O$ und $La(OH)_3$ entstehen nach Verdampfen von Wasser und nitrosen Gasen außer CaO (ICDD 01-070-4068 [136]) und La_2O_3 (ICDD: 01-074-2430 [137]) keine neuen Phasen. Mit zunehmender Temperatur bis 1400 °C ist ebenfalls keine Phasenneubildung zu beobachten. Die zwei Ausgangsoxide werden lediglich kristalliner, was man anhand der steigenden Intensitäten der Peaks erkennt.

Weiterhin kann die Umwandlung von Eu_2O_3 von kubischer zu monokliner Modifikation beim Sintern der Mischung $CaO \cdot Eu_2O_3$ im Temperaturbereich 1100 bis 1300 °C nachgewiesen werden (vgl. Abb. 56). Der Hauptpeak des kubischen Eu_2O_3 beim $28,53^\circ 2\theta$, identifiziert mit

ICDD 01-086-2476 [138], ist nach Sinterung bei 1300 °C nicht mehr zu finden, stattdessen kann man hier nur monoklines Eu_2O_3 (ICDD: 01-071-0589 [139]) erkennen.

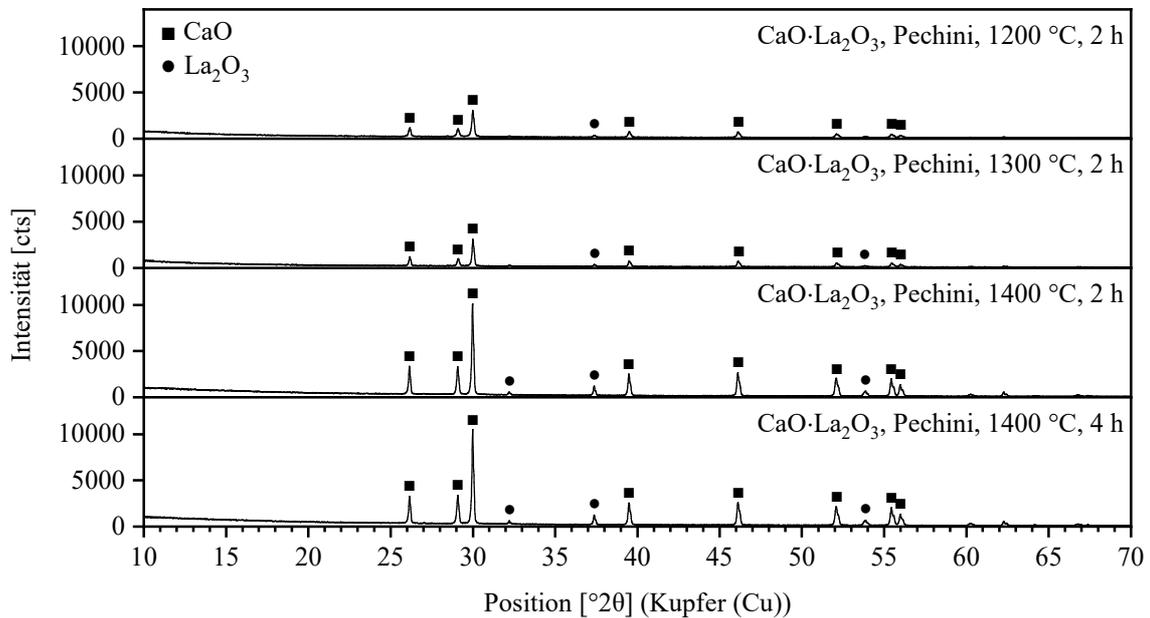


Abb. 55: Röntgendiffraktogramm von $\text{CaO}\cdot\text{La}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1200 - 1400 °C

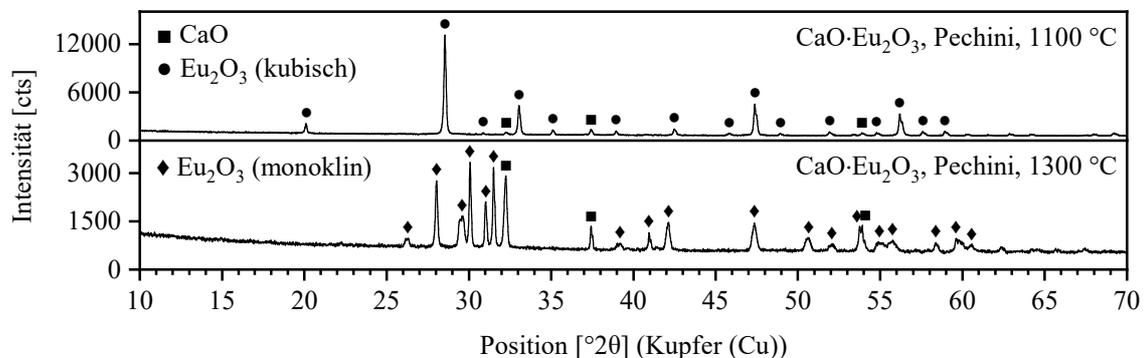


Abb. 56: Röntgendiffraktogramm von $\text{CaO}\cdot\text{Eu}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1100 - 1300 °C

Die einzige stabile Verbindung der Synthesereihe CaREE_2O_4 ist CaSc_2O_4 . Die Röntgendiffraktogramme der Phase, gesintert im Temperaturbereich zwischen 800 und 1300 °C, sind in Abb. 57 dargestellt. Bei einer Sintertemperatur von 800 °C sind sowohl die Zielphase CaSc_2O_4 als auch ein kleiner Anteil an noch nicht reagiertem Sc_2O_3 (ICDD 00-043-1028) im Röntgendiffraktogramm zu sehen. Die Nebenphase verschwindet mit steigender Sinter-temperatur und Sinterzeit, bei 1300 °C erhält man das reinphasige Wirtsgitter CaSc_2O_4 (ICDD: 00-043-1028) [113, 140]. Es kristallisiert im orthorhombischen Kristallsystem (Raumgruppe Pnma) mit $Z = 4$. Die verfeinerten Gitterparameter betragen $a = 9,462(0)$ Å, $b = 3,141(2)$ Å und

$c = 11,111(6) \text{ \AA}$. In dieser Struktur bilden die verzerrten $[\text{ScO}_6]$ -Oktaeder ein dreidimensionales Netzwerk, indem sie Kanten und Ecken mit benachbarten Oktaedern teilen (vgl. Abb. 58). Durch diese Anordnungen entstehen parallel zur c -Achse leere Kanäle, in denen sich Ca^{2+} -Ionen (KZ = 8) aufhalten. Die Reaktionsgleichung für die Pechini-Synthese lautet:

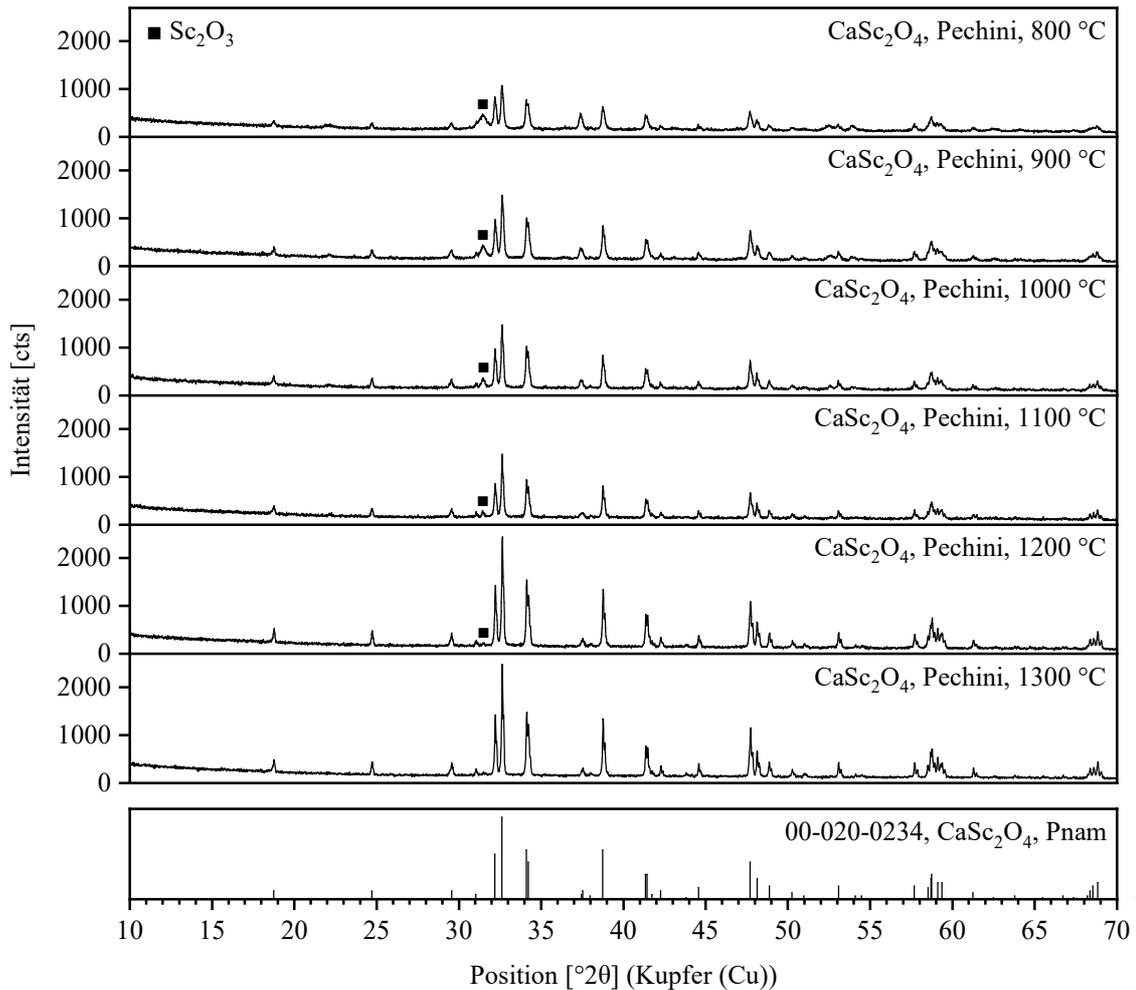
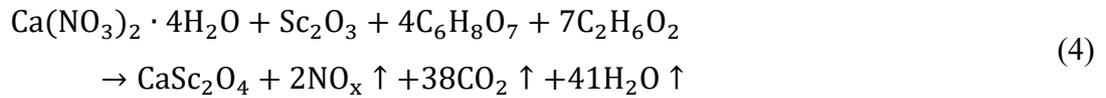
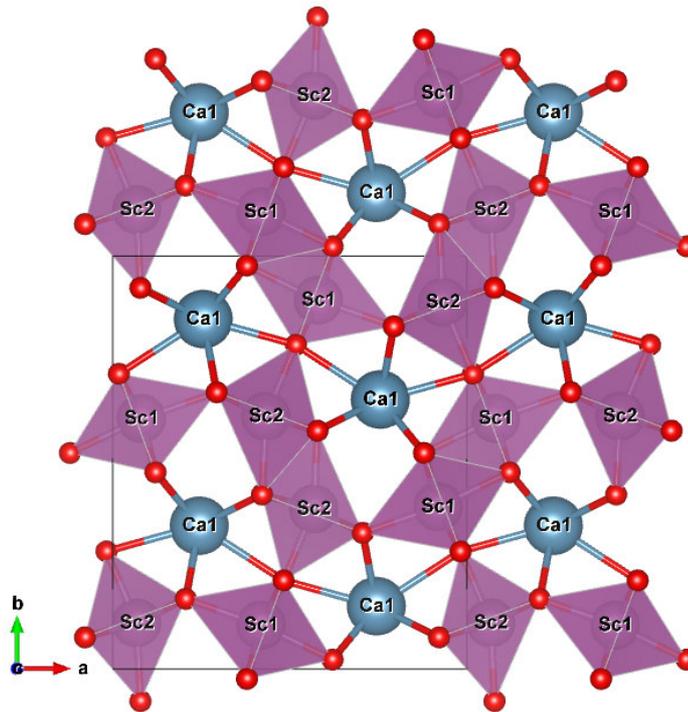


Abb. 57: Röntgendiffraktogramm von CaSc_2O_4 , Pechini-Methode, Sintertemperatur 800 - 1300 °C

Abb. 58: Kristallstruktur von CaSc₂O₄

SrREE₂O₄ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y, Yb, Sc)

Tab. 22 fasst die Ergebnisse der Synthese der Strontiumseltenerdoxide zusammen. In der ersten Spalte ist die Einwaagestöchiometrie der Ausgangsoxide angegeben. Abgesehen von den Synthesen mit Lanthan und Neodym war die Herstellung der Strontium-Seltenerdoxide erfolgreich.

Tab. 22: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe SrO·REE₂O₃

Einwaage- stöchiometrie	Unterschiedliche Synthesebedingungen	Ergebnisse
SrO·La ₂ O ₃	700 - 1400 °C jeweils 4 h	SrO + La ₂ O ₃
SrO·Nd ₂ O ₃	700 - 1400 °C jeweils 4 h / gepresst als Tablette	SrO + Nd ₂ O ₃ + Mischoxide
SrO·Sm ₂ O ₃	1200 - 1300 °C, bis 4 h	SrSm ₂ O ₄
SrO·Eu ₂ O ₃	1300 - 1400 °C, bis 4 h	SrEu ₂ O ₄
SrO·Gd ₂ O ₃	1200, 1250, 1275 °C	SrGd ₂ O ₄
SrO·Dy ₂ O ₃	1300 - 1400 °C, bis 4 h	SrDy ₂ O ₄
SrO·Y ₂ O ₃	1000 - 1300 °C, als Tablette	SrY ₂ O ₄
SrO·Yb ₂ O ₃	1300 - 1400 °C, bis 4 h	SrYb ₂ O ₄
SrO·Sc ₂ O ₃	700 - 1400 °C	SrSc ₂ O ₄

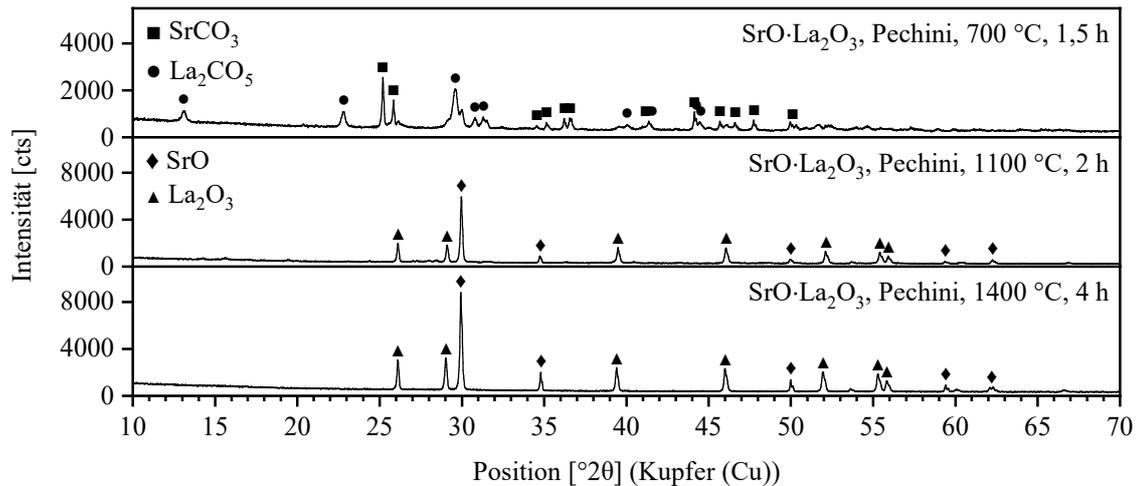


Abb. 59: Röntgendiffraktogramm von $\text{SrO}\cdot\text{La}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1100 - 1300 °C

Als ein Beispiel für nicht stabile Verbindungen in dieser Reihe ist das Röntgendiffraktogramm von $\text{SrO}\cdot\text{La}_2\text{O}_3$ im Temperaturbereich zwischen 700 °C und 1400 °C in Abb. 59 gezeigt. Bei 700 °C sind noch Strontium- und Lanthancarbonat (ICDD: 01-084-1778 [141] und ICDD 00-048-1113 [142]) vorhanden. Im Temperaturbereich zwischen 1100 °C und 1400 °C sind lediglich die Ausgangsoxide SrO (ICDD 00-048-1477 [143]) und La_2O_3 (ICDD 01-073-2141 [144]) zu detektieren.

In dieser Syntheserieihe wurden SrSm_2O_4 , SrEu_2O_4 , SrGd_2O_4 , SrDy_2O_4 , SrY_2O_4 und SrYb_2O_4 reinphasig synthetisiert. Als Beispiel für eine stabile Verbindung in dieser Reihe ist das Röntgendiffraktogramm von SrEu_2O_4 im Temperaturbereich zwischen 900 °C und 1300 °C in Abb. 60 dargestellt. Bei 900 °C lassen sich noch große Menge an nicht reagiertem Eu_2O_3 (ICDD: 01-086-2476 [145]) und $\text{Sr}(\text{OH})_2$ (ICDD: 01-071-2365 [146]) nachweisen. Dies ist sowohl auf die zu niedrige Sintertemperatur als auch auf die zu geringe Sinterdauer zurückzuführen. Bei 1000 °C ist noch Eu_2O_3 vorhanden, welches mit steigender Temperatur verschwindet. Bei 1300 °C zeigt das Röntgendiffraktogramm schließlich nur die Reinphase SrEu_2O_4 . Diese Phase wurde identifiziert mit ICDD: 01-071-2188 [147] für Eu_3O_4 . Aus der Literatur ist bekannt, dass es sich bei den beiden Verbindungen um isotypische Verbindungen handeln [148, 149]. Da die Pechini-Synthese unter normaler Atmosphäre stattfand, kein Strontium übrigblieb und das synthetisierte Pulver nicht die für Eu_3O_4 charakteristische dunkelrote Farbe aufweist, ist davon auszugehen, dass es sich bei der synthetisierten Phase um SrEu_2O_4 handelt. SrEu_2O_4 ist isotypisch zu dem im vorherigen Abschnitt beschriebenen CaSc_2O_4 und kristallisiert im orthorhombischen Kristallsystem (Raumgruppe Pnma) mit $Z = 4$. Die verfeinerten Gitterparameter betragen $a = 10,1361(9)$ Å, $b = 3,497(0)$ Å und

$c = 12,080(2) \text{ \AA}$. Die Untersuchung der Morphologie des Wirtsgitters zeigte unregelmäßige blockförmige Agglomerate mit einer Partikelgröße von zwei bis mehrere Mikrometer (Abb. 61).

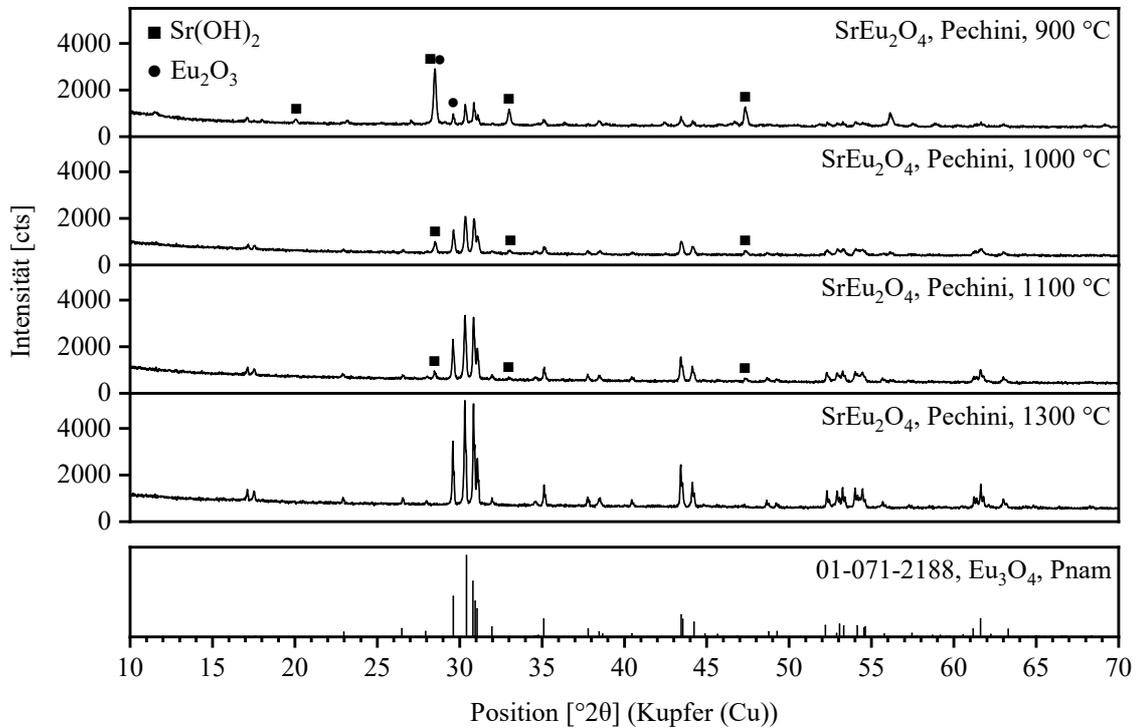


Abb. 60: Röntgendiffraktogramm von SrEu₂O₄, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1100 - 1300 °C

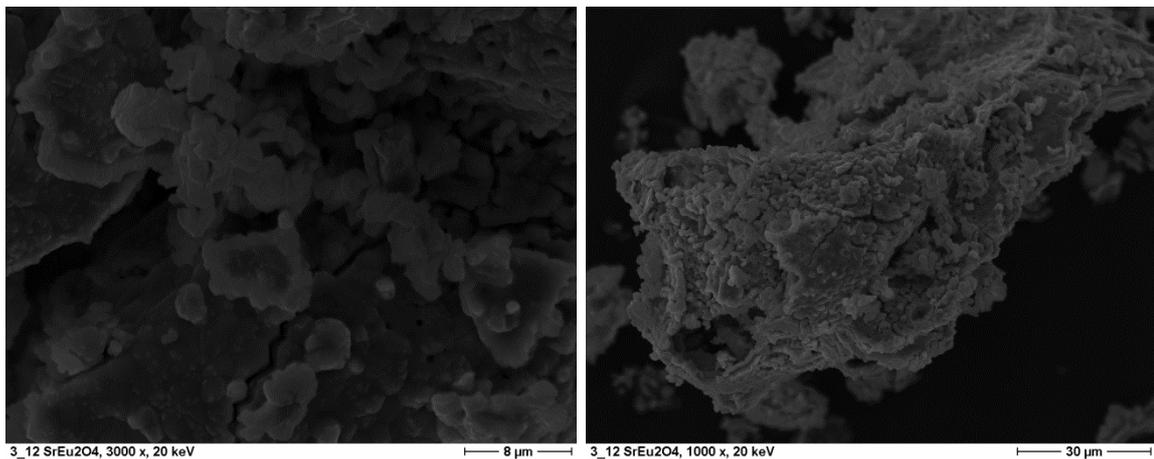


Abb. 61: REM Aufnahme von SrEu₂O₄

Die Röntgendiffraktogramme der stabilen Verbindungen der Synthesereihe SrSm₂O₄, SrEu₂O₄, SrGd₂O₄, SrDy₂O₄, SrY₂O₄, SrYb₂O₄ und SrYb₂O₄ sind in Abb. 62 gezeigt. Oben ist zudem die Referenzkarte ICDD: 00-032-1254 [150] für SrSm₂O₄ und unten die Referenzkarte ICDD: 00-020-1213 für SrSc₂O₄ [151] dargestellt. Die gleichen Kristallstrukturen und ähnlichen

Ionenradien der variierten Elemente resultieren in ähnlichen Röntgendiffraktogrammen. Die Verschiebung der Peaks zu größeren Winkeln von Samarium- zu Scandiumstrontiumoxid ist auf das kleiner werdende Zellvolumen der Verbindungen zurückzuführen.

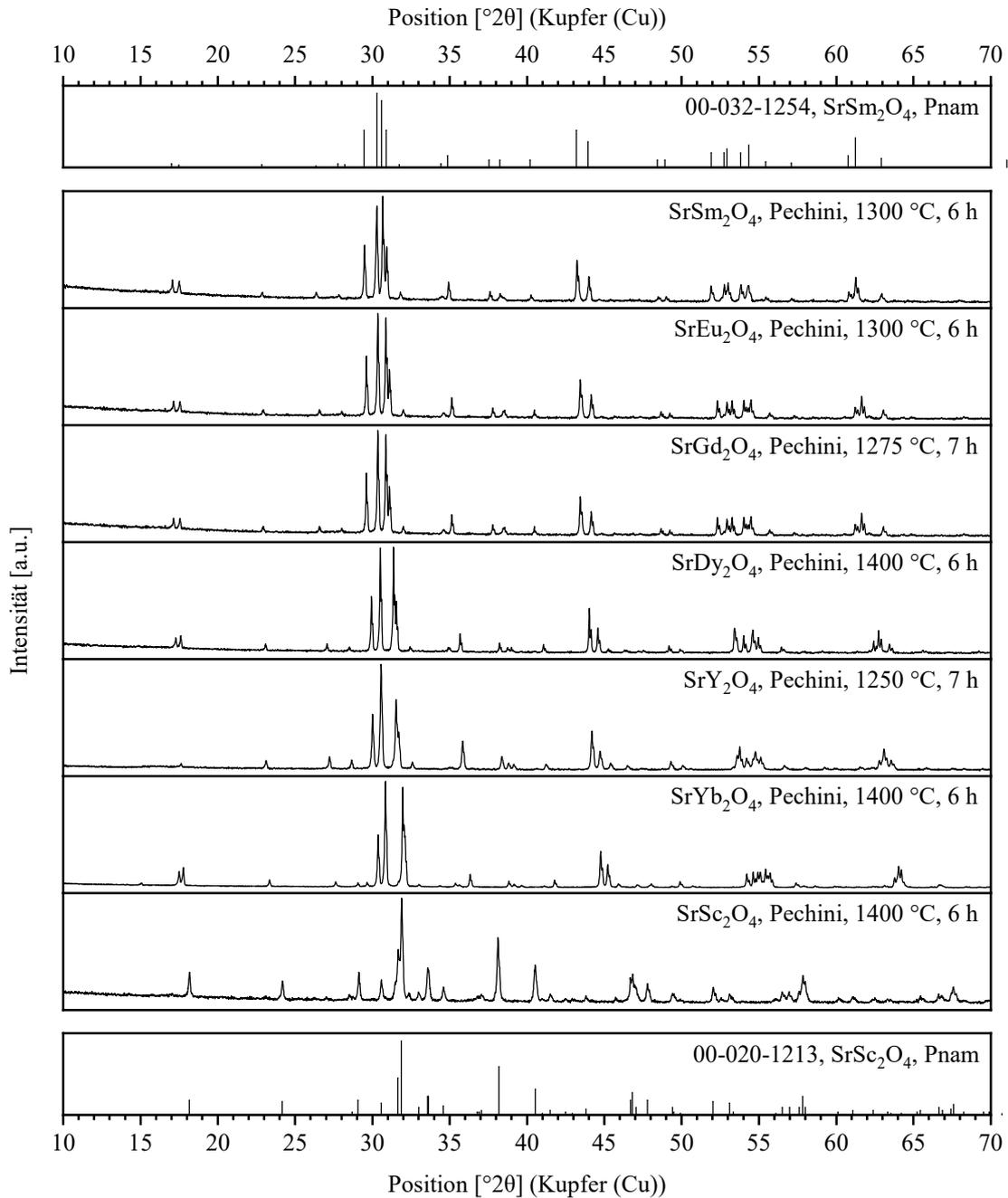


Abb. 62: Röntgendiffraktogramm der Verbindungen SrREE_2O_4 (REE = Sm, Eu, Gd, Dy, Y, Yb, Sc)

Zur Verfeinerung der Gitterparameter der SrREE_2O_4 (REE = Sm, Eu, Gd, Dy, Y, Yb, Sc) wurde die ICSD-Referenzkarte: 193592 für SrGd_2O_4 [152] als Ausgangsstruktur verwendet. Die ermittelten Gitterparameter sind in Tab. 23 angegeben.

Tab. 23: Verfeinerte Gitterparameter für SrREE₂O₄ (REE = Sm, Eu, Gd, Dy, Y, Yb und Sc) bei Raumtemperatur. Raumgruppe: Pnam.

Verbindungen	a [Å]	b [Å]	c [Å]	V [Å ³]
SrSm ₂ O ₄	10,142(6)	3,519(8)	12,116(6)	432,55(7)
SrEu ₂ O ₄	10,136(2)	3,497(0)	12,080(2)	428,19(8)
SrGd ₂ O ₄	10,103(3)	3,464(0)	12,018(7)	420,62(6)
SrDy ₂ O ₄	10,086(0)	3,426(1)	11,932(7)	412,34(3)
SrY ₂ O ₄	10,029(9)	3,392(1)	11,859(4)	403,48(0)
SrYb ₂ O ₄	9,992(0)	3,356(9)	11,771(7)	394,85(1)
SrSc ₂ O ₄	9,692(6)	3,183(8)	11,299(3)	348,68(6)

Das Röntgendiffraktogramm des Wirtsgitters SrSc₂O₄ zeigt große Übereinstimmungen mit Literaturdaten [151, 153, 140], u.a. mit den Ergebnissen von Carter und Feigelson, die zuerst die Struktur gelöst und beschrieben haben. SrSc₂O₄ kristallisiert im orthorhombischen Kristallsystem mit der Raumgruppe Pnam. Zur Verfeinerung der Zellstruktur wurde die Karte ICSD: 16886 [154] für CaSc₂O₄ als Ausgangspunkt genommen (Tab. 23).

BaREE₂O₄ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y, Yb, Sc)

Die Ergebnisse der Synthese der Bariumseltenerdoxide sind in Tab. 24 zusammengefasst dargestellt. Dabei sind BaLa₂O₄, BaNd₂O₄, BaSm₂O₄, BaEu₂O₄, BaGd₂O₄, BaDy₂O₄ BaY₂O₄ die reinphasig synthetisierten Verbindungen, die im Kristallsystem Pnam stabil sind.

Barium-Lanthanoxid BaLa₂O₄ wurde bei 1200 °C synthetisiert. Auf die Stabilität der Verbindung hat die Abkühlrate eine große Rolle. Die Röntgendiffraktogramme von bei 1200 °C gesintertem BaO·La₂O₃ mit unterschiedlicher Abkühlung sind in Abb. 63 abgebildet. Wird BaO·La₂O₃ langsam im abgeschalteten Ofen bis 70 °C bzw. 350 °C abgekühlt, so entstehen als Syntheseprodukte BaO₂ und La₂O₃. Lässt man die Mischung hingegen zuerst langsam abkühlen und schreckt sie ab 500 °C ab, dann entstehen als Hauptphase die orthorhombische Verbindung BaLa₂O₄ und als Nebenphase weiterhin eine kleine Menge an La₂O₃. Die Menge an La₂O₃ erhöht sich jedoch, wenn die Mischung bei einer höheren Temperatur abgeschreckt wird.

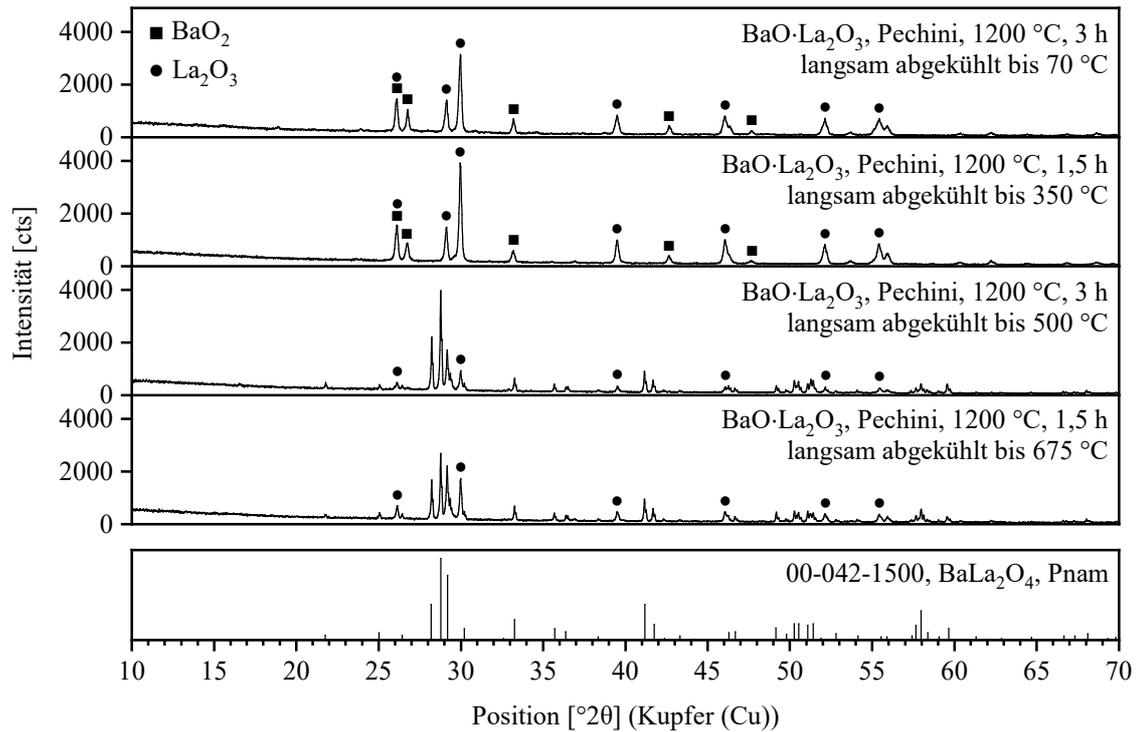


Abb. 63: Röntgendiffraktogramm von BaO·La₂O₃, Pechini-Methode, Sintertemperatur 850 - 1450 °C

Die Röntgendiffraktogramme der reinphasig synthetisierten, zueinander isotypischen Phasen BaNd₂O₄, BaSm₂O₄, BaEu₂O₄, BaGd₂O₄, BaDy₂O₄, BaY₂O₄ sind in Abb. 64 dargestellt. Hier lässt sich, analog zur Sr-Reihe, eine Abnahme des Zellvolumens mit kleiner werdendem Ionenradius der eingebauten Seltenen Erde beobachten.

Tab. 24: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe BaO·REE₂O₃

Einwaage- stöchiometrie	Synthesebedingungen	Ergebnisse
BaO·La ₂ O ₃	1200 °C; 4 h	BaLa ₂ O ₄ (+ La ₂ O ₃)
BaO·Nd ₂ O ₃	1300 °C; 4 h	BaNd ₂ O ₄
BaO·Sm ₂ O ₃	1300 °C; 3 h	BaSm ₂ O ₄
BaO·Eu ₂ O ₃	1300 °C; 4 h	BaEu ₂ O ₄
BaO·Gd ₂ O ₃	1200 °C; 6 h	BaGd ₂ O ₄
BaO·Dy ₂ O ₃	1400 °C; 4 h	BaDy ₂ O ₄
BaO·Y ₂ O ₃	1400 °C; 4 h	BaY ₂ O ₄
BaO·Yb ₂ O ₃	850 - 1450 °C; 10 h; als Tablette	Ba ₃ Yb ₄ O ₉ + Yb ₂ O ₃
BaO·Sc ₂ O ₃	700 - 1300 °C; 10 h	BaSc ₂ O ₄

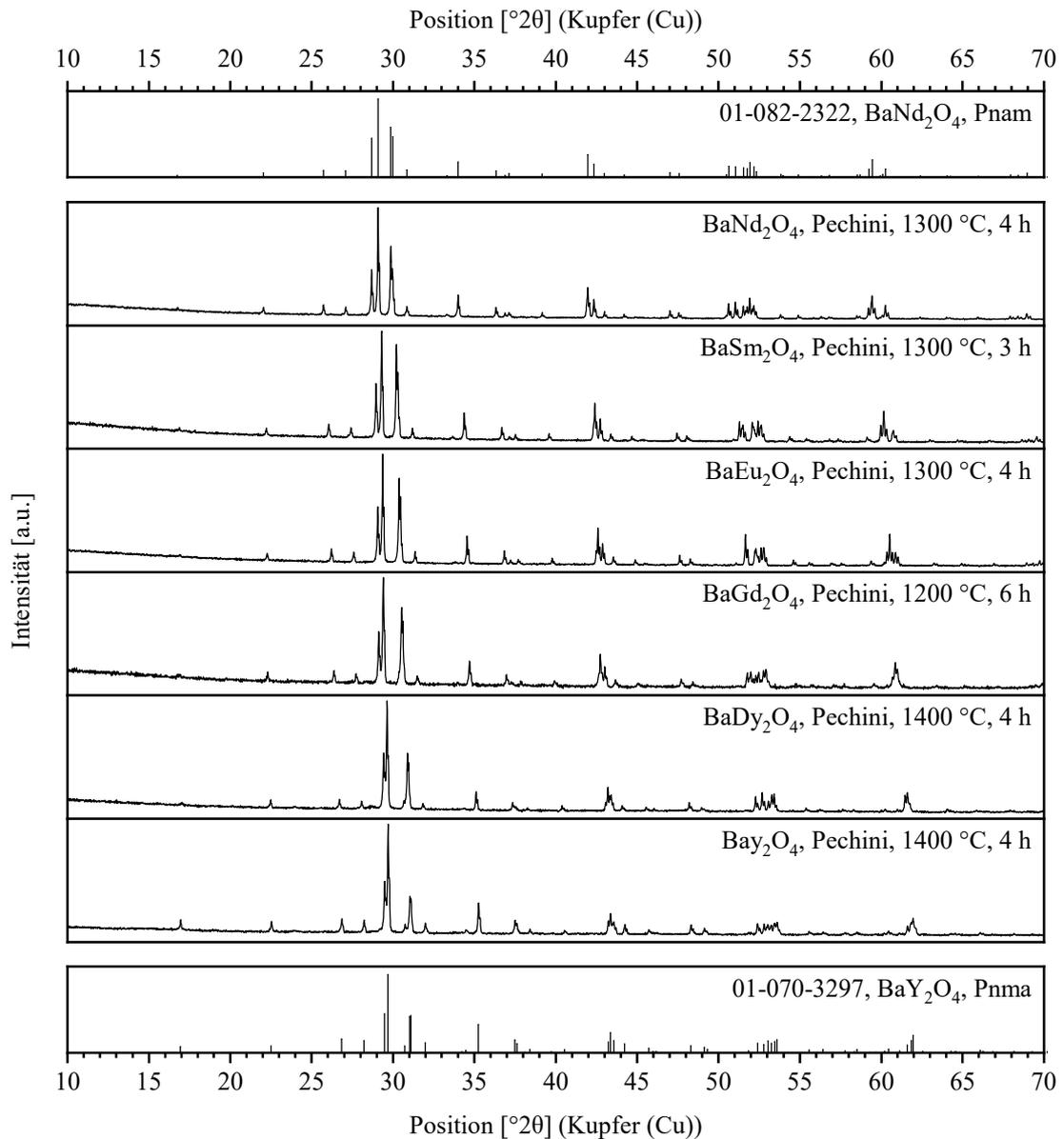


Abb. 64: Röntgendiffraktogramm der Verbindungen BaREE_2O_4 (REE = Nd, Sm, Eu, Gd, Dy und Y)

Tab. 25: Verfeinerte Gitterparameter für BaREE_2O_4 (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy und Y) bei Raumtemperatur. Raumgruppe: Pnam.

Verbindungen	a [Å]	b [Å]	c [Å]	V [Å ³]
BaLa ₂ O ₄	10,676(6)	3,706(5)	12,646(5)	500,46(1)
BaNd ₂ O ₄	10,589(6)	3,604(6)	12,446(9)	475,11(2)
BaSm ₂ O ₄	10,518(3)	3,560(3)	12,332(9)	461,84(5)
BaEu ₂ O ₄	10,505(1)	3,537(6)	12,295(7)	456,94(5)
BaGd ₂ O ₄	10,488(9)	3,515(4)	12,265(3)	452,25(2)
BaDy ₂ O ₄	10,419(6)	3,472(0)	12,144(5)	439,34(4)
BaY ₂ O ₄	10,394(2)	3,449(3)	12,115(2)	434,36(1)

Das Sintern der stöchiometrischen Mischung $\text{BaO} \cdot \text{Yb}_2\text{O}_3$ mit der Pechini-Methode führte zu verschiedenen Bariumytterbiumoxiden: $\text{Ba}_2\text{Yb}_2\text{O}_5$ (ICDD 00-046-0669 [155]) bei 1000 °C und $\text{Ba}_3\text{Yb}_4\text{O}_9$ (ICDD 01-075-2476 [156]) bei 1200 °C. Die gewünschte reine Phase BaYb_2O_4 konnte auf diesem Weg nicht synthetisiert werden. Sowohl eine höhere Sintertemperatur als auch das Pressen in einer Tablette zur Steigerung der Reaktivität führten nicht zum Ziel. Nach Sinterung bei der jeweiligen Temperatur konnte im Produkt stets ein Rest Yb_2O_3 (ICDD 01-084-1879 [157]) festgestellt werden, wie Abb. 65 zeigt.

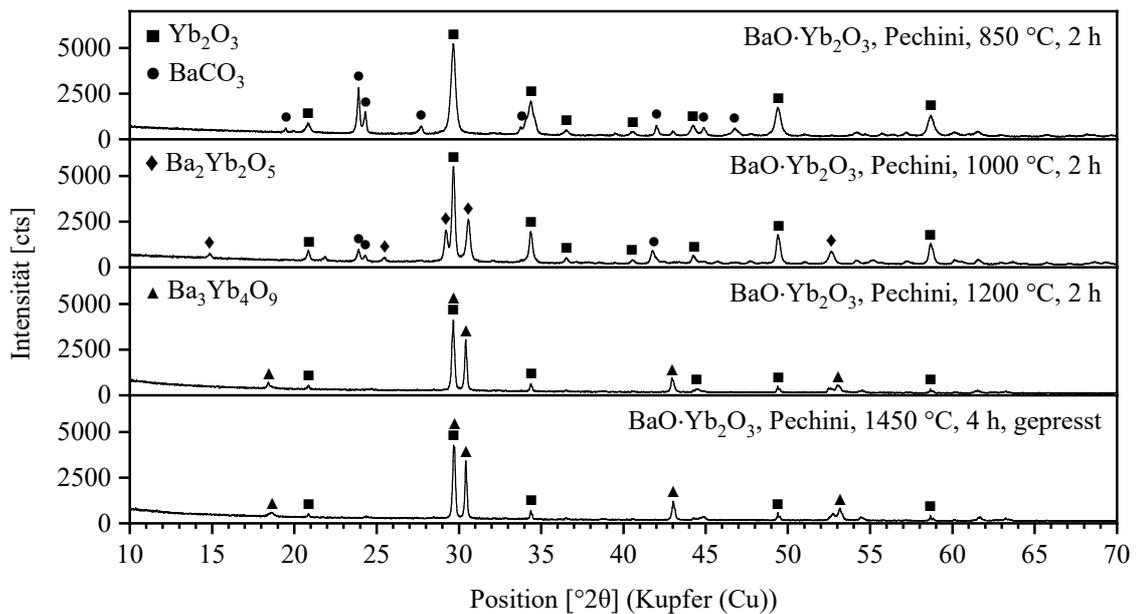


Abb. 65: Röntgendiffraktogramm von $\text{BaO} \cdot \text{Yb}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 850 - 1450 °C

Die Synthese des Wirtsgitters BaSc_2O_4 erfolgte bei 1300 °C für 10 Stunden. Im Gegensatz zu anderen stabilen Phasen der Synthesereihe kristallisiert BaSc_2O_4 in monokliner Struktur mit der Raumgruppe $C2/c$. Die große Übereinstimmung des Röntgendiffraktogramms mit der Literatur [158] ist in Abb. 66 dargestellt. Die anfangs bestehende Nebenphase $\text{Ba}_3\text{Sc}_4\text{O}_9$ verschwand bei einer höheren Sintertemperatur von 1500 °C und langer Sinterdauer von 30 Stunden. Die verfeinerten Gitterparameter betragen $a = 9,834(6)$ Å, $b = 5,815(0)$ Å, $c = 20,571(8)$ Å und $\beta = 89,91^\circ$.

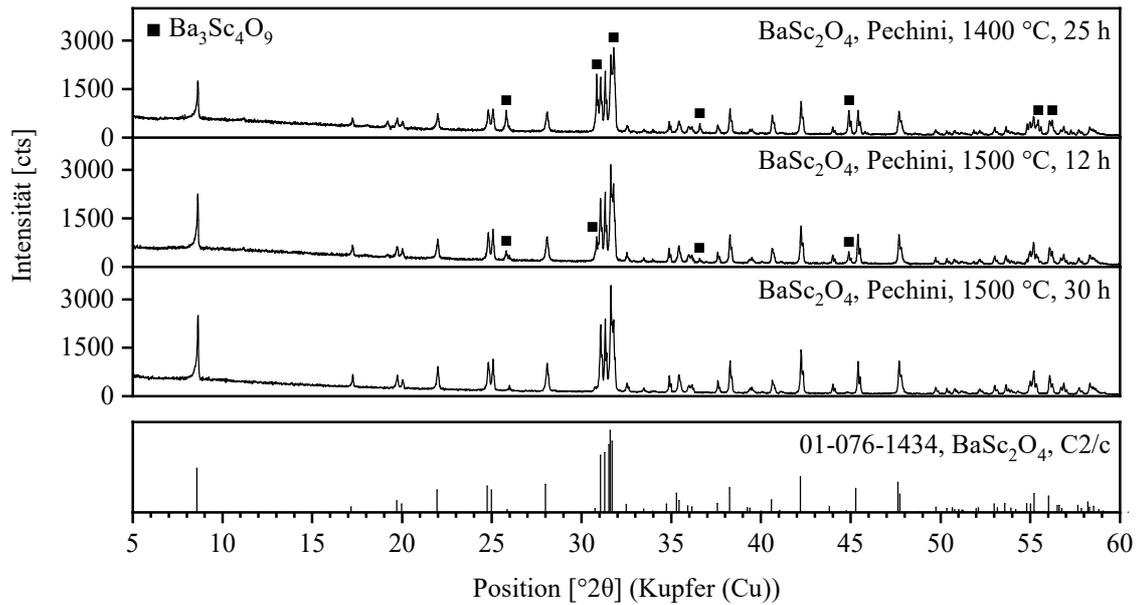


Abb. 66: Röntgendiffraktogramm von BaO·Sc₂O₃, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1400 - 1500 °C

5.3.3. Sm³⁺-Lumineszenz in SrEu₂O₄ und BaEu₂O₄

Die Wirtsgitter SrEu₂O₄ und BaEu₂O₄ wurden mit bis zu 2 mol-% Sm³⁺ dotiert. Die Synthese der Reihen SrEu_{2(1-x)}Sm_{2x}O₄ und BaEu_{2(1-x)}Sm_{2x}O₄ (0,00 < x < 0,02) erfolgte mittels Pechini-Methode bei 1300 °C für 6 Stunden. Die zugehörigen Röntgendiffraktogramme der Leuchtstoffe sind in Abb. 67 dargestellt. Dabei ist das Wirtsgitter SrEu₂O₄ in der ersten und das Wirtsgitter BaEu₂O₄ in der zweiten Spalte enthalten. Der Sm³⁺-Anteil ist rechts angegeben und nimmt von oben nach unten zu. Die Röntgendiffraktogramme der dotierten Phasen sind identisch mit den nicht dotierten, es wurden keine neuen Nebenphasen detektiert. Dies war zu erwarten, da die ähnlichen Ionenradien der Seltenen Erden die Besetzung der Eu³⁺-Position mit dem Aktivator Sm³⁺ begünstigt.

Die Anregungs- und Emissionsspektren von reinphasigem SrEu₂O₄ und BaEu₂O₄ sind in Abb. 68 dargestellt. Die Zuordnung der nummerierten Peaks zu den jeweiligen Übergängen enthält Tab. 26. Das Anregungsspektrum im Bereich von 350 und 750 nm besteht aus mehreren Peaks, die den charakteristischen Eu³⁺-Übergängen entsprechen. Der intensivste Peak bei 393 nm entspricht dem Übergang ⁷F₀ → ⁵L₆. Beim zugehörigen Emissionsspektrum sind sechs Peaks zwischen 550 und 750 nm erkennbar. Diese entsprechen den Übergängen innerhalb der 4f-Schale vom angeregten Niveau ⁵D₀ zum niedrigen Niveaus ⁷F_J (J = 0 - 5). Lumineszenz aus höher angeregten Zuständen wie ⁵D₁ wurde nicht beobachtet. Das deutet auf eine sehr effiziente strahlungsfreie Relaxation von ⁵D₁ → ⁵D₀ hin. Wie bereits in Abschnitt 2.3.3 erwähnt kann

anhand des Intensitätsverhältnisses der Übergänge ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_1$ und ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_2$ eine Aussage über die lokale Symmetrie von Eu^{3+} getroffen werden. Der magnetische Dipolübergang ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_1$ dominiert mit Inversionssymmetrie, während der elektrische Dipolübergang ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_2$ ohne Inversionssymmetrie stärker ist [31]. Dementsprechend dominiert bei SrEu_2O_4 und BaEu_2O_4 der hypersensible Dipolübergang ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_2$ (611 nm).

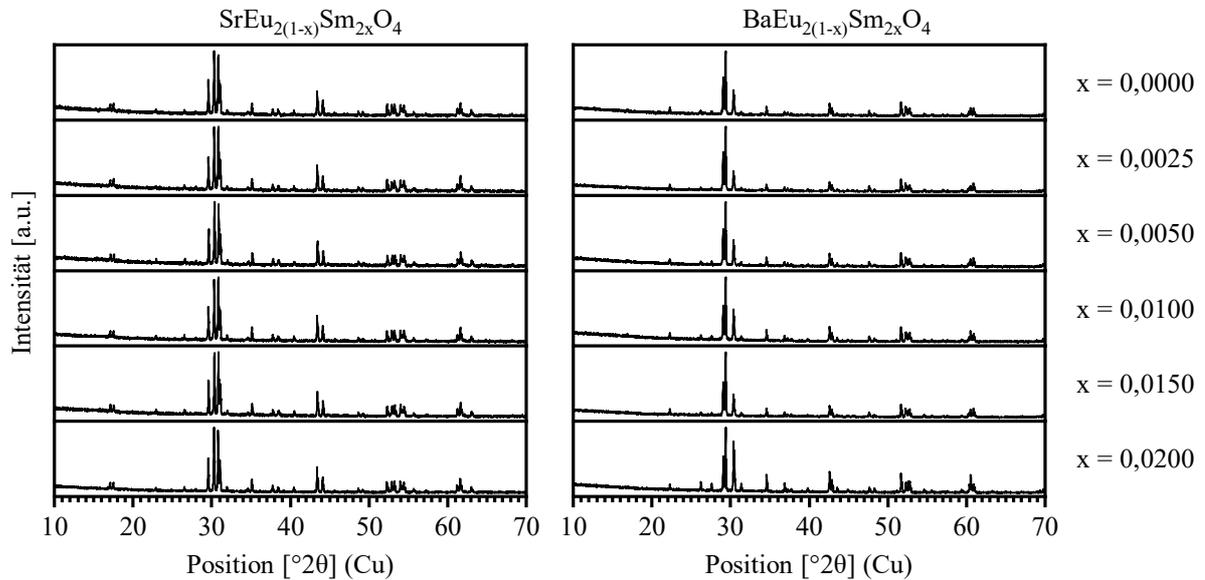


Abb. 67: Röntgendiffraktogramme von mit Sm^{3+} dotiertem SrEu_2O_4 und BaEu_2O_4

Die Lumineszenzintensitäten von SrEu_2O_4 und BaEu_2O_4 sind so intensiv, dass sich bei mit maximal 2 mol-% Sm^{3+} dotierten Phasen kein Sm^{3+} -Effekt erkennen lässt. Aufgrund der Energielagen der f-Orbitale ist davon auszugehen, dass es einen Energieübertrag von Sm^{3+} auf Eu^{3+} gibt [159–164]. Die Bestimmung der Anregungswellenlänge für Sm^{3+} ist daher essentiell. Vergleicht man die Anregungsspektren der dotierten und nicht dotierten Erdalkali-Seltenerd-Oxide, dann wird deutlich, dass der Hauptanregungspeak ${}^6H_{5/2} \rightarrow {}^4K_{11/2}$ von Sm^{3+} bei ca. 400 nm von dem sehr intensiven Übergang ${}^7F_0 \rightarrow {}^5L_6$ von Eu^{3+} überdeckt wird (vgl. Abb. 68 und Abb. 69). Der Peak bei ca. 485 nm entspricht wahrscheinlich einem Übergang von Sm^{3+} (${}^6H_{5/2} \rightarrow {}^4G_{7/2}$), aufgrund der geringen Intensität wurden an dieser Stelle keine weiteren Fluoreszenzmessungen vorgenommen.

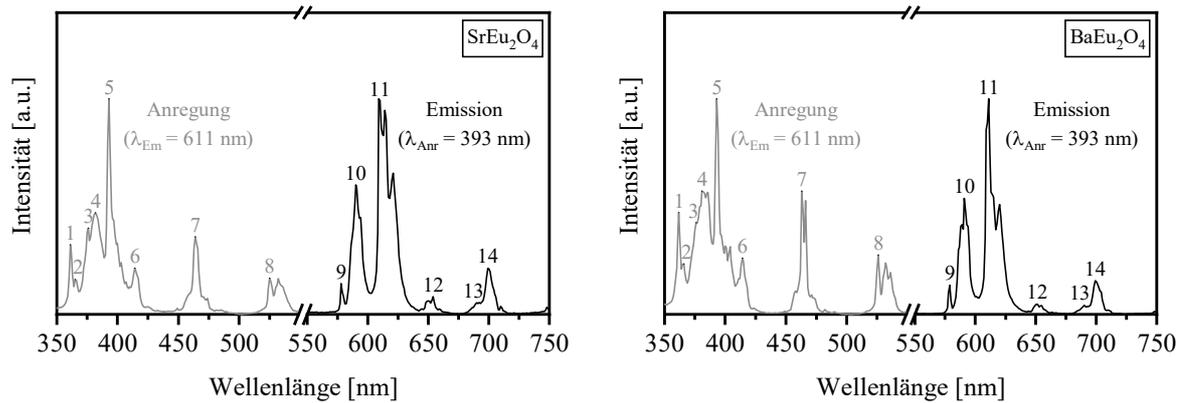


Abb. 68: Anregungs- und Emissionsspektrum von SrEu_2O_4 und BaEu_2O_4 , Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 26

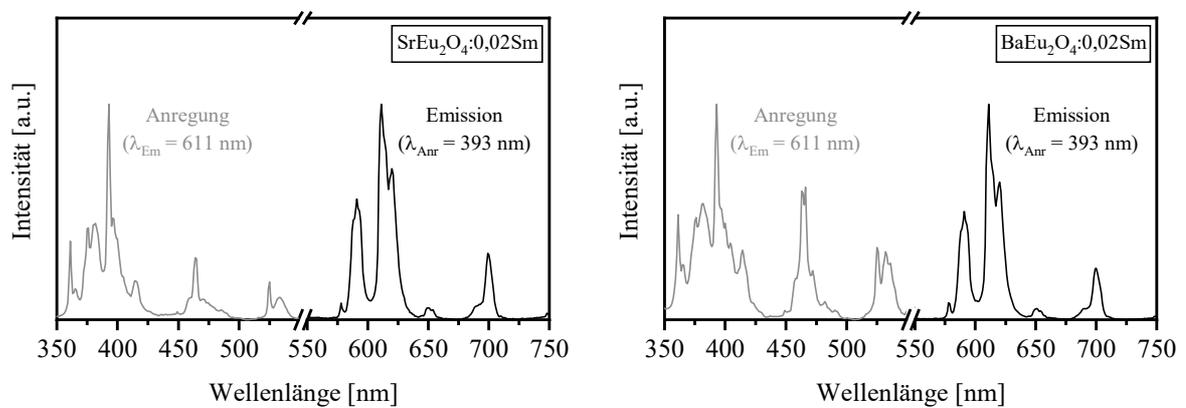


Abb. 69: Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{SrEu}_2\text{O}_4:0,02\text{Sm}$ und $\text{BaEu}_2\text{O}_4:0,02\text{Sm}$, Raumtemperatur

Tab. 26: Beobachtete Eu^{3+} -Übergänge in SrEu_2O_4 und BaEu_2O_4 (Nummerierung siehe Abb. 68)

Peak Nr.	Übergang	beobachtete Wellenlänge [nm] im Wirtsgitter	
		SrEu_2O_4	BaEu_2O_4
1	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{D}_4$	361	362
2	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{L}_8$	365	366
3	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{G}_3$	376	376
4	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{L}_7$	382	381
5	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{L}_6$	393	393
6	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{D}_3$	414	414
7	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{D}_2$	464	463
8	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{D}_1$	525	526
9	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_0$	578	579
10	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_1$	590	591
11	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_2$	611	611
12	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_3$	654	651
13	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_4$	691	691
14	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_5$	699	699

5.3.4. Dy³⁺-Lumineszenz in SrEu₂O₄ und BaEu₂O₄

Die Dotierung der Wirtsgitter SrEu₂O₄ und BaEu₂O₄ erfolgte, analog zum vorherigen Abschnitt, mittels Pechini-Synthese bei 1300 °C für 6 Stunden. Der Dotierungsbereich lag zwischen 0,25 und 2,00 mol-%. Die resultierenden Röntgendiffraktogramme sind in Abb. 70 gezeigt. Es wurden keine neuen Nebenphasen detektiert.

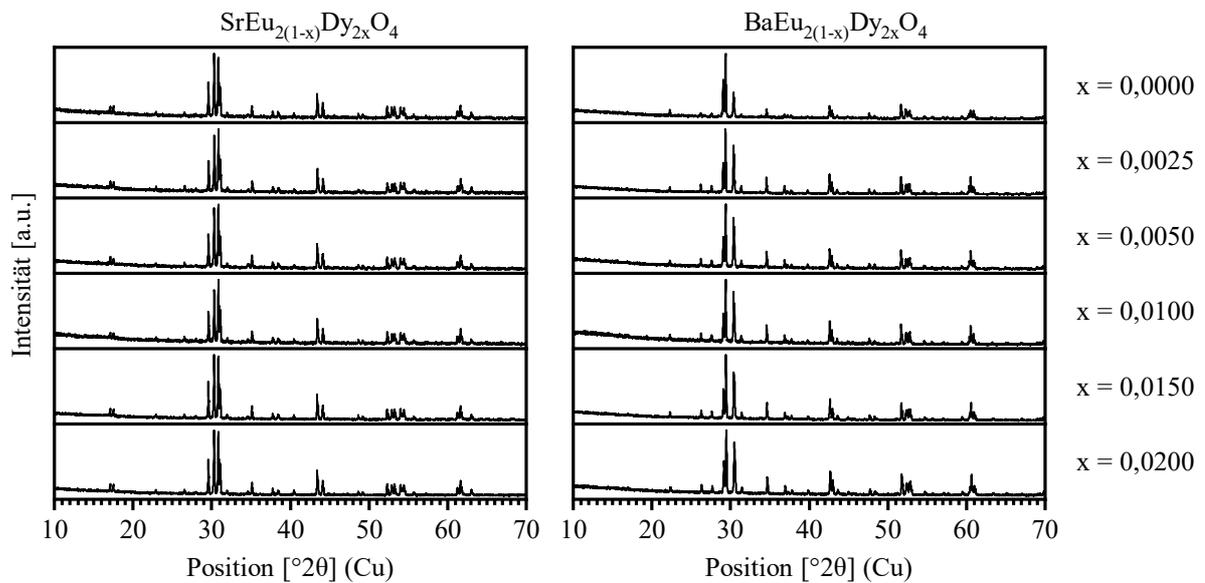


Abb. 70: Röntgendiffraktogramme von mit Dy³⁺ dotiertem SrEu₂O₄ und BaEu₂O₄

Die Anregungs- und Emissionsspektren von mit bis zu 2 mol-% Dy³⁺ dotiertem SrEu₂O₄ und BaEu₂O₄ sind in Abb. 71 gezeigt. Auch hier ist die Lumineszenzintensität von SrEu₂O₄ und BaEu₂O₄ so intensiv, dass die Anregungswellenlänge von Dy³⁺ nicht sichtbar ist (Eu³⁺: ⁷F₀ → ⁵L₈ bei 361 bzw. 362 nm und Dy³⁺: ⁶H_{15/2} → ⁴I_{11/2} bei ca. 360 nm). Weiterhin lassen sich im Emissionsspektrum lediglich die für Eu³⁺ typischen Übergänge, die bereits in Abschnitt 5.3.3 aufgelistet sind, erkennen. Das liegt zum einen an der starken Emission von Eu³⁺ und zum anderen an einem Energieübertrag von Dy³⁺ auf Eu³⁺. Das ⁴F_{9/2}-Niveau von Dy³⁺ und das ⁵D₀-Niveau von Eu³⁺ liegen nah genug, um eine photonenunterstützte, strahlungsfreie Relaxation von Dy³⁺ und Eu³⁺ zu ermöglichen. [165]. Aufgrund der großen Überlappung der Anregungswellenlänge von Eu³⁺ und Dy³⁺ wurden keine konzentrationsabhängigen Lumineszenzmessungen durchgeführt.

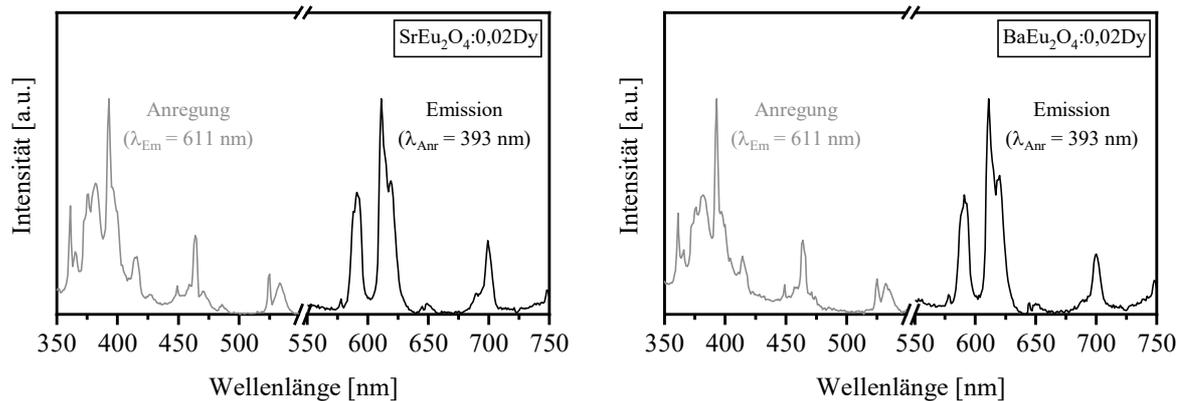


Abb. 71: Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{SrEu}_2\text{O}_4:0,02\text{Dy}$ und $\text{BaEu}_2\text{O}_4:0,02\text{Dy}$, Raumtemperatur

5.3.5. Zusammenfassung und Diskussion

Die Ergebnisse der reinphasig synthetisierten Erdalkali-Seltenerd-Oxide sind in Tab. 27 übersichtlich zusammengefasst. Die Kombinationen ergeben sich aus den eingesetzten Erdalkali-Oxiden von Calcium, Strontium und Barium (Spalten zwei, drei und vier) und den Oxiden der Seltenen Erden (Zeilen zwei bis zehn). Die Oxide sind entsprechend ihrer Ionenradien sortiert, was durch die Pfeile gekennzeichnet ist. Die theoretischen Zusammensetzungen der nicht stabilen Erdalkali-Seltenerd-Oxide sind durchgestrichen hinterlegt. Die stabilen Phasen, welche reinphasig im Rahmen der Arbeit mittels Pechini-Methode synthetisiert wurden, sind grau hinterlegt. Lediglich bei BaLa_2O_4 konnte ein geringer Anteil der Nebenphase La_2O_3 nicht vollständig entfernt werden. Das Sternchen über BaSc_2O_4 zeigt an, dass dies die einzige Synthesereihe ist, die eine abweichende Kristallstruktur besitzt (monoklin, RG: C2/c, Nr. 15). Im Vergleich zur klassischem Festkörpersynthese waren die für Pechini-Methode notwendigen Sintertemperaturen und -zeiten niedriger bzw. kürzer. Beispielweise wurden zur reinphasigen Synthese von CaSc_2O_4 mittels Pechini-Methode 6 h bei 1400 °C (vgl. 4 h bei 1500 °C) und zur Synthese von SrSm_2O_4 insgesamt 4 h bei 1300 °C (vgl. 1650 °C für 1 h) benötigt [166, 167].

Abgesehen von BaSc_2O_4 kristallisieren alle stabilen Phasen der Synthesereihe der Erdalkali-Seltenerd-Oxide im orthorhombischen Kristallsystem Pnma (Nr. 62). Die Struktur besteht aus verzerrten $[\text{REEO}_6]$ -Oktaedern, welche über alle Ecken und Kanten mit benachbarten Oktaedern verknüpft sind. Der resultierende Zwischenraum wird zentral durch das zweiwertige Erdalkalium besetzt. Die Stabilität der Verbindungen hängt stark von der Ionengröße der Erdalkali- und Seltenerdelemente ab. Die Ionengrößen der diskutierten Elemente sind in Abb. 72 dargestellt.

Tab. 27: Darstellung der durchgeführten Synthesen von Erdalkali-Seltenerd-Oxiden

	CaO	SrO	BaO
La₂O₃	CaLa₂O₄	SrLa₂O₄	(BaLa ₂ O ₄)
Nd₂O₃	CaNd₂O₄	SrNd₂O₄	BaNd ₂ O ₄
Sm₂O₃	CaSm₂O₄	SrSm ₂ O ₄	BaSm ₂ O ₄
Eu₂O₃	CaEu₂O₄	SrEu ₂ O ₄	BaEu ₂ O ₄
Gd₂O₃	CaGd₂O₄	SrGd ₂ O ₄	BaGd ₂ O ₄
Dy₂O₃	CaDy₂O₄	SrDy ₂ O ₄	BaDy ₂ O ₄
Y₂O₃	CaY₂O₄	SrY ₂ O ₄	BaY ₂ O ₄
Yb₂O₃	CaYb₂O₄	SrYb ₂ O ₄	BaYb ₂ O ₄
Sc₂O₃	CaSc ₂ O ₄	SrSc ₂ O ₄	BaSc ₂ O ₄ *

grau hinterlegt: stabile Verbindungen

in Klammern: Nebenphase in kleinen Mengen vorhanden

durchgestrichen: theoretische Zusammensetzung der nicht stabilen Verbindung

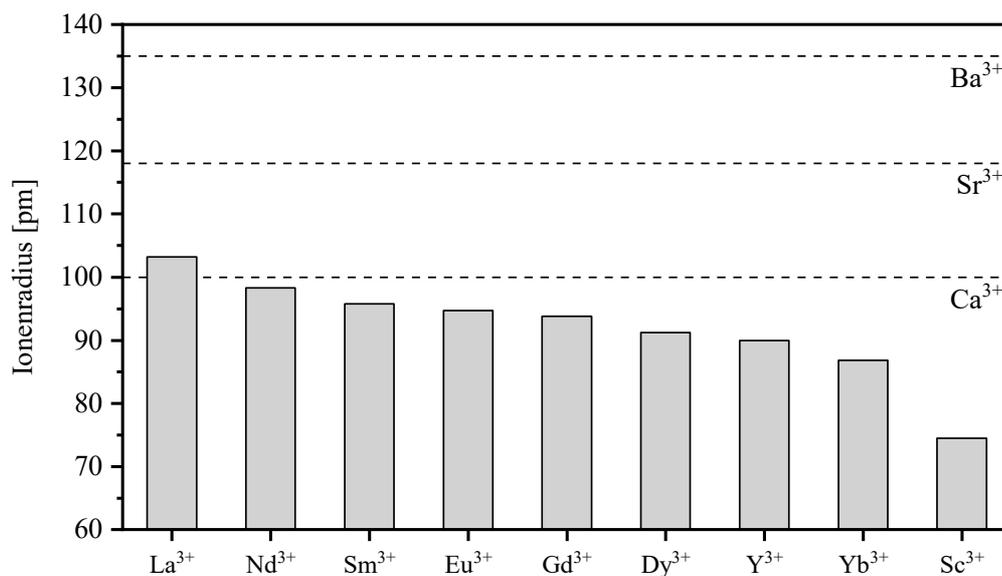


Abb. 72: Ionenradien der ausgewählten Elemente

Bei der Calcium-Reihe ist CaSc₂O₄ die einzige stabile Phase: die kleinen Calcium-Ionen konnten lediglich mit den kleineren [ScO₆]-Oktaedern stabilisiert werden. In der Synthesereihe mit Strontium waren die Verbindungen mit den größeren Seltenen Erden (Lanthan und Neodym) nicht stabil, dafür jedoch die Verbindungen mit Samarium bis zu Ytterbium. Bei der Barium-Reihe sind die Verbindungen mit den größeren Seltenen Erden (Lanthan bis Yttrium) stabil, lediglich mit dem vergleichsweise kleinen Yttrium-Ion konnte kein stabiles Synthesergebnis erzielt werden. Bildet man für die stabilen orthorhombischen Erdalkali-

Seltenerd-Oxide $MREE_2O_4$ ein Verhältnis der Ionenradien der Seltenen Erden und Erdalkali-Metalle ($r_{REE^{3+}}/r_{M^{2+}}$), dann ist festzustellen, dass dies zwischen 0,64 ($r_{Yb^{3+}}/r_{Ba^{2+}}$) und 0,81 ($r_{Sm^{3+}}/r_{Sr^{2+}}$) liegt. Die einzige stabile Verbindung in der Calcium-Reihe ($CaSc_2O_4$) erfüllte diese Voraussetzung mit einem Wert von 0,75.

Die verfeinerten Gitterparameter sind in Abb. 73 gegen die Ionenradien der Seltenen Erden aufgetragen. Zur besseren Einordnung wurden die Werte durch Literaturwerte ergänzt (nicht gefüllte Symbole). Es zeigt sich bei allen vier Parametern ein linearer Zusammenhang.

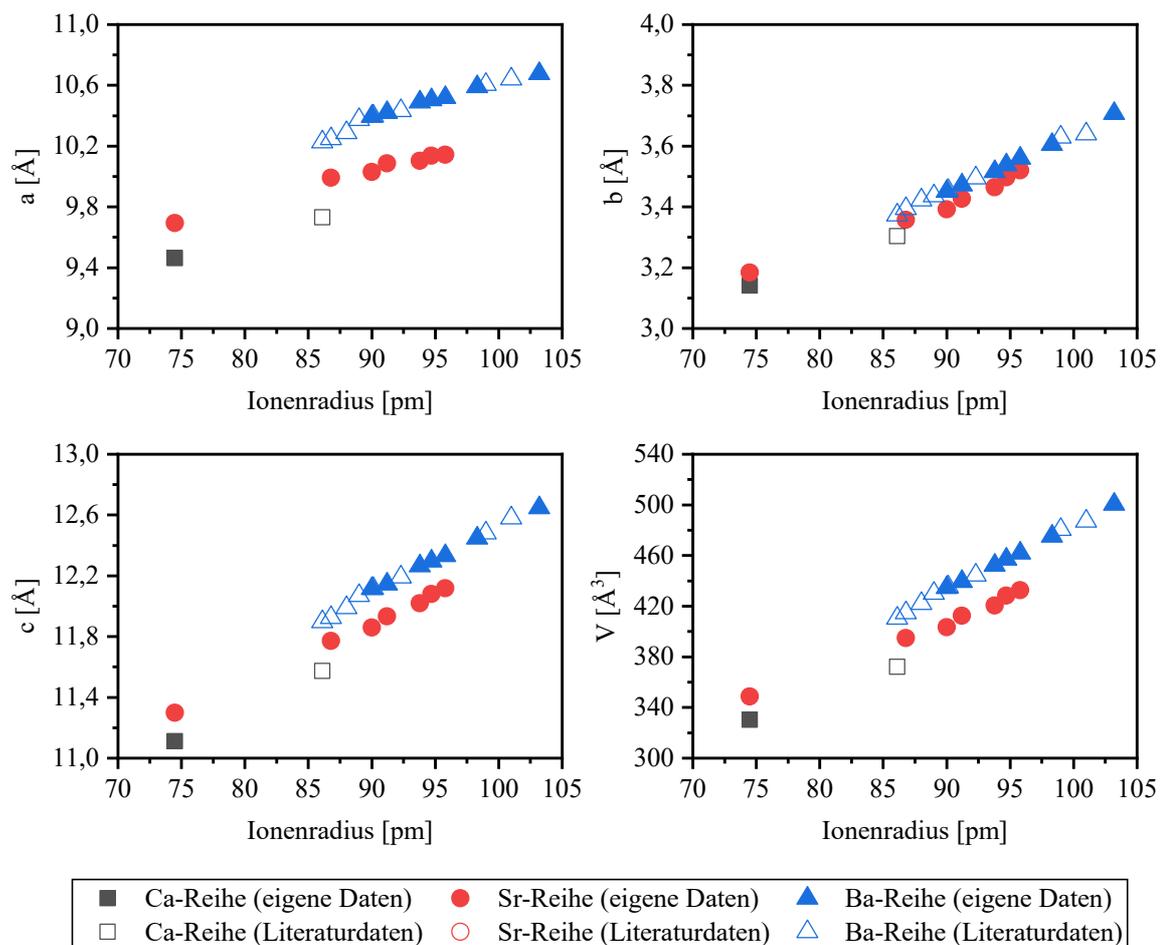


Abb. 73: Abhängigkeit der orthorhombischen $MREE_2O_4$ -Gitterparameter vom REE^{3+} -Ionenradius

Die Lumineszenzspektren der Wirtsgitter $SrEu_2O_4$ und $BaEu_2O_4$ zeigen scharfe Linien, die den elektronischen Übergängen zwischen verschiedenen Energieniveaus der Europium-Ionen entsprechen. Die optimale Anregungswellenlänge von 393 nm entspricht dem elektronischen Übergang ${}^7F_0 \rightarrow {}^5L_6$. Die Peaks im Emissionsspektrum konnten den Eu^{3+} -Übergängen zugeordnet werden. Dabei lag der intensivste Übergang bei 611 nm (${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_2$).

Die Monodotierung von SrEu_2O_4 und BaEu_2O_4 mit Sm^{3+} und Dy^{3+} erfolgte mittels Pechini-Methode bei $1300\text{ }^\circ\text{C}$ für 6 Stunden. Die Dotierungskonzentrationen betragen jeweils zwischen 0,25 und 2,00 mol-%. Die Anregungs- und Emissionspektren der dotierten Phasen zeigten keine wesentlichen Unterschiede zu denen der nicht dotierten Wirtsgitter. Die Übergänge von Sm^{3+} und Dy^{3+} wurden von Eu^{3+} -Übergängen überlagert, weshalb eine eindeutige Zuordnung nicht möglich war.

unter leicht reduzierenden Bedingungen durch Ausnutzen der Stabilität der halbgefüllten Orbitale der Eu^{2+} -Ionen synthetisiert werden.

Das System $\text{SrO-B}_2\text{O}_3$ ist eines der grundlegenden glasbildenden Systeme. In diesem System sind sechs kristalline Phasen bekannt: $\text{Sr}_3\text{B}_2\text{O}_6$, $\text{Sr}_2\text{B}_2\text{O}_5$, SrB_2O_4 , $\text{Sr}_4\text{B}_{14}\text{O}_{25}$, SrB_4O_7 und $\text{Sr}_2\text{B}_{16}\text{O}_{26}$.

Analog zum System $\text{Eu}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ enthalten einige der Verbindungen im System $\text{Eu}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3$ Europium in der Oxidationsstufe +II, wie z. B. EuB_2O_4 und $\text{Eu}_2\text{B}_2\text{O}_5$. SrEu_2O_4 ist die einzige in der Literatur dokumentierte Verbindung im System $\text{SrO-Eu}_2\text{O}_3$. Die Eigenschaften dieser Phase sind in Abschnitt 5.3.2 beschrieben.

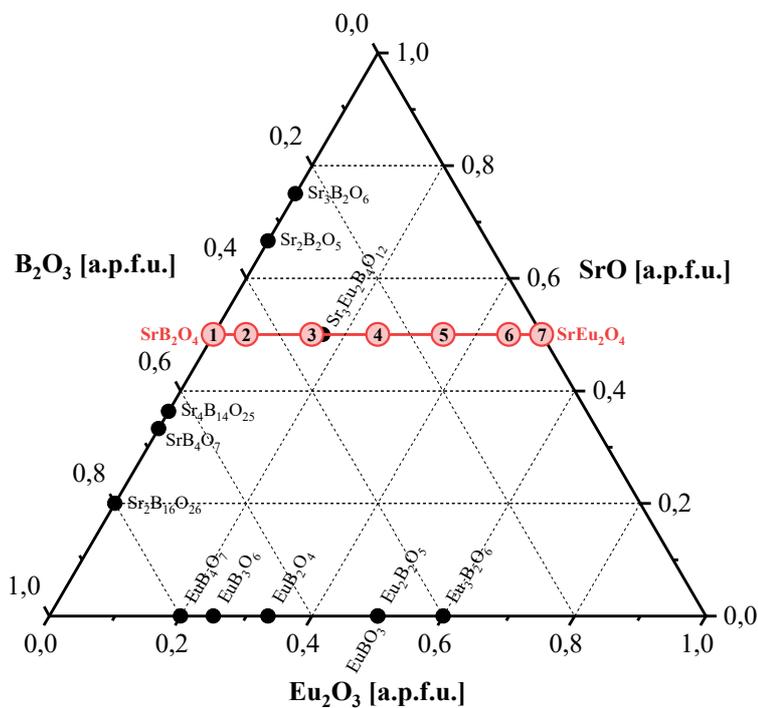


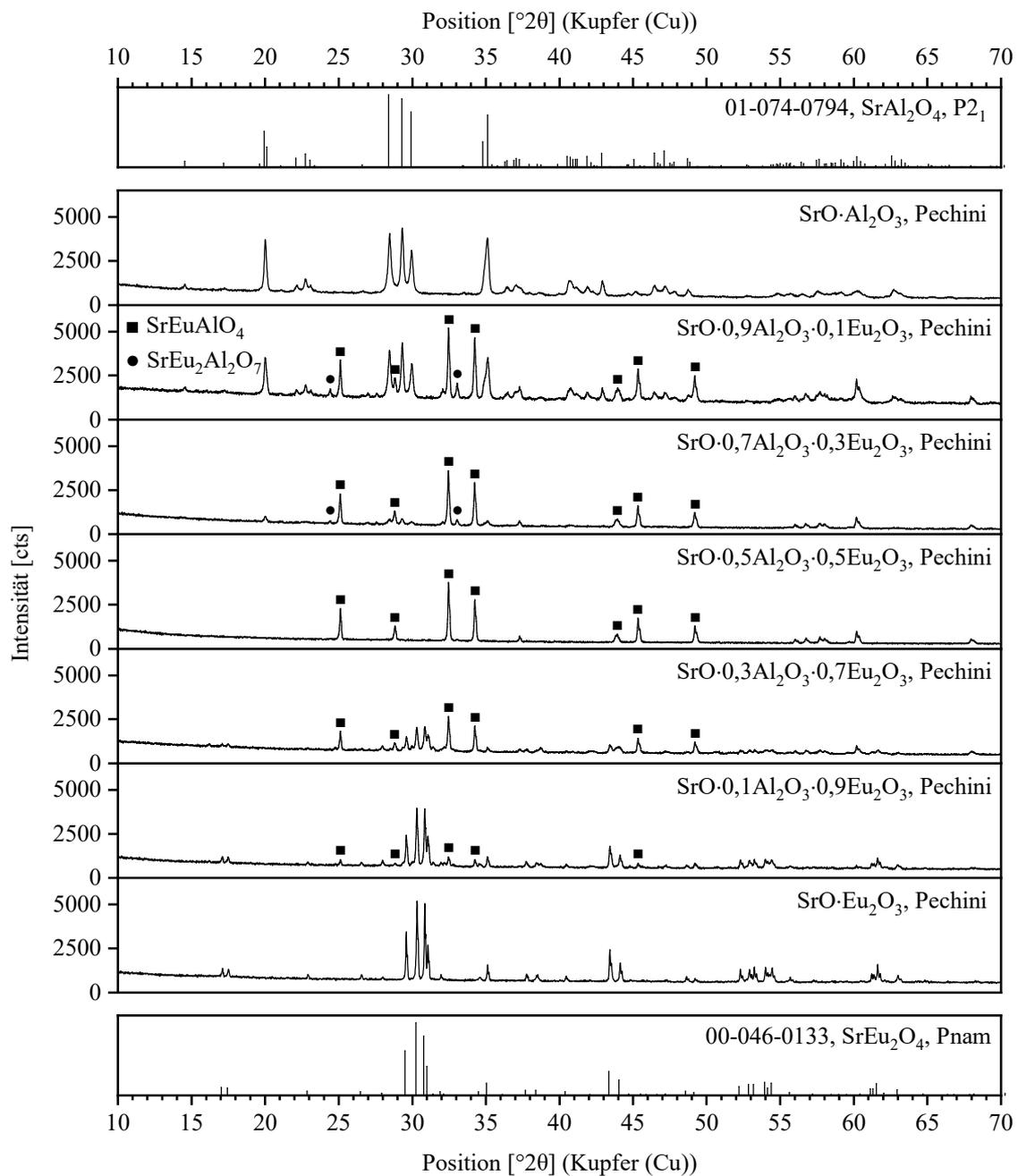
Abb. 75: Ternäres Diagramm $\text{SrO-B}_2\text{O}_3\text{-Eu}_2\text{O}_3$, rote Punkte entsprechen der theoretischen Zusammensetzung der eigenen Synthesen, schwarze Punkte entsprechen Verbindungen, die aus den Datenbanken ICDD und ICSD bekannt sind

5.4.2. Synthesereihe $\text{SrEu}_x\text{Al}_{2-x}\text{O}_4$ ($0 \leq x \leq 2$)

Die Synthesen der Mischkristallreihe erfolgten mittels Pechini-Methode bei 1300 °C für 4 Stunden. Die Einwaagestöchiometrie der Synthesereihe und die entstandenen Phasen sind in Tab. 28 angegeben. Beim Auftreten mehrerer Phasen sind diese nach abnehmendem Gehalt geordnet.

Tab. 28: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Mischreihe $\text{SrEu}_x\text{Al}_{2-x}\text{O}_4$ ($0 \leq x \leq 2$), bei Auftreten mehrerer Phasen Sortierung nach abnehmendem Gehalt

Nr.	Einwaagestöchiometrie	Ergebnisse
1	$\text{SrO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$	SrAl_2O_4
2	$\text{SrO} \cdot 0,9\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 0,1\text{Eu}_2\text{O}_3$	SrAl_2O_4 ; SrEuAlO_4 ; $\text{SrEu}_2\text{Al}_2\text{O}_7$
3	$\text{SrO} \cdot 0,7\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 0,3\text{Eu}_2\text{O}_3$	SrEuAlO_4 ; $\text{SrEu}_2\text{Al}_2\text{O}_7$; SrAl_2O_4
4	$\text{SrO} \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Eu}_2\text{O}_3$	SrEuAlO_4
5	$\text{SrO} \cdot 0,3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 0,7\text{Eu}_2\text{O}_3$	SrEuAlO_4 ; SrEu_2O_4
6	$\text{SrO} \cdot 0,1\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 0,9\text{Eu}_2\text{O}_3$	SrEu_2O_4 ; SrEuAlO_4
7	$\text{SrO} \cdot \text{Eu}_2\text{O}_3$	SrEu_2O_4

Abb. 76: Röntgendiffraktogramme der Mischkristallreihe $\text{SrEu}_x\text{Al}_{2-x}\text{O}_4$ ($x = 0; 0,1; 0,3; 0,5; 0,7; 0,9; 1$)

Die Kristallstruktur der Endglieder der Syntheseriehe $\text{SrEu}_x\text{Al}_{2-x}\text{O}_4$ ($0 \leq x \leq 2$), SrAl_2O_4 und SrEu_2O_4 , wurden bereits in den Abschnitten 5.1.2 und 5.3.2 ausführlich beschrieben. Die Röntgendiffraktogramme der Verbindungen, die den schrittweisen Austausch des Aluminiumkations gegen Europium zeigen, sind in Abb. 76 zu sehen. Die Phase Strontiumeuropiumaluminat SrEuAlO_4 entstand schon bei der Stöchiometrie $\text{SrO} \cdot 0,9\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 0,1\text{Eu}_2\text{O}_3$. Zwischen $0 < x < 0,5$ konnte eine geringfügige Menge der Nebenphase $\text{SrEu}_2\text{Al}_2\text{O}_7$ (ICDD 01-076-0095 [168]) nachgewiesen werden. Bei $x = 0,5$ liegt lediglich reinphasiges SrEuAlO_4 vor. Ein weiterer Austausch von Aluminium gegen Strontium führt zur verstärkten Synthese von SrEu_2O_4 , bis bei $x = 2$ ausschließlich diese Phase als Produkt vorliegt.

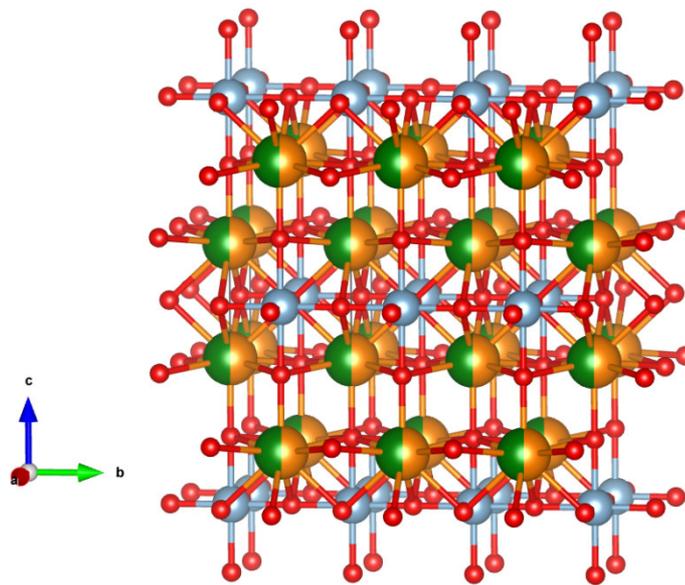


Abb. 77: Kristallstruktur von SrEuAlO_4

Die intermediäre Phase Strontiumeuropiumaluminat kristallisiert im tetragonalen Kristallsystem (Raumgruppe $I4/mmm$) mit $Z = 2$. Die entsprechende Kristallstruktur ist in Abb. 77 gezeigt. Die AlO_6 -Oktaeder bilden über geteilte Ecken eine zweidimensionale Schicht. Zwischen den Schichten, auf der Punktlage $4e$, sind Sr^{2+} und Eu^{3+} statistisch verteilt und jeweils von neun Sauerstoff umgeben. Die Verfeinerung der Gitterparameter erfolgte mithilfe der ICSD-Karte 157158 [169], dargestellt in Abb. 78. Sie betragen $a = 3,7015(2) \text{ \AA}$, und $c = 12,399(6) \text{ \AA}$.

Die zu SrEuAlO_4 isotypischen Verbindungen, die Erdalkalimetalle, Seltene Erden und Aluminium im Verhältnis von 1:1:1 enthalten, werden in der Arbeit als Erdalkali-Seltenerd-Aluminate bezeichnet und in Abschnitt 5.5 genauer untersucht.

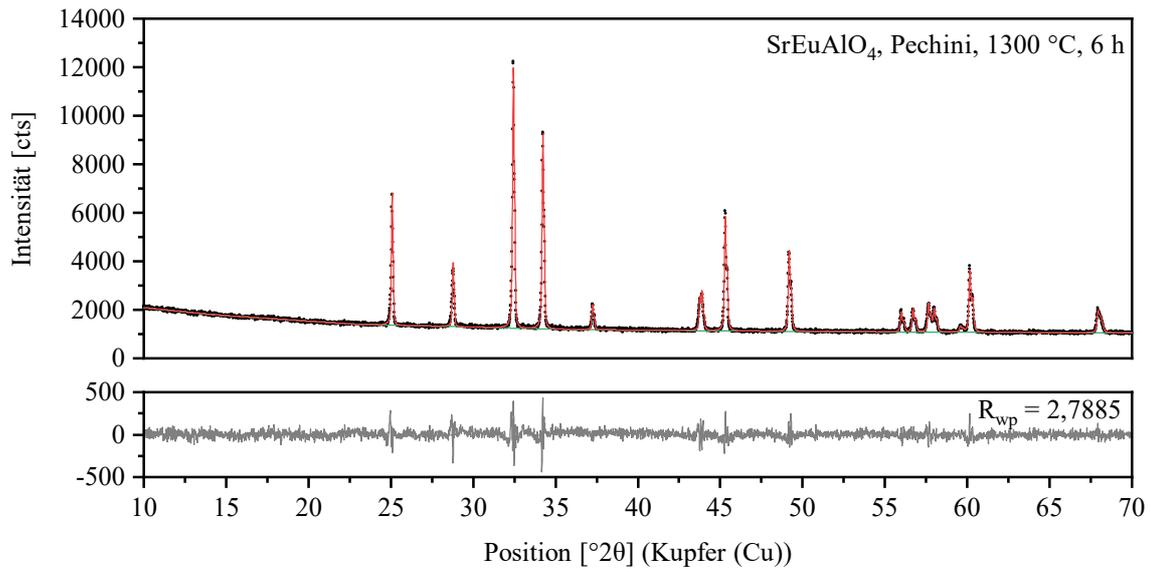


Abb. 78: Graphische Darstellung der Verfeinerung von SrEuAlO₄ mittels Rietveld-Fit

5.4.3. Synthesereihe SrEu_xB_{2-x}O₄ (0 ≤ x ≤ 2)

Die Synthese der Mischkristallreihe SrEu_xB_{2-x}O₄ (0 ≤ x ≤ 2) erfolgte mittels Festkörpermethode im Temperaturbereich zwischen 900 und 1100 °C für 4 bis 8 Stunden. Die Einwaagestöchiometrie der Synthesereihe sowie die entstandenen Phasen sind in Tab. 29 angegeben. Beim Auftreten mehrerer Phasen sind diese nach ihrem abnehmenden Gehalt geordnet.

Tab. 29: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Mischreihe SrEu_xB_{2-x}O₄ (0 ≤ x ≤ 2), bei Auftreten mehrerer Phasen Sortierung nach abnehmendem Gehalt

Nr.	Einwaagestöchiometrie	Ergebnisse
1	SrO·1,0B ₂ O ₃	SrB ₂ O ₄
2	SrO·0,9B ₂ O ₃ ·0,1Eu ₂ O ₃	SrB ₂ O ₄ ; Sr ₃ Eu ₂ B ₄ O ₁₂
3	SrO·0,7B ₂ O ₃ ·0,3Eu ₂ O ₃	Sr ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ ; SrB ₂ O ₄ (6 %)
4	SrO·0,5B ₂ O ₃ ·0,5Eu ₂ O ₃	Eu ₂ O ₃ (kubisch und monoklin); Sr ₃ B ₂ O ₆ ; Sr ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄ ; EuBO ₃
5	SrO·0,3B ₂ O ₃ ·0,7Eu ₂ O ₃	SrEu ₂ O ₄ ; Sr ₃ B ₂ O ₆ ; Eu ₂ O ₃
6	SrO·0,1B ₂ O ₃ ·0,9Eu ₂ O ₃	SrEu ₂ O ₄ ; Eu ₂ O ₃ ; Sr ₃ B ₂ O ₆
7	SrO·1,0Eu ₂ O ₃	SrEu ₂ O ₄

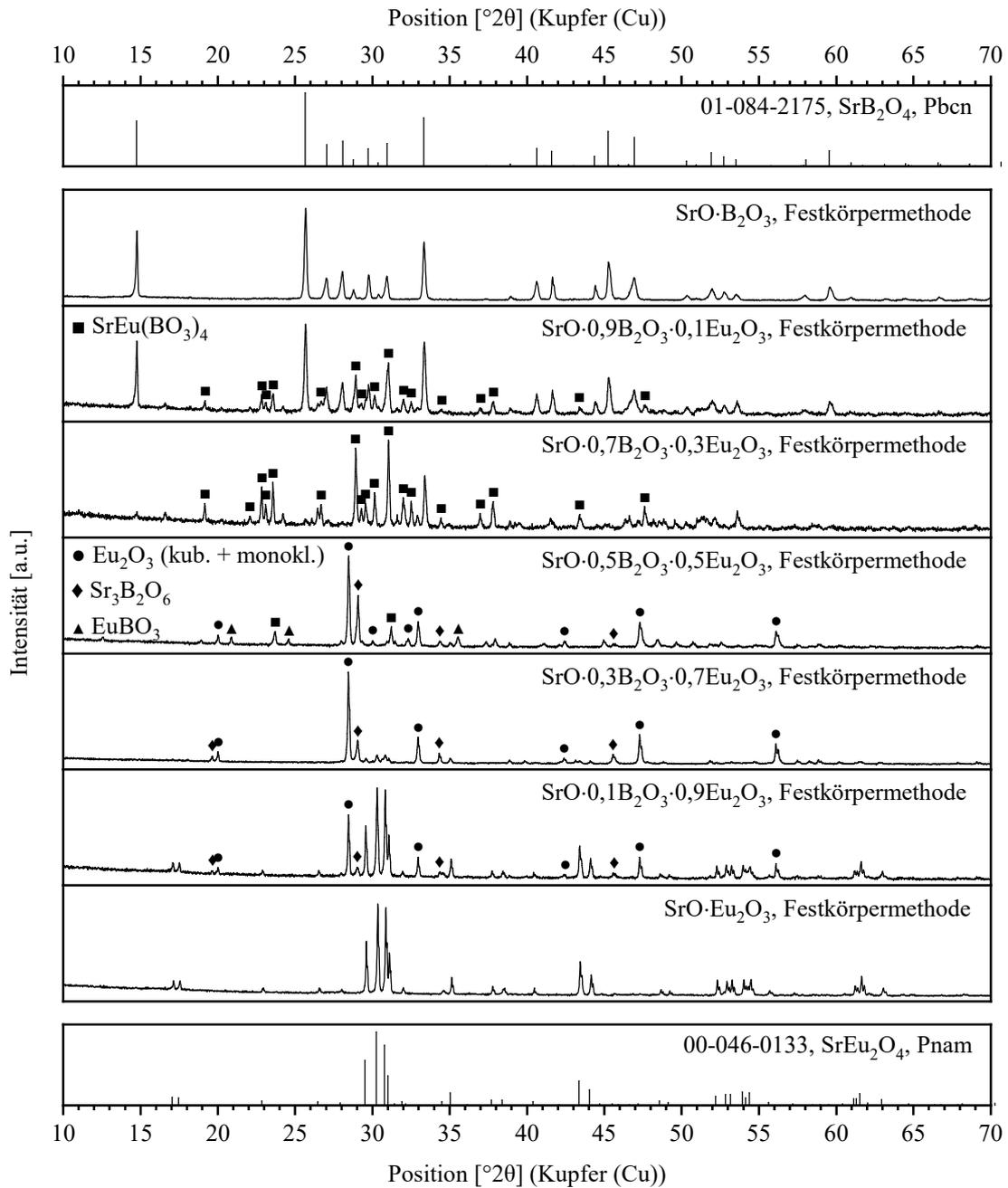


Abb. 79: Röntgendiffraktogramme der Mischkristallreihe $\text{SrEu}_x\text{Al}_{2-x}\text{O}_4$ ($x = 0; 0,1; 0,3; 0,5; 0,7; 0,9; 1$)

Das Syntheseprodukt von Mischung 3 (vgl. Tab. 29) enthielt hauptsächlich $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ und 6 M.-% SrB_2O_4 (Rietveld-Analyse). Durch Anpassung der gewichteten Ausgangszusammensetzung auf $\text{SrO} \cdot 0,67\text{B}_2\text{O}_3 \cdot 0,33\text{Eu}_2\text{O}_3$ wurde die intermediäre Phase $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ bei 1300°C durch die Festkörpermethode synthetisiert (siehe Abb. 80). Ihre Kristallstruktur ist in Abb. 81 dargestellt ($Z = 4$). Es gibt 13 kristallographisch unabhängige Atompositionen, von denen drei Gitterplätze von Eu- und Sr-Atomen gemeinsam besetzt sind. Die Besetzungszahlen für die drei Atompositionen M1, M2 und M3, dargestellt in Abb. 81, wurden mit Hilfe der

Rietveld-Verfeinerung bestimmt: sie betragen 0,330Sr und 0,670Eu für M1, 0,691Sr und 0,309Eu für M2 und 0,644Sr und 0,356Eu für M3. Diese Metallkationen sind durch acht Sauerstoffatome koordiniert und bilden verzerrte MO_8 -Polyeder ohne Inversionszentrum. Jedes Boratom ist mit drei Sauerstoffatomen verbunden und bildet so ein BO_3 -Dreieck. Die verfeinerten Gitterparameter betragen $a = 7,412(8) \text{ \AA}$, $b = 16,093(8) \text{ \AA}$ und $c = 8,766(2) \text{ \AA}$.

Die zu $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ isotypischen Verbindungen, die Erdalkali-Seltenerd-Borate, werden in Abschnitt 5.6 genauer untersucht.

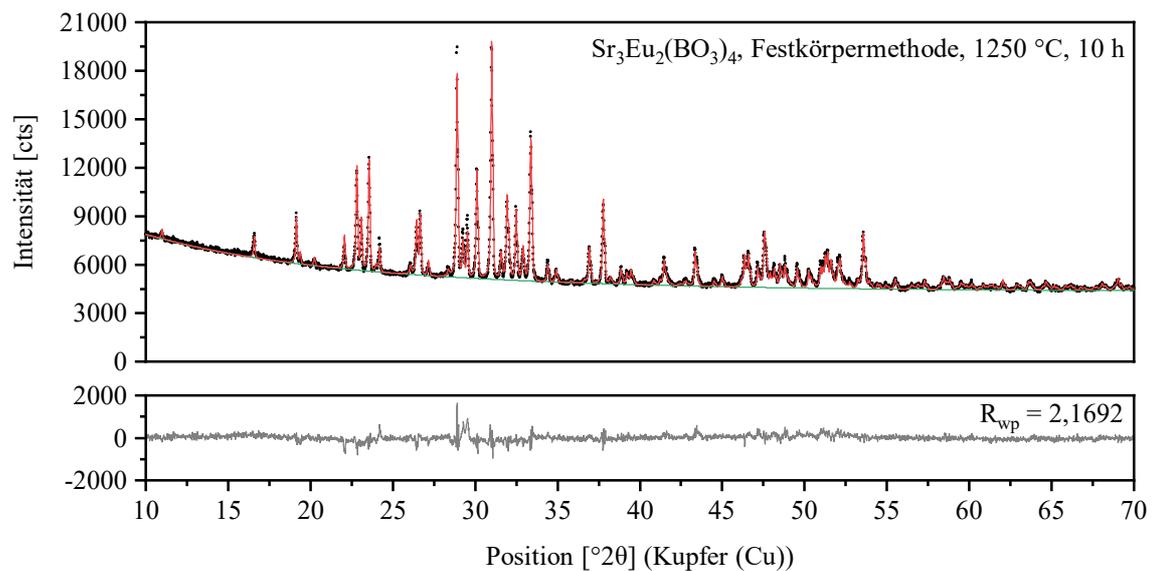


Abb. 80: Graphische Darstellung der Verfeinerung von $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ mittels Rietveld-Fit

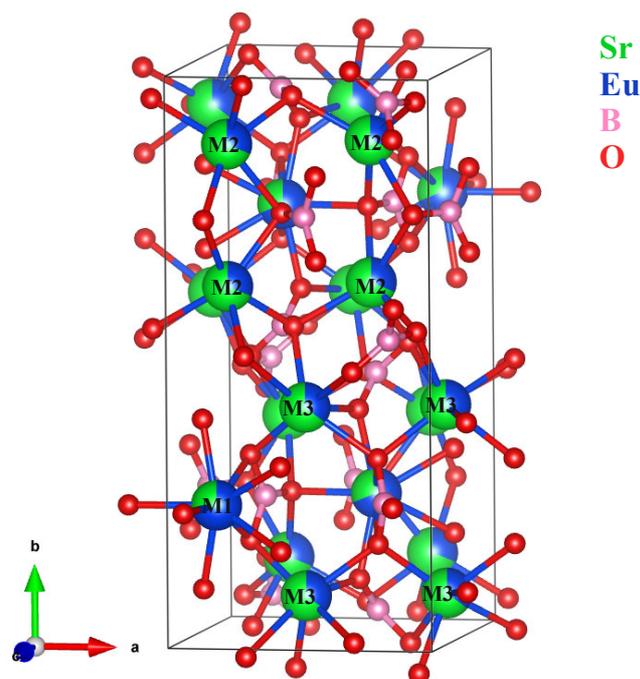


Abb. 81: Kristallstruktur von $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$

5.4.4. Zusammenfassung und Diskussion

Ausgehend von den in vorangegangenen Abschnitten synthetisierten und charakterisierten Phasen SrAl_2O_4 und SrB_2O_4 wurden in diesem Teil der Arbeit Aluminium- und Bor-Atome schrittweise gegen Europium ausgetauscht. Für die Syntheseriehe $\text{SrEu}_{2x}\text{Al}_{2(1-x)}\text{O}_4$ ($x = 0,1; 0,3; 0,5; 0,7; 0,9$ und $1,0$) wurde die Pechini-Methode eingesetzt ($1300\text{ }^\circ\text{C}$, 4 h). Für die Syntheseriehe $\text{SrEu}_{2x}\text{B}_{2(1-x)}\text{O}_4$ ($x = 0,1; 0,3; 0,5; 0,7; 0,9$ und $1,0$) kam die Festkörpermethode ($900 - 1100\text{ }^\circ\text{C}$; $4 - 8\text{ h}$) zum Einsatz .

Aufgrund des recht großen Unterschieds der Ionenradien von Europium ($94,7\text{ pm}$) zu Aluminium ($53,5\text{ pm}$) bzw. Bor (27 pm) kam es bei der Herstellung der Synthesereihen zu keiner Mischkristallbildung.

Im System $\text{SrO} \cdot x\text{Eu}_2\text{O}_3 \cdot (1-x)\text{Al}_2\text{O}_3$ entstand die intermediäre Phase SrEuAlO_4 schon beim ersten Einbauschritt ($x = 0,1$). Bei $x = 0,5$ lag diese Phase reinphasig vor. Der geringe Unterschied der Ionenradien von Strontium (118 pm) und Europium ($94,7\text{ pm}$) ist wesentlich für die Stabilität dieser Struktur, in der die beiden Ionen eine Atomposition statistisch gleichmäßig verteilt besetzen. Es handelt sich um eine tetragonale Struktur mit der Raumgruppe $I4/mmm$. Abgesehen von der Arbeit von Fava et al. von 1972, in der die Struktur bestimmt wurde, gibt es keine weiteren Publikationen zu der intermediären Verbindung [170]. Die veröffentlichten Gitterparameter ($a = 3,703\text{ \AA}$ und $c = 12,39\text{ \AA}$) sind in großer Übereinstimmung mit den hier ermittelten Daten ($a = 3,701\text{ \AA}$ und $c = 12,40\text{ \AA}$).

Im System $\text{SrO} \cdot x\text{Eu}_2\text{O}_3 \cdot (1-x)\text{B}_2\text{O}_3$ wurde $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ als einzige intermediäre Phase detektiert. Bei $x = 0,3$ war diese das Hauptsyntheseprodukt. Durch Anpassung der gewichteten Ausgangszusammensetzung konnte die intermediäre Phase mittels Festkörpersynthese reinphasig synthetisiert werden. Sie kristallisiert in orthorhombischer Struktur mit der Raumgruppe Pnma (Nr. 62).

5.5. Erdalkali-Seltenerd-Aluminate

5.5.1. Einleitung

Erdalkali-Seltenerd-Aluminate mit der Summenformel $MREEAlO_4$ sind von hohem wissenschaftlichem Interesse, da sie eine ausgezeichnete Anpassung der Gitter- und Wärmeausdehnung an Hochtemperatursupraleiter aufweisen. Sie gehören zu den wichtigsten Substratmaterialien für die Herstellung supraleitender Dünnschichten.

Mit $SrLaAlO_4$ wurde eine der ersten Verbindungen von Popper und Ruddlesden im Jahr 1957 synthetisiert und die kristallographischen Daten veröffentlicht [171]. Seither wurden Struktur, Kristallisation und Eigenschaften von $MREEAlO_4$ von einer Vielzahl an Autoren untersucht [172–180]. Alle Verbindungen besitzen die vollständige Symmetrie des Strukturtyps K_2NiF_4 , $I4/mmm$. Dabei sind die M^{2+} - und REE^{3+} -Ionen im Verhältnis 1:1 auf die neun koordinierten Stellen der C_{4v} -Symmetrie verteilt, während Al^{3+} -Ionen auf D_{4h} -Stellen von sechs Sauerstoffatomen umgeben sind. Die Strontium-Europium-Aluminate $SrEuAlO_4$ im System SrO - Eu_2O_3 - Al_2O_3 wurden bereits in Abschnitt 5.4.2 synthetisiert und charakterisiert.

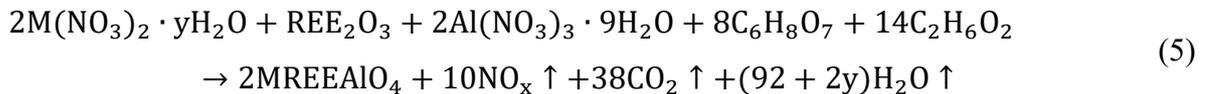
Zvereva et al. [180] stellten fest, dass diese Struktur durch 1:1-Verwachsung von Steinsalz (MO) und Perowskit-Schichten ($REEAlO_3$) gebildet wird, und wiesen auf das Problem der Kompatibilität dieser Schichten hin. Die Autoren diskutierten den Toleranzfaktor für diese Struktur und kamen zu dem Schluss, dass $CaYAlO_4$ und $SrLaAlO_4$ stabile Verbindungen sind, $CaLaAlO_4$ jedoch instabil ist. Sie erklärten dies anhand der schwachen Al-O-Bindung in $CaLaAlO_4$. Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine systematische Untersuchung an Erdalkali-Seltenerd-Aluminaten $MREEAlO_4$ mit $M = Ca, Sr, Ba$ und $REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y$ und Yb vorgenommen. Die Phasen wurden mittels Pechini-Methode synthetisiert.

In den letzten Jahren wurden die mit Seltenen Erden dotierten $MREEAlO_4$ vermehrt für die Anwendung als Lasermaterialien und Leuchtstoffe untersucht. Die vielversprechendsten dabei sind $CaGdAlO_4:Er^{4+}$ [181], $SrGdAlO_4:Eu^{3+}$ [182], $CaGdAlO_4:Yb^{3+}$ [183], $CaYAlO_4:Tb^{3+}/Eu^{3+}$ [184], $SrLaAlO_4:Ho^{3+}/Er^{3+}$ [185] und $CaLaAlO_4:Tb^{3+}/Eu^{3+}$ [186].

In dieser Arbeit wurden $CaEuAlO_4$ und $SrEuAlO_4$ mit Sm^{3+} bzw. mit Dy^{3+} dotiert.

5.5.2. Synthese und Charakterisierung von Erdalkali-Seltenerd-Aluminaten

Die Synthese von $MREEAlO_4$ ($M = Ca, Sr, Ba$) erfolgte mithilfe der Pechini-Methode im Temperaturbereich von 1000 bis 1450 °C. Die verallgemeinerte Reaktionsgleichung unter Berücksichtigung der Molverhältnisse von Erdalkalikalium, Zitronensäure und Ethylenglykol 1:4:7 ist in Formel (5) dargestellt.



CaREEAlO₄ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y, Yb, Sc)

Tab. 30 fasst die Ergebnisse der Synthese der Calcium-Seltenerd-Aluminate zusammen. Der Einbau der Seltenen Erden in Aluminate waren in der Ca-Serie von Lanthan mit großem Ionenradius bis zu Ytterbium mit kleinem Ionenradius durchweg erfolgreich. Dabei ist zu beachten, dass bei $CaO \cdot 0,5La_2O_3 \cdot 0,5Al_2O_3$ die stabile Phase $LaAlO_3$ (ICDD: 01-070-4096 [187]) bereits bei einer Sintertemperatur von 950 °C entstanden ist und bei weiterer Temperaturerhöhung nicht weiterreagierte. Die weitere Erhöhung der Sintertemperatur führte zur Verschiebung der Produktverhältnisse zugunsten von $LaAlO_3$. Die Röntgenpeaks dieser Nebenphase sind in Abb. 82 mit einem Viereck gekennzeichnet (Hauptpeak bei 33,48 °2θ ($hkl = 104$)). Bei 1200 °C sind nur noch $LaAlO_3$, CaO und La_2O_3 vorhanden; das tetragonale $CaLaAlO_4$ ist nicht mehr nachweisbar (vgl. Abb. 82). $LaAlO_3$ ist dabei wahrscheinlich ein Zersetzungsprodukt von $CaLaAlO_4$. Um die Synthese zu optimieren wurden die Synthesergebnisse bei einer Sintertemperatur zwischen 950 und 1050 °C in Schritten von 10 °C genauer betrachtet. Es entstanden stets relativ große Mengen an $LaAlO_3$, auch ein Abschrecken änderte das Ergebnis nicht.

Tab. 30: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe $CaO \cdot 0,5REE_2O_3 \cdot 0,5Al_2O_3$

Einwaagestöchiometrie	Synthesebedingungen	Ergebnisse
$CaO \cdot 0,5La_2O_3 \cdot 0,5Al_2O_3$	1000 °C – 1400 °C	$CaLaAlO_4 + LaAlO_3 + CaO$
$CaO \cdot 0,5Nd_2O_3 \cdot 0,5Al_2O_3$	1300 °C; 4 h	$CaNdAlO_4$
$CaO \cdot 0,5Sm_2O_3 \cdot 0,5Al_2O_3$	1300 °C; 4 h	$CaSmAlO_4$
$CaO \cdot 0,5Eu_2O_3 \cdot 0,5Al_2O_3$	1100 °C; 4 h	$CaEuAlO_4$
$CaO \cdot 0,5Gd_2O_3 \cdot 0,5Al_2O_3$	1300 °C; 4 h	$CaGdAlO_4$
$CaO \cdot 0,5Dy_2O_3 \cdot 0,5Al_2O_3$	1450 °C; 6 h	$CaDyAlO_4$
$CaO \cdot 0,5Y_2O_3 \cdot 0,5Al_2O_3$	1300 °C; 4 h	$CaYAlO_4$
$CaO \cdot 0,5Yb_2O_3 \cdot 0,5Al_2O_3$	1450 °C; 6 h	$CaYbAlO_4$

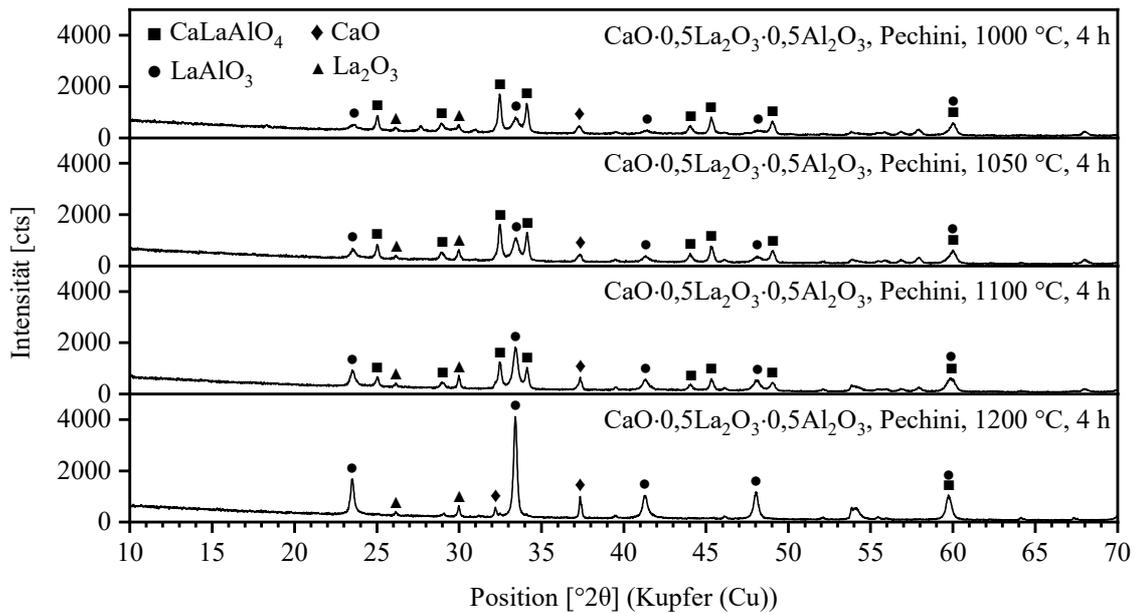


Abb. 82: Röntgendiffraktogramm von $\text{CaO} \cdot 0,5\text{La}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1000 - 1200 °C

Die Röntgendiffraktogramme der reinphasig synthetisierten Calcium-Seltenerd-Aluminate CaNdAlO_4 , CaSmAlO_4 , CaEuAlO_4 , CaGdAlO_4 , CaDyAlO_4 , CaYAlO_4 , CaYbAlO_4 sind in Abb. 83 gezeigt. Zudem ist oberhalb die Referenzkarte ICDD: 01-081-0743 für CaNdAlO_4 [178] dargestellt. Die Röntgendiffraktogramme ähneln sich aufgrund der gleichen Kristallstruktur $I4/mmm$ sehr stark. Bedingt durch die variierenden Ionenradien der eingebauten Seltenerdmetalle kommt es zu einer leichten Verschiebung der Peakpositionen, bspw. von $32,85^\circ 2\theta$ (CaNdAlO_4 , $hkl = 103$) zu $33,56^\circ 2\theta$ (CaYbAlO_4 , $hkl = 103$).

Tab. 31: Verfeinerte Gitterparameter für CaREEAlO_4 (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb) bei Raumtemperatur. Raumgruppe: $I4/mmm$ ($\alpha = \beta = \gamma = 90,00^\circ$; $a = b$)

Verbindungen	a [Å]	c [Å]	V [Å ³]
CaLaAlO_4	3,715(1)	12,338(3)	170,29(0)
CaNdAlO_4	3,679(9)	12,149(2)	164,52(0)
CaSmAlO_4	3,670(6)	12,061(5)	162,50(7)
CaEuAlO_4	3,663(7)	12,025(1)	161,40(4)
CaGdAlO_4	3,657(1)	11,997(4)	160,45(3)
CaDyAlO_4	3,647(8)	11,909(5)	158,47(2)
CaYAlO_4	3,643(2)	11,895(5)	157,89(2)
CaYbAlO_4	3,643(0)	11,755(2)	156,00(4)

Ausgehend von der Struktur für CaSmAlO_4 (ICSD: 2570 [188]) wurden die Gitterparameter der Calcium-Seltenerd-Aluminate mittels Rietveld-Methode verfeinert. Die verfeinerten

Gitterparameter der Verbindungen variieren systematisch mit den Ionenradien der Seltenen Erden. So nimmt beispielsweise das Zellvolumen von $170,29 \text{ \AA}^3$ (CaLaAlO_4) auf $156,05 \text{ \AA}^3$ (CaYbAlO_4) ab. Die Gitterparameter a , c und V sind Tab. 31 aufgelistet. Die vollständigen Reflexlisten können dem Anhang entnommen werden.

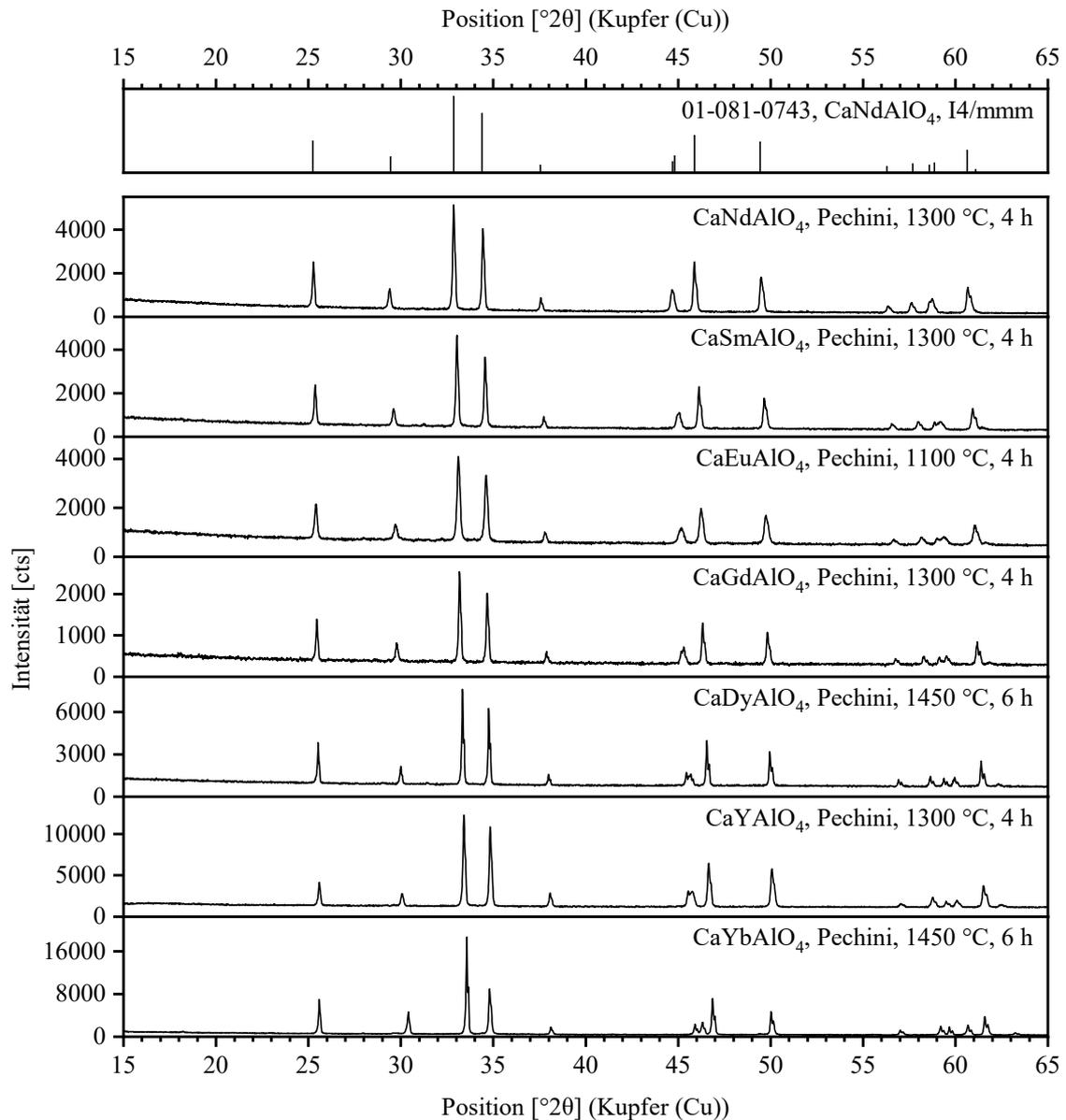


Abb. 83: Röntgendiffraktogramme der Verbindungen CaREEAlO_4 (REE = Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb)

REM-Aufnahmen von CaYAlO_4 und CaDyAlO_4 sind in Abb. 84 als repräsentative Beispiele für die Verbindungsreihe CaREEAlO_4 dargestellt. Die Proben sind recht homogen, da die Ausgangsstoffe als Lösung gut vermischt wurden. Die Partikel haben keine klare Form und die Korngrößen liegen im Bereich von bis zu $5 \mu\text{m}$, was zu einer intensiven Agglomeratbildung

führt. Das undefinierte Aussehen ist in der angewendeten Sol-Gel-Methode, der hohen Sintertemperatur und der anschließenden Zerkleinerung der Proben begründet.

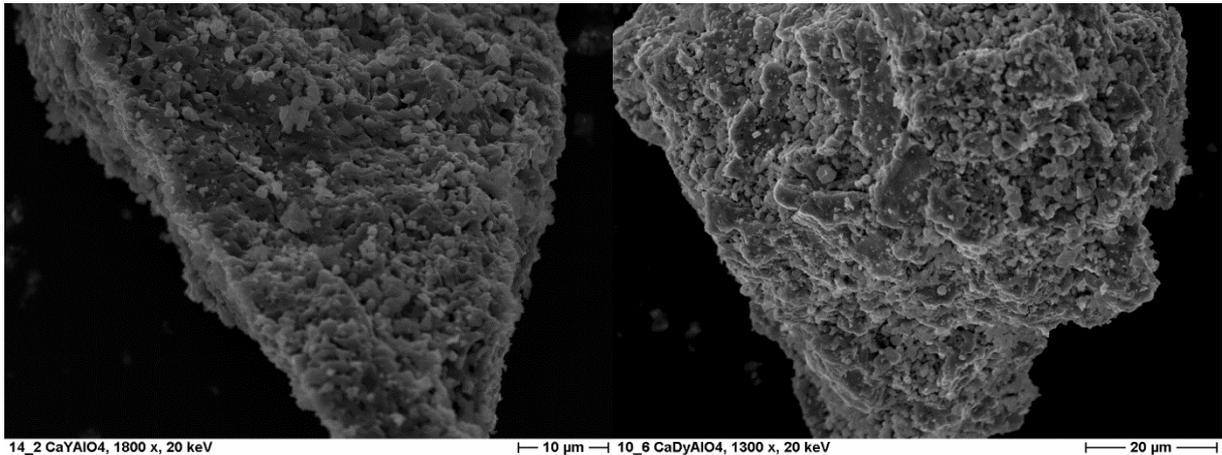


Abb. 84: REM-Aufnahmen von a) CaYAlO_4 und b) CaDyAlO_4

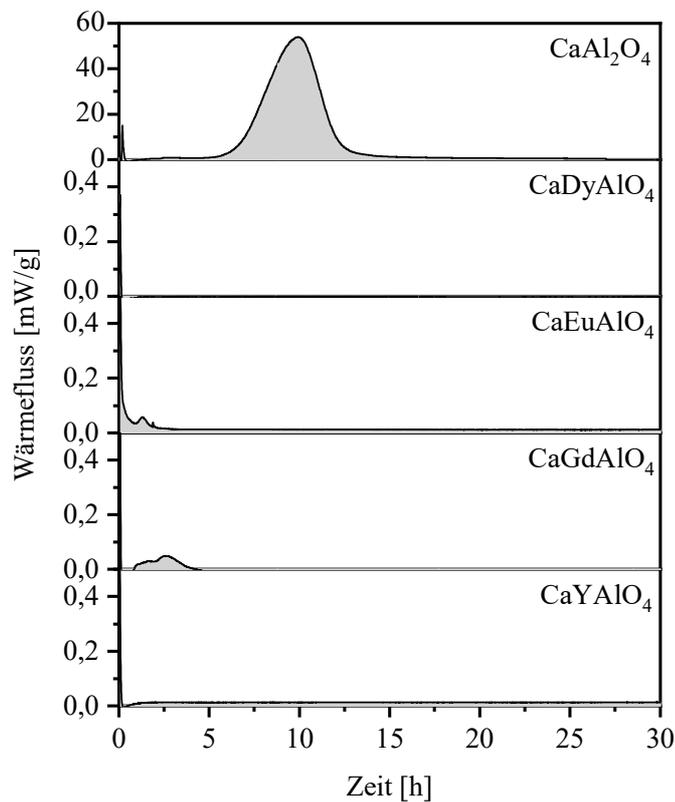


Abb. 85: Wärmeflussdiagramme von CaAl_2O_4 , CaDyAlO_4 , CaEuAlO_4 , CaGdAlO_4 und CaYAlO_4

Ergebnisse der kalorimetrischen Untersuchung von CaAl_2O_4 und CaREEAlO_4 (REE = Dy, Eu, Gd und Y) sind in Abb. 6 dargestellt. Das untersuchte Wasser/Feststoff-Verhältnis war 1. Der Hydratationsprozess von Calciummonoaluminat wurde in der Vergangenheit umfassend untersucht, da CaAl_2O_4 die wichtigste hydraulische Komponente von Tonerdezement mit

hohem Tonerdegehalt darstellt. Die Wärmepeaks werden der Bildung der metastabilen Hydrate $\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ (CAH_{10}), $2\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ (C_2AH_8) und $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (C_3AH_6) zugeordnet, die während der ersten Stufe der Festigkeitsentwicklung in Tonerdezementen entstehen. Im Gegensatz dazu zeigten die synthetisierten CaREEAlO_4 kein hydraulisches Verhalten. Die kleinen Peaks können der Benetzungswärme, die beim Einspritzen des Wassers frei wird, zugeordnet werden. PXRD-Muster von Proben, die nach der Vermischung mit Wasser gemessen wurden, zeigten ebenfalls keine neuen Peaks. Die Zugabe von Wasser zum Pulver CaREEAlO_4 führte lediglich zur Bildung einer Suspension.

SrREEAlO_4 (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y, Yb, Sc)

Bei der Synthese von Strontium-Seltenerd-Aluminaten SrREEAlO_4 waren im Gegensatz zu den im vorherigen Abschnitt behandelten CaREEAlO_4 nicht alle angestrebten Phasen stabil. Die Synthese war lediglich für Seltene Erden mit größerem Ionenradius (La, Nd, Sm, Eu und Gd) erfolgreich. Tab. 32 enthält die angewendeten Synthesebedingungen für die jeweiligen Phasen. Die Sintertemperatur variierte zwischen 1300 und 1450 °C.

Tab. 32: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe $\text{SrO} \cdot 0,5\text{REE}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$

Einwaage-stöchiometrie	Synthesebedingungen	Ergebnisse
$\text{SrO} \cdot 0,5\text{La}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$	1400 °C; 10 h	SrLaAlO_4
$\text{SrO} \cdot 0,5\text{Nd}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$	1300 °C; 6 h	SrNdAlO_4
$\text{SrO} \cdot 0,5\text{Sm}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$	1300 °C; 6 h	SrSmAlO_4
$\text{SrO} \cdot 0,5\text{Eu}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$	1300 °C; 6 h	SrEuAlO_4
$\text{SrO} \cdot 0,5\text{Gd}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$	1350 °C; 7 h	SrGdAlO_4
$\text{SrO} \cdot 0,5\text{Dy}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$	1450 °C; 16 h, als Tablette	SrDyAlO_4 ; Mischoxide
$\text{SrO} \cdot 0,5\text{Y}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$	1300 °C; 8 h	SrYAl_3O_7 ; SrAl_2O_4 ; Y_2O_3
$\text{SrO} \cdot 0,5\text{Yb}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$	900 - 1500 °C; 20 h	$\text{SrYbAl}_3\text{O}_7$; SrAl_2O_4 ; Yb_2O_3

Die Röntgendiffraktogramme der Verbindungen SrREEAlO_4 (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd und Dy) sind in Abb. 86, von oben nach unten mit zunehmendem Ionenradius der Seltenen Erden, dargestellt. Erwartungsgemäß sind die Diffraktogramme einander aufgrund der gleichen Kristallstruktur und ähnlicher Ionenradien der Seltenerden sehr ähnlich. Für SrDyAlO_4 existieren in der Literatur zwar keine Strukturdaten. Aufgrund der Ähnlichkeit zu den synthetisierten Phasen der Sr-Reihe kann jedoch darauf geschlossen werden, dass die Phase SrDyAlO_4 hergestellt wurde. Die Hauptpeaks der tetragonalen $I4/mmm$ -Struktur bei $25,21^\circ 2\theta$ ($hkl = 101$), $32,65^\circ 2\theta$ ($hkl = 103$), $34,39^\circ 2\theta$ ($hkl = 110$) und $45,59^\circ 2\theta$ ($hkl = 114$) sind eindeutig vorhanden. Auch die leichte Verschiebung dieser Peaks zu größeren Winkeln 2θ im

Vergleich zu Peaks von SrGdAlO_4 ist in Übereinstimmung mit dem kleineren Ionenradius von Dysprosium im Vergleich zu Gadolinium ($25,15^\circ 2\theta$ ($hkl = 101$), $32,54^\circ 2\theta$ ($hkl = 103$), $34,31^\circ 2\theta$ ($hkl = 110$) und $45,43^\circ 2\theta$ ($hkl = 114$)). Die Zuordnung zu weiteren möglichen Phasen war mit den verwendeten Datenbanken ICDD und ICSD nicht möglich. Weitere, vergleichsweise kleinere Peaks im Bereich zwischen 30 und $40^\circ 2\theta$ können anderen Mischoxiden wie $\text{SrDy}_2\text{Al}_2\text{O}_7$ (ICDD 01-076-0095 [168]), $\text{Sr}_3\text{DyAl}_2\text{O}_{7,5}$ (ICDD 00-047-0777 [189]) sowie Dy_2O_3 (ICDD 01-079-1722 [190]) zugeordnet werden. Die mittels Pawley-Fit verfeinerten Gitterparameter sind in Tab. 33 angegeben.

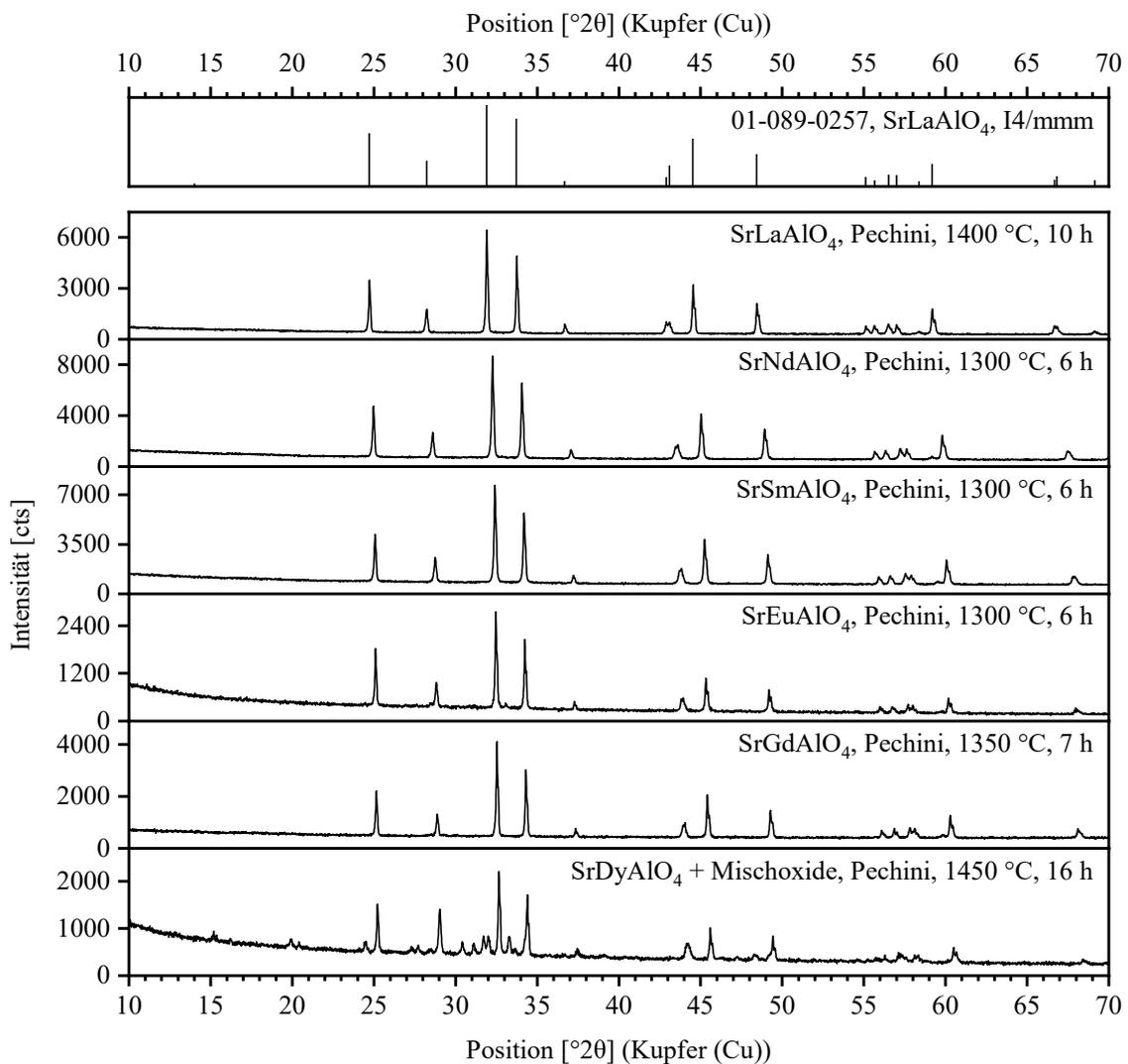


Abb. 86: Röntgendiffraktogramme der Verbindungen SrREEAlO_4 (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, und Dy)

Als Beispiel für eine nicht erfolgreiche Synthese ist das Röntgendiffraktogramm für den Pechini-Einsatz der stöchiometrischen Einwaage von $\text{SrO}\cdot 0,5\text{Yb}_2\text{O}_3\cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$ in Abb. 87 gezeigt. Die Sintertemperatur wurde zwischen 1000 und 1500°C variiert. Auch eine Variation

der an die Sinterung anschließenden Abkühlrate änderte das Ergebnis nicht. Als Sinterprodukt konnten lediglich Yb_2O_3 (ICDD 01-084-1879 [157]), SrAl_2O_4 (ICDD 01-074-0794 [58]) und $\text{Sr}_3\text{Al}_2\text{YbO}_{7,5}$ (ICDD 00-043-0121 [191]) nachgewiesen werden. Mit höherer Sintertemperatur werden diese Phasen lediglich kristalliner, was anhand der zunehmenden Peakintensitäten erkennbar ist.

Tab. 33: verfeinerte Gitterparameter für SrREEAlO_4 (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb) bei Raumtemperatur. Raumgruppe: $I4/mmm$ ($\alpha = \beta = \gamma = 90,00^\circ$; $a = b$)

Verbindungen	a [Å]	c [Å]	V [Å ³]
SrLaAlO_4	3,755(1)	12,642(9)	178,28(3)
SrNdAlO_4	3,722(1)	12,490(9)	173,05(8)
SrSmAlO_4	3,707(3)	12,421(7)	170,72(9)
SrEuAlO_4	3,701(5)	12,399(6)	169,89(1)
SrGdAlO_4	3,696(0)	12,366(9)	168,94(5)
SrDyAlO_4	3,685(5)	12,301(4)	167,09(6)

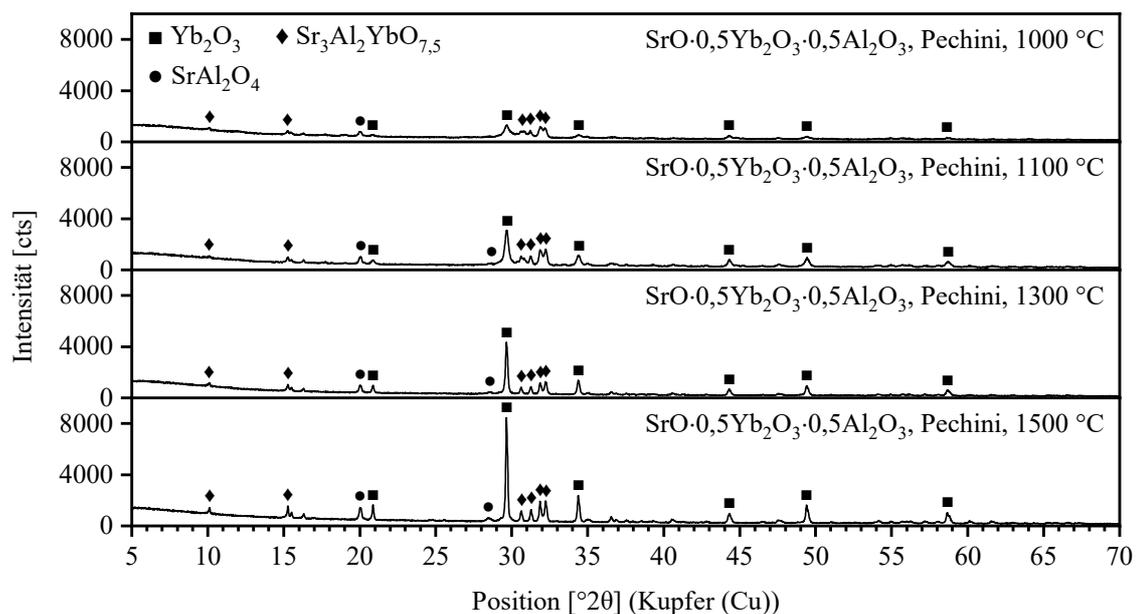


Abb. 87: Röntgendiffraktogramme von $\text{SrO} \cdot 0,5\text{Yb}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1000 - 1500 °C

BaREEAlO₄ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Dy, Y, Yb, Sc)

Tab. 34 fasst die Ergebnisse der Synthese der Barium-Seltenerdoxide zusammen. Es sind sowohl die angewendeten Synthesebedingungen als auch die erzielten Endprodukte angegeben.

Tab. 34: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe BaO·0,5REE₂O₃·0,5Al₂O₃

Einwaagestöchiometrie	unterschiedliche Synthesebedingungen	Ergebnisse
BaO·0,5La ₂ O ₃ ·0,5Al ₂ O ₃	1300 °C; 6 h	BaLaAlO ₄
BaO·0,5Nd ₂ O ₃ ·0,5Al ₂ O ₃	1300 - 1400 °C; 12 h	Ba ₃ Al ₂ NdO _{7,5} ; BaNd ₂ O ₄ , Nd ₂ O ₃ ; NdAlO ₃
BaO·0,5Sm ₂ O ₃ ·0,5Al ₂ O ₃	1200 - 1300 °C; 12 h	BaAl ₂ O ₄ Sm ₂ O ₃
BaO·0,5Eu ₂ O ₃ ·0,5Al ₂ O ₃	900 - 1500 °C; 20 h	BaAl ₂ O ₄ ; Ba ₃ Al ₂ O ₆ ; Eu ₂ O ₃ (unter 1300 °C kub. und drüber monokl.)
BaO·0,5Dy ₂ O ₃ ·0,5Al ₂ O ₃	1450 °C; 15 h	BaAl ₂ O ₄ ; Ba ₃ DyAl ₂ O _{7,5} ; Dy ₂ O ₃
BaO·0,5Y ₂ O ₃ ·0,5Al ₂ O ₃	1300 °C; als Tablette	BaAl ₂ O ₄ ; Ba ₃ YAl ₂ O _{7,5} ; Y ₂ O ₃ ;
BaO·0,5Yb ₂ O ₃ ·0,5Al ₂ O ₃	1200 °C - 1450 °C	BaAl ₂ O ₄ ; Yb ₂ O ₃ ; Ba ₂ YbAlO ₅

Bei der Syntheseriehe BaREEAlO₄ war einzig die Phase BaLaAlO₄ unter den gewählten Synthesebedingungen stabil. Im Gegensatz zu den tetragonalen CaREEAlO₄ und SrREEAlO₄, die in den vorherigen Abschnitten beschrieben sind, kristallisiert BaLaAlO₄ in einer orthorhombischen Struktur mit der Raumgruppe P2₁2₁2₁ [192, 193]. Die mittels Rietveld verfeinerten Gitterparameter betragen a = 5,828(8) Å, b = 7,288(1) Å und c = 9,881(9) Å. Die Nebenphase LaAlO₃ verschwindet vollständig ab einer Sintertemperatur von 1200 °C (vgl. Abb. 88). Im BaLaAlO₄-Wirtsgitter besetzen Al³⁺-Ionen die tetraedrischen Stellen (AlO₄) und La³⁺-Ionen die dodekaedrischen Stellen (LaO₈). Ba²⁺-Ionen sind durch die Verbindung mit benachbarten Polyedern mit zehn O²⁻-Ionen koordiniert. Die Oberflächenmorphologie und Korngröße der synthetisierten Phasen wurden mittels REM (siehe Abb. 89) untersucht: das Wirtsgitter tritt in unregelmäßigen Formen mit Agglomeraten einer durchschnittlichen Korngröße von 0,5 bis 2 µm auf.

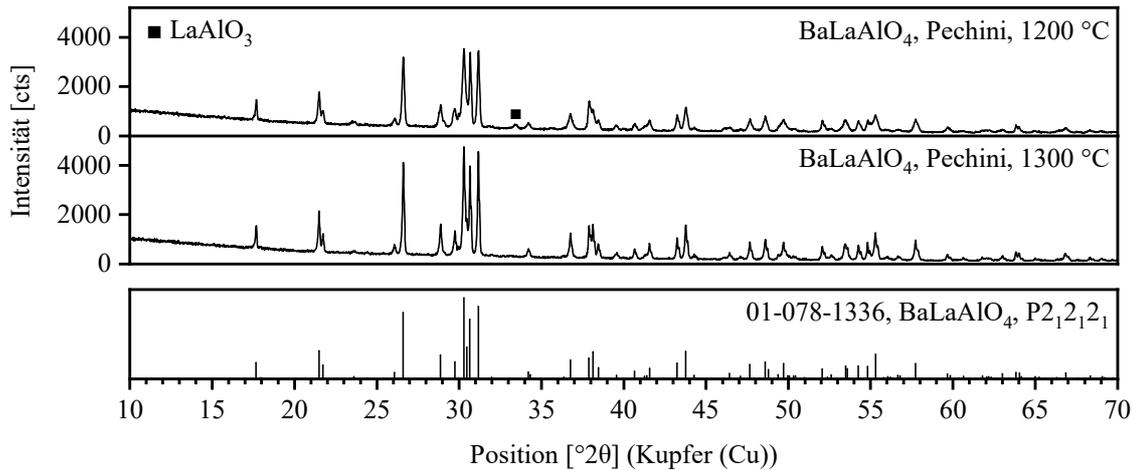


Abb. 88: Röntgendiffraktogramme von BaLaAlO₄, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1200 - 1300 °C

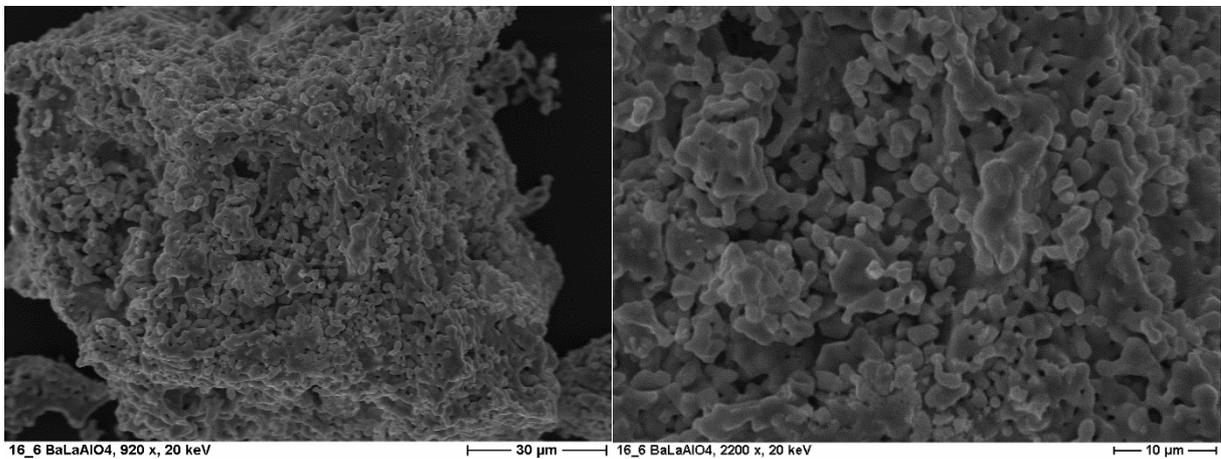


Abb. 89: REM-Aufnahmen von BaLaAlO₄

Abgesehen von Lanthan konnte mit keiner weiteren Seltenen Erde eine Verbindung mit der allgemeinen Formel BaREEAlO₄ synthetisiert werden. Es wurde ebenfalls versucht, durch Variation der Sintertemperatur und der Sinter- und Abkühlzeit zu einem Syntheserfolg zu kommen. Beispielhaft ist in Abb. 90 das Röntgendiffraktogramm von BaO·0,5Dy₂O₃·0,5Al₂O₃ nach Sinterung bei 1300 °C und 1450 °C dargestellt. Die Phasen BaAl₂O₄ (ICDD: 01-073-0202 [194]), Dy₂O₃ (ICDD: 01-088-2164 [195]) und Ba₃DyAl₂O_{7,5} (ICDD: 00-037-0291 [196]) entstehen bei 1300 °C und werden mit zunehmender Temperatur bis 1450 °C lediglich kristalliner, was die steigende Intensität der jeweiligen Peaks verdeutlicht.

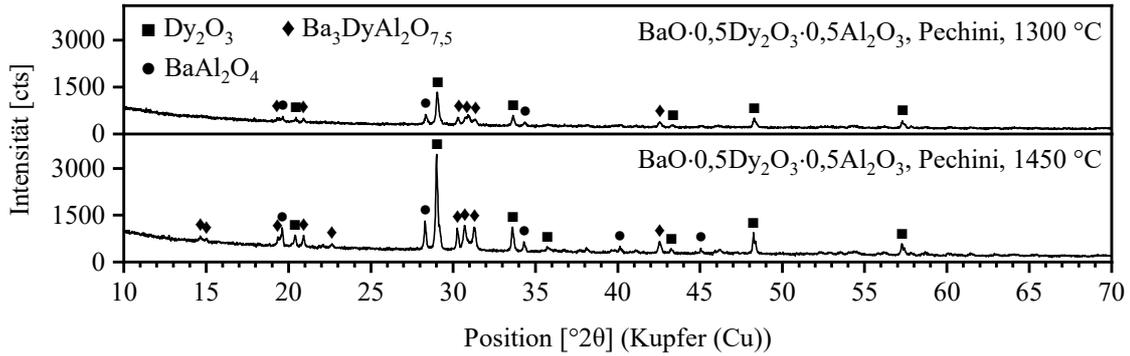


Abb. 90: Röntgendiffraktogramme von $\text{BaO} \cdot 0,5\text{Dy}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1300 und 1450 °C

5.5.3. Sm^{3+} -Lumineszenz in CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4

Die Synthese der Leuchtstoffe $\text{CaEu}_{1-x}\text{Sm}_x\text{AlO}_4$ und $\text{SrEu}_{1-x}\text{Sm}_x\text{AlO}_4$ ($x = 0,00 - 0,02$) erfolgte mittels Pechini-Methode bei 1300 °C für 6 Stunden. Die Röntgendiffraktogramme von mit bis zu 2,00 mol-% Sm^{3+} dotiertem CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4 sind in Abb. 91 dargestellt. Ganz oben ist die undotierte Phase dargestellt, mit zunehmender Zeilenzahl steigt die Sm^{3+} -Konzentration. Es sind keine zusätzlichen Phasen entstanden: Sm^{3+} wurde vollständig in die tetragonale Struktur der Calcium- bzw. Strontiumeuropiumaluminat eingebaut.

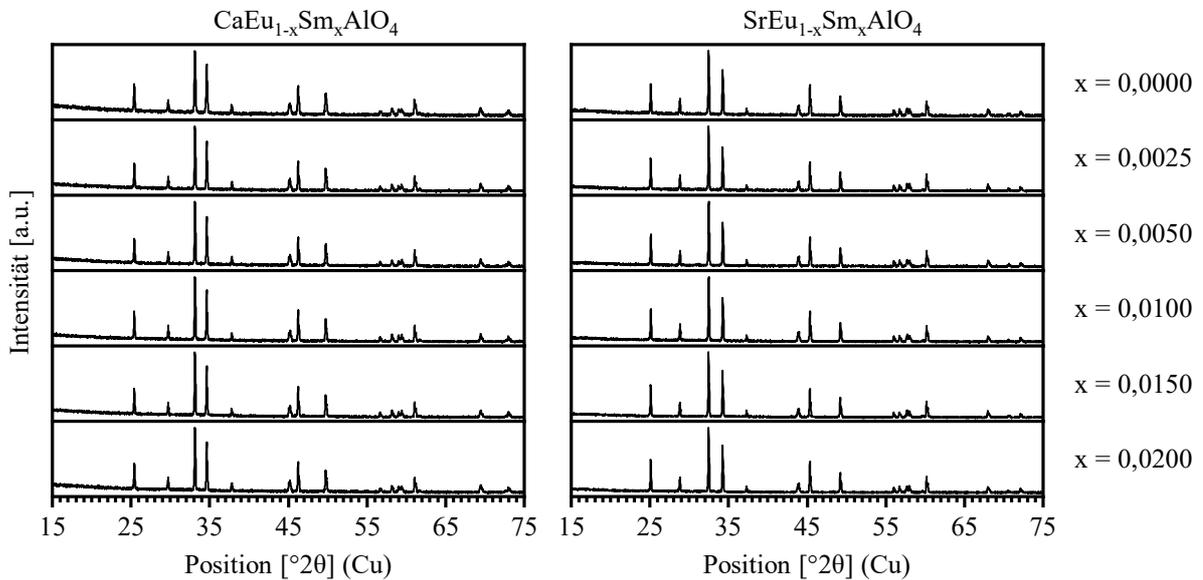


Abb. 91: Röntgendiffraktogramme von mit Sm^{3+} dotiertem CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4

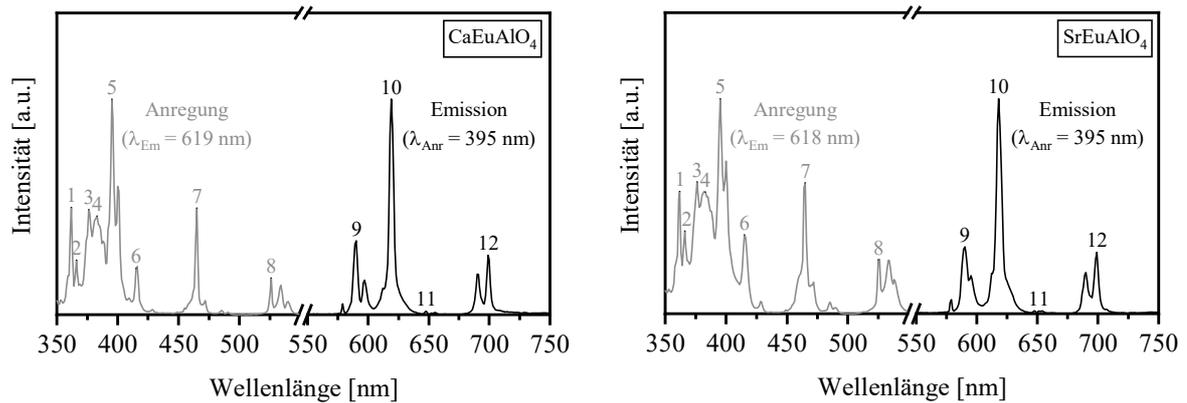


Abb. 92: Anregungs- und Emissionsspektrum von CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4 , Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 35

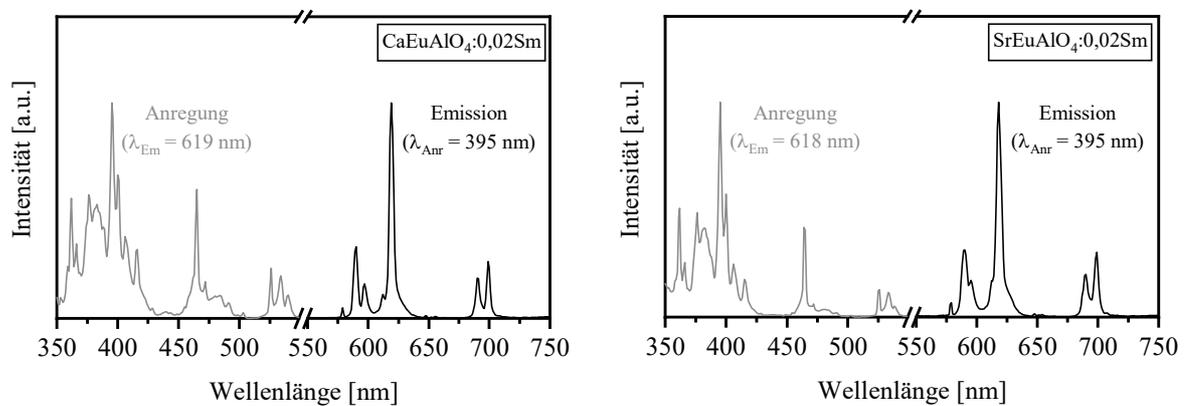


Abb. 93: Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{CaEuAlO}_4:0,02\text{Sm}$ und $\text{SrEuAlO}_4:0,02\text{Sm}$, Raumtemperatur

Die Anregungs- und Emissionsspektren von CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4 sind in Abb. 92 dargestellt. Das Anregungsspektrum wurde bei einer Emissionswellenlänge von 619 nm im Bereich von 350 bis 550 nm aufgenommen. Die Anregungsspektren bestehen aus $4f \rightarrow 4f$ -Übergängen des Eu^{3+} -Ions, wobei der Peak bei 395 nm (${}^7F_0 \rightarrow {}^5L_6$) der stärkste ist. Die Peaklagen stimmen mit Daten aus der Literatur für tetragonale Strukturen überein [197–199]. Das Emissionsspektrum, welches bei einer Anregungswellenlänge von 395 nm aufgenommen wurde, besteht aus Peaks bei 590, 619, 648 und 699 nm, die den Übergangszuständen ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_J$ ($J = 1 - 4$) des Eu^{3+} -Ions entsprechen. Alle beobachteten Übergänge und die entsprechende Zuordnung sind in Tab. 35 aufgeführt.

Tab. 35: Beobachtete Eu^{3+} -Übergänge in CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4 (Nummerierung siehe Abb. 92)

Peak Nr.	Übergang	beobachtete Wellenlänge [nm] im Wirtsgitter	
		CaEuAlO_4	SrEuAlO_4
1	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{D}_4$	362	362
2	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{L}_8$	366	366
3	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{G}_3$	376	376
4	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{L}_7$	383	382
5	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{L}_6$	395	395
6	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{D}_3$	415	415
7	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{D}_2$	465	465
8	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{D}_1$	526	525
9	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_1$	590	590
10	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_2$	619	618
11	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_3$	648	651
12	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_4$	699	699

In Abb. 93 sind die Anregungs- ($\lambda_{\text{Em}} = 619 \text{ nm}$) und Emissionsspektren ($\lambda_{\text{Anr}} = 395 \text{ nm}$) von mit 2 mol-% Sm^{3+} dotiertem CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4 dargestellt. Vergleicht man diese mit den Spektren der reinen Wirtsgitter, dann sind überwiegend die für Eu^{3+} charakteristischen Übergänge sowie ein intensiver Peak bei 406 nm und ein schwacher Peak bei 484 nm zu erkennen. Diese Peaks sind in der Abbildung jeweils mit einem Stern markiert und entsprechen dem intensivsten Übergang ${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{K}_{11/2}$ und ${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{11/2} + {}^4\text{M}_{15/2}$ von Sm^{3+} [35, 14, 200, 201]. Die Lumineszenzeigenschaften der Leuchtstoffe $\text{CaEuAlO}_4:\text{Sm}$ und $\text{SrEuAlO}_4:\text{Sm}$ wurde in Abhängigkeit der Sm^{3+} -Konzentration untersucht. Die Emissionsspektren sind in Abb. 94 dargestellt. Sie wurden bei einer Wellenlänge von 406 nm aufgenommen, um sowohl Europium als auch Samarium anzuregen. Die Emissionsspektren bestehen ausschließlich aus Peaks, die den Übergängen von Eu^{3+} entsprechen (vgl. Abb. 92): der Bereich um 600 und 650 nm weist keine Peaks auf, was typisch für die Emission von Sm^{3+} ist. Die Eu^{3+} -Peaks bei 590, 619 und 690 nm nehmen mit steigender Sm^{3+} -Konzentration zu. Bei der Dotierung mit 2 mol-% Sm^{3+} steigt die rote Emission in etwa um das Vierfache bei CaEuAlO_4 und das Zweifache bei SrEuAlO_4 . Wie bereits in Abschnitt 5.3.3 erläutert liegt dies an der Energieübertragung von Sm^{3+} auf Eu^{3+} [160]. Bei einer Anregung mit 406 nm werden Sm^{3+} -Ionen aus dem Grundzustand ${}^6\text{H}_{5/2}$ zum ${}^4\text{K}_{11/2}$ -Niveau angehoben. Vom ${}^4\text{G}_{5/2}$ -Zustand werden die Elektronen durch Resonanz auf das ${}^5\text{D}_0$ -Niveau des Eu^{3+} übertragen. Der Energietransfer erhöht die Population des ${}^5\text{D}_0$ -Niveaus der Eu^{3+} -Ionen und führt zur Erweiterung ihres Anregungsbereichs. Das Schema des Energieübertragungsprozesses ist in Abb. 95 dargestellt.

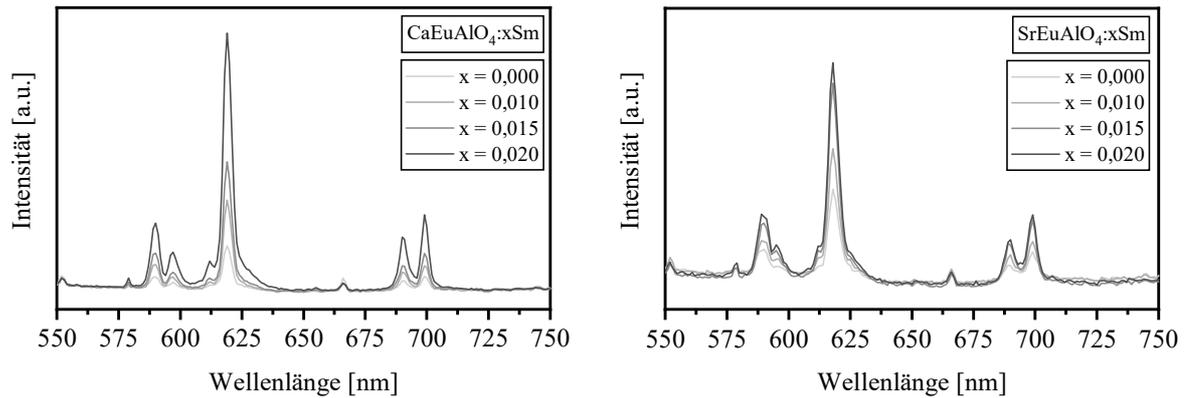


Abb. 94: Emissionsspektrum von $\text{CaEuAlO}_4:\text{xSm}$ und $\text{SrEuAlO}_4:\text{xSm}$ ($\lambda_{\text{Anr}} = 406 \text{ nm}$)

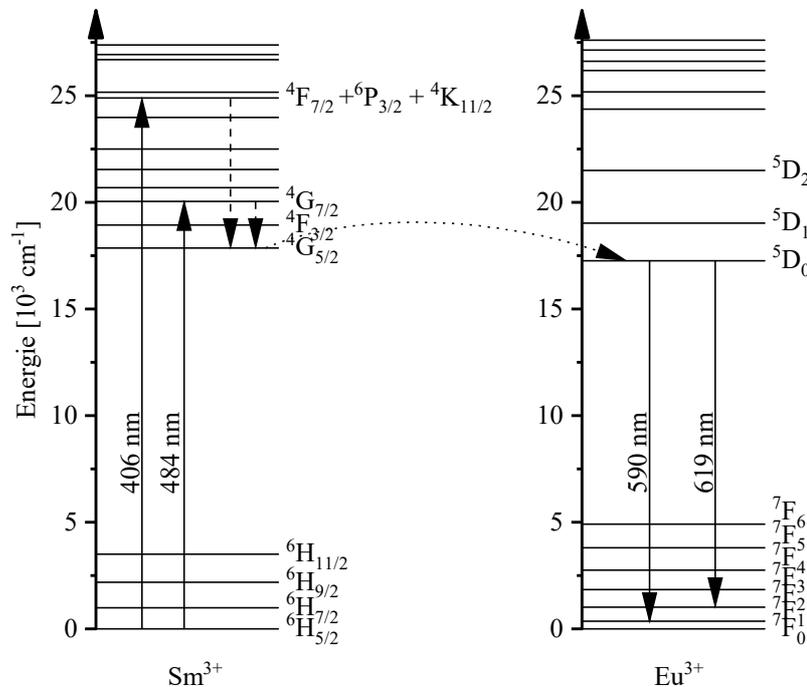


Abb. 95: Darstellung des Energieübertragungsprozesses bei $\text{CaEuAlO}_4:\text{xSm}$

5.5.4. Dy^{3+} -Lumineszenz in CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4

Die Dotierung der Wirtsgitter CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4 mit Dy^{3+} erfolgte, analog zum vorherigen Abschnitt, mittels Pechini-Synthese bei $1300 \text{ }^\circ\text{C}$ für 6 Stunden. Die Röntgendiffraktogramme der mit bis zu 2,00 mol-% Dy^{3+} dotierten Erdalkali-Europium-Aluminate sind in Abb. 96 gezeigt. Dabei ist die Darstellungsart gleich der im vorherigen Abschnitt. Erwartungsgemäß wurde auch hier keine Nebenphase detektiert.

Die Anregungs- und Emissionsspektren von mit 2 mol-% Dy^{3+} dotiertem CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4 sind in Abb. 97 dargestellt. Sie ähneln sehr stark denen der undotierten Wirtsgitter.

Da sich keine optimale Anregungswellenlänge für das eingebaute Dy^{3+} feststellen ließ und die Emissionsintensitäten von Eu^{3+} im Wirtsgitter sehr stark sind, wurden keine konzentrationsabhängigen Lumineszenzmessungen vorgenommen.

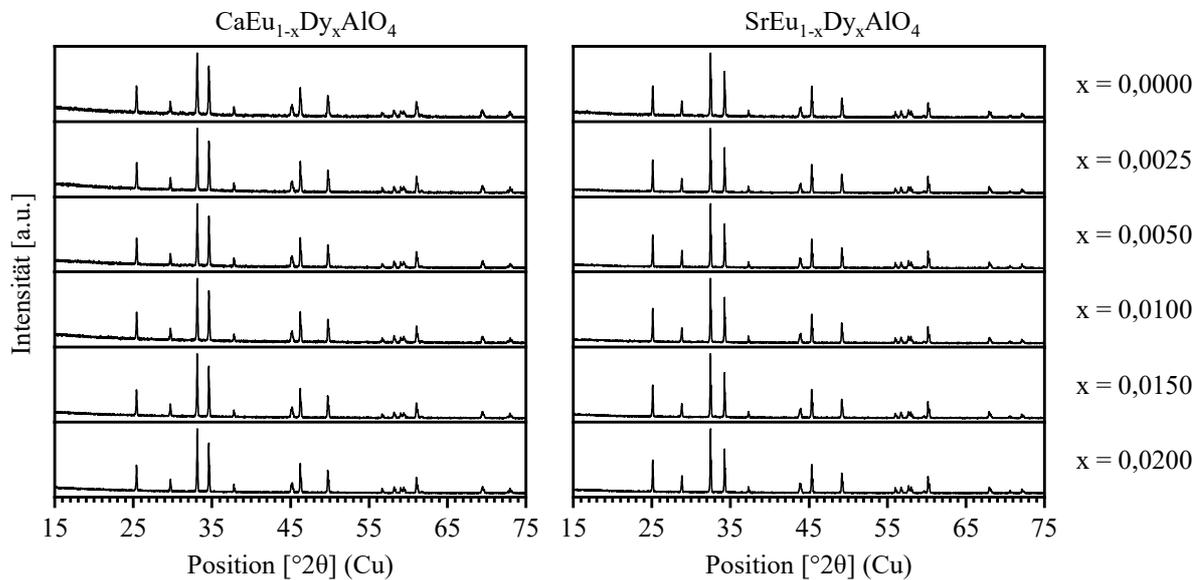


Abb. 96: Röntgendiffraktogramme von mit Dy^{3+} dotierten CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4

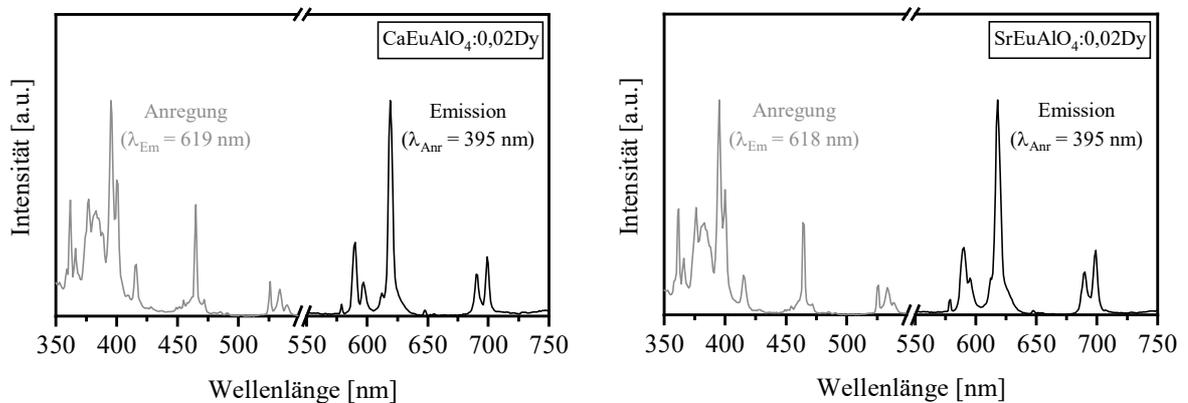


Abb. 97: Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{CaEuAlO}_4:0,02\text{Dy}$ und $\text{SrEuAlO}_4:0,02\text{Dy}$, Raumtemperatur

5.5.5. Zusammenfassung und Diskussion

In diesem Abschnitt wird der wesentliche Vorteil der Pechini-Methode zur Synthese reinphasiger Verbindungen von Erdalkali-Seltenerd-Aluminaten bei einer niedrigen Sintertemperatur (1200 °C, 7 h) im Vergleich zu der für die Festkörpersynthese erforderlichen Temperatur ($\geq 1400 - 1600$ °C, über 48 h) eindrucksvoll deutlich. Nicht alle Phasen der Syntheserieihe waren jedoch stabil. Die stabilen Verbindungen sind in Tab. 36 zusammengefasst. Grau markierte Zellen markieren gelungene Synthesen. Lediglich bei den

Synthesen von CaLaAlO_4 und SrDyAlO_4 konnten noch kleine Mengen an Nebenphase nachgewiesen werden, welche auch durch die Optimierung der Synthesebedingungen nicht zu beseitigen waren. BaLaAlO_4 ist aufgrund der abweichenden Kristallstruktur im Vergleich zu den anderen stabilen tetragonalen Verbindungen der Erdalkali-Seltenerd-Aluminate (orthorhombische Struktur, Raumgruppe $P2_12_12_1$) mit einem Stern markiert.

Tab. 36: Darstellung der durchgeführten Synthesen von Erdalkali-Seltenerd-Aluminaten

	CaO	SrO	BaO
La₂O₃	(CaLaAlO ₄)	SrLaAlO ₄	BaLaAlO ₄ *
Nd₂O₃	CaNdAlO ₄	SrNdAlO ₄	BaNdAlO₄
Sm₂O₃	CaSmAlO ₄	SrSmAlO ₄	BaSmAlO₄
Eu₂O₃	CaEuAlO ₄	SrEuAlO ₄	BaEuAlO₄
Gd₂O₃	CaGdAlO ₄	SrGdAlO ₄	BaGdAlO₄
Dy₂O₃	CaDyAlO ₄	(SrDyAlO ₄)	BaDyAlO₄
Y₂O₃	CaYAlO ₄	SrYAlO₄	BaYAlO₄
Yb₂O₃	CaYbAlO ₄	SrYbAlO₄	BaYbAlO₄

grau hinterlegt: stabile Verbindungen

in Klammern: Nebenphase in kleinen Mengen vorhanden

durchgestrichen: theoretische Zusammensetzung der nicht stabilen Verbindung

Die tetragonalen Erdalkali-Seltenerd-Aluminate gehören zur großen Familie von Verbindungen mit der allgemeinen Formel ABCO_4 (A = zweiwertiges Erdalkaliumkation, B = dreiwertiges REE und C = dreiwertiges Übergangsmetallkation). Diese Materialien kristallisieren in einem perowskitartigen Kristallsystem mit der tetragonalen K_2NiF_4 -Struktur. Die Besonderheit dieser Struktur ist, dass die zweiwertigen Erdalkalien und dreiwertige Seltenen Erden die gleiche Atompositionen im Verhältnis 1:1 besetzen.

CaREEAlO_4 kristallisiert aufgrund der ähnlichen Ionengröße von Calcium (100 pm) zu den Seltenen Erden (75 – 103 pm) mit der gesamten Bandbreite der untersuchten Seltenen Erden, während SrREEAlO_4 lediglich mit Seltenen Erden mit größerem Ionenradius (bis zu Dy) existiert. Bei der einzigen stabilen Verbindung der Ba-Reihe, BaLaAlO_4 , handelt es sich um eine orthorhombische Struktur mit der Raumgruppe $P2_12_12_1$. Den größten Unterschied zwischen dem Ionenradius der Seltenen Erde und dem des Erdalkali-Metalls weist die stabile tetragonale Verbindung SrDyAlO_4 auf. Die dabei beobachtete maximale Abweichung der Ionenradien beträgt 22,7 %. Die verfeinerten Gitterparameter sind in Abb. 98 über die

Ionenradien der eingebauten Seltenen Erden aufgetragen. Es ist eine Zunahme der Zellparameter mit zunehmendem Ionenradius feststellbar.

Die Stabilität der K_2NiF_4 -Struktur in Verbindungen mit der Formel $ABCO_4$ wird üblicherweise im Hinblick auf den Goldschmidt-Toleranzfaktor t diskutiert, der definiert ist als

$$t = \frac{r(A - O)}{\sqrt{2}r(B - O)} \quad (6)$$

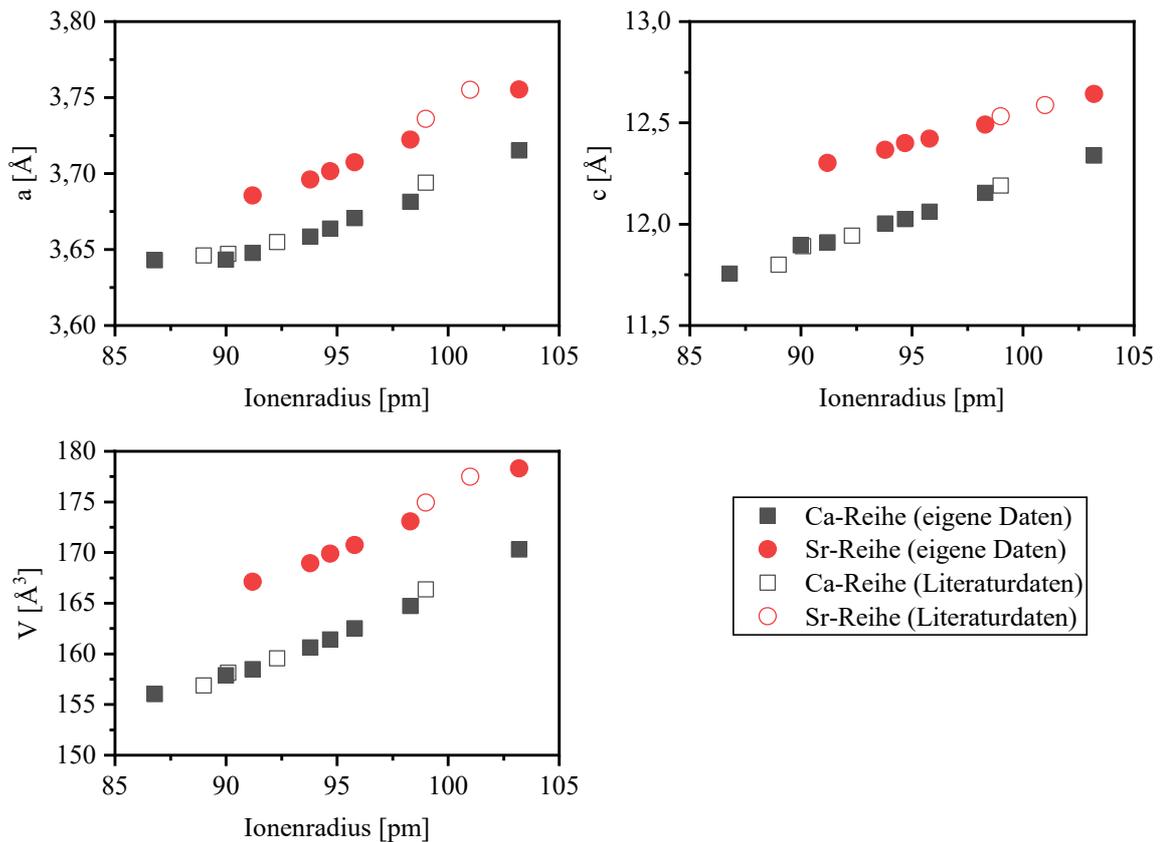


Abb. 98: Abhängigkeit der $MREEAlO_4$ -Gitterparameter vom REE^{3+} -Ionenradius

Die tetragonale K_2NiF_4 -Struktur wird innerhalb der Grenzen $1,02 > t > 0,85$ als stabil angenommen [202]. Für die stabilen Verbindungen in dieser Arbeit konnte ein Toleranzfaktor t im Bereich von 0,91 ($CaYbAlO_4$) und 0,97 ($SrLaAlO_4$) berechnet werden. Für die nicht stabilen Verbindungen der Ba-Reihe wurde ein größerer Wertebereich (0,97 – 1,00) kalkuliert. Es ist zu vermuten, dass $SrYAlO_4$ und $SrYbAlO_4$ metastabile Phasen sind, da für beide $t = 0,94$ beträgt. Singh et al. berichteten kürzlich von der Synthese von tetragonalem $SrYAlO_4$ mittels harnstoffunterstützter Lösungsverbrennungstechnik (urea-assisted solution combustion technique) [203]. Möglicherweise ist mit dieser Methode ebenfalls die Synthese von $SrYbAlO_4$ erfolgreich.

Die Synthese der Leuchtstoffe $\text{CaEuAlO}_4:x\text{Sm}$ und $\text{SrEuAlO}_4:x\text{Sm}$ ($x = 0,0025, 0,005, 0,01, 0,015; 0,02$) erfolgte mittels Pechini-Synthese bei $1300\text{ }^\circ\text{C}$ für 6 Stunden. Dabei entstand keine weitere Phase. Die Emissionsspektren des mit 2 mol-% Sm^{3+} dotierten CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4 zeigten überwiegend die für Eu^{3+} charakteristischen Übergänge (bspw. 395 nm für ${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{L}_6$). Man konnte weiterhin einen relativ intensiven Anregungsübergang von Sm^{3+} bei 406 nm (${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{K}_{11/2}$) beobachten. Die Sm^{3+} -konzentrationsabhängige Lumineszenzmessung wurde dementsprechend bei einer Anregungswellenlänge von 406 nm durchgeführt. Mit der Dotierung von 2 mol-% Sm^{3+} steigt die rote Emission in etwa um das Vierfache bei CaEuAlO_4 und das Zweifache bei SrEuAlO_4 .

Die Anregungs- und Emissionsspektren des nicht und mit 2 mol-% Dy^{3+} dotierten CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4 zeigten keine wesentlichen Auffälligkeiten: keine für Dy^{3+} typische Übergänge wurden beobachtet. Die starken elektronischen Übergänge von Eu^{3+} überlappen mit den elektronischen Übergängen von Dy^{3+} .

5.6. Erdalkali-Seltenerd-Borate

5.6.1. Einleitung

Bei Erdalkali-Seltenerd-Boraten handelt es sich um Doppelborate, das heißt sie bestehen aus zwei unterschiedlichen Metalloxiden und Boroxid. An dieser Stelle sind lediglich solche von Interesse, die aus den Komponenten Erdalkali-Oxid (MO), Seltenerd-Oxid (REE₂O₃) und Boroxid (B₂O₃) bestehen. Diese Verbindungen sind für den Einsatz in WLEDs von großer Bedeutung, da man sie sowohl mit zweiwertigen als auch mit dreiwertigen Seltenerdmetallen (z.B. Eu²⁺ und Sm³⁺) dotieren und dadurch zwei Leuchtstoffe unterschiedlicher Farbe mit demselben Wirtsgitter erhalten kann. Frühere Studien über Borate haben sich insbesondere mit den Materialien befasst, die durch verschiedene Formeln wie REE(BO₂)₃, MREE₂B₁₀O₁₉, M₃REE₂(BO₃)₄, M₃REE(BO₃)₄, M₄REEO(BO₃)₃, M₃REE(BO₃)₃ und M₃(BO₃)₂ beschrieben werden. Diese Materialien wurden zumeist in Bezug auf ihre optischen Eigenschaften untersucht [204–211]. Die Verbindungen mit isolierten planaren (BO₃)³⁻-Ionen werden Orthoborate genannt.

In der vorliegenden Arbeit werden ausschließlich Erdalkali-Seltenerd-Borate mit der allgemeinen Formel M₃REE₂(BO₃)₄ (M = Ca, Sr, Ba; REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb) behandelt. Als erster Stoff dieses Verbindungstyps wurde Sr₃Ho₂(BO₃)₄ im Jahr 1968 von Dzhurinskii et al. synthetisiert [212]. Die drauffolgenden Arbeiten, v.a. von Kindermann, Abdullaev und Palkina, tragen maßgebend zur strukturellen Untersuchung dieser Phasen bei [213–218]. Dabei wurden die Phasen sowohl einkristallin gezüchtet als auch mittels Festkörpermethode als Pulver synthetisiert. Die veröffentlichten Gitterparameter sind einander sehr ähnlich und variieren lediglich mit dem Radius der Seltenen Erden und Erdalkalien. Die meisten Verbindungen werden in der Literatur als kongruent schmelzend angegeben, d.h. ihre Schmelze hat dieselbe Zusammensetzung wie die feste Phase. Eine Zusammenfassung der ausgewählten Schmelz- oder Zersetzungstemperaturen ist in Tab. 37 angegeben.

Tab. 37: Ausgewählte Schmelztemperaturen der Verbindungsgruppe M₃REE₂(BO₃)₄

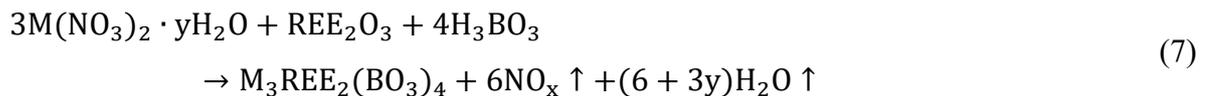
Verbindungen	Schmelztemperatur	Literatur
Ca ₃ La ₂ (BO ₃) ₄	1425 °C	[206]
Ca ₃ Y ₂ (BO ₃) ₄	1350 °C	[207]
Ca ₃ Yb ₂ (BO ₃) ₄	1275 °C	[214]
Sr ₃ Gd ₂ (BO ₃) ₄	1450 °C	[219]

Die Kristallstruktur der Phasen ist in älterer Literatur mit $P2_1cn$ (Nr. 33) beschrieben. Neuere Arbeiten, beispielsweise von Yan et al. und Mill et al., beschreiben sie mit einer höheren Symmetrie und der Raumgruppe $Pnma$ (Nr. 62) [220, 206]. Die Struktur ist demnach zentrosymmetrisch. Durch das Auftreten systematisch ausgelöschter Reflexe sind beide Raumgruppen für die Verbindungsgruppe möglich [221]. Zur Klärung dieser Fragestellung wurden in der Vergangenheit sowohl Pulverröntgen- als auch Einkristalldaten betrachtet, es existieren zu gleichen Verbindungen unterschiedliche Verfeinerungsergebnisse. Die Festlegung auf eine der zwei Raumgruppen ist an dieser Stelle anhand der Quellenlage deshalb nicht möglich. Die bereits in Abschnitt 5.4.3 untersuchte Verbindung $Sr_3Eu_2(BO_3)_4$ im System $SrO-Eu_2O_3-B_2O_3$ konnte mit sehr gutem Ergebnis mit der Raumgruppe $Pnma$ verfeinert werden.

In diesem Abschnitt wird die Synthese der Phasen der Verbindungsgruppe $M_3REE_2(BO_3)_4$ ($M = Ca, Sr, Ba$; $REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y$ und Yb) mittels Festkörpermethode dargestellt. Die Kristallstruktur wurde bestimmt und spektroskopische Eigenschaften untersucht.

5.6.2. Synthese und Charakterisierung von Erdalkali-Seltenerd-Boraten

Erdalkali-Seltenerd-Borate wurden mittels Festkörpermethode nach der allgemeinen chemischen Gleichung (7) reinphasig synthetisiert. Die Kristallstruktur wurde bereits in Abschnitt 5.4.3 beschrieben.



$\text{Ca}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb)

Die Synthese aller Verbindungen der Reihe $\text{Ca}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ war erfolgreich. Die unterschiedlichen Synthesebedingungen sind in Tab. 38 aufgelistet. Die mehrmaligen Mahlschritte zwischen den Sinterprozessen waren entscheidend für die erfolgreiche Synthese.

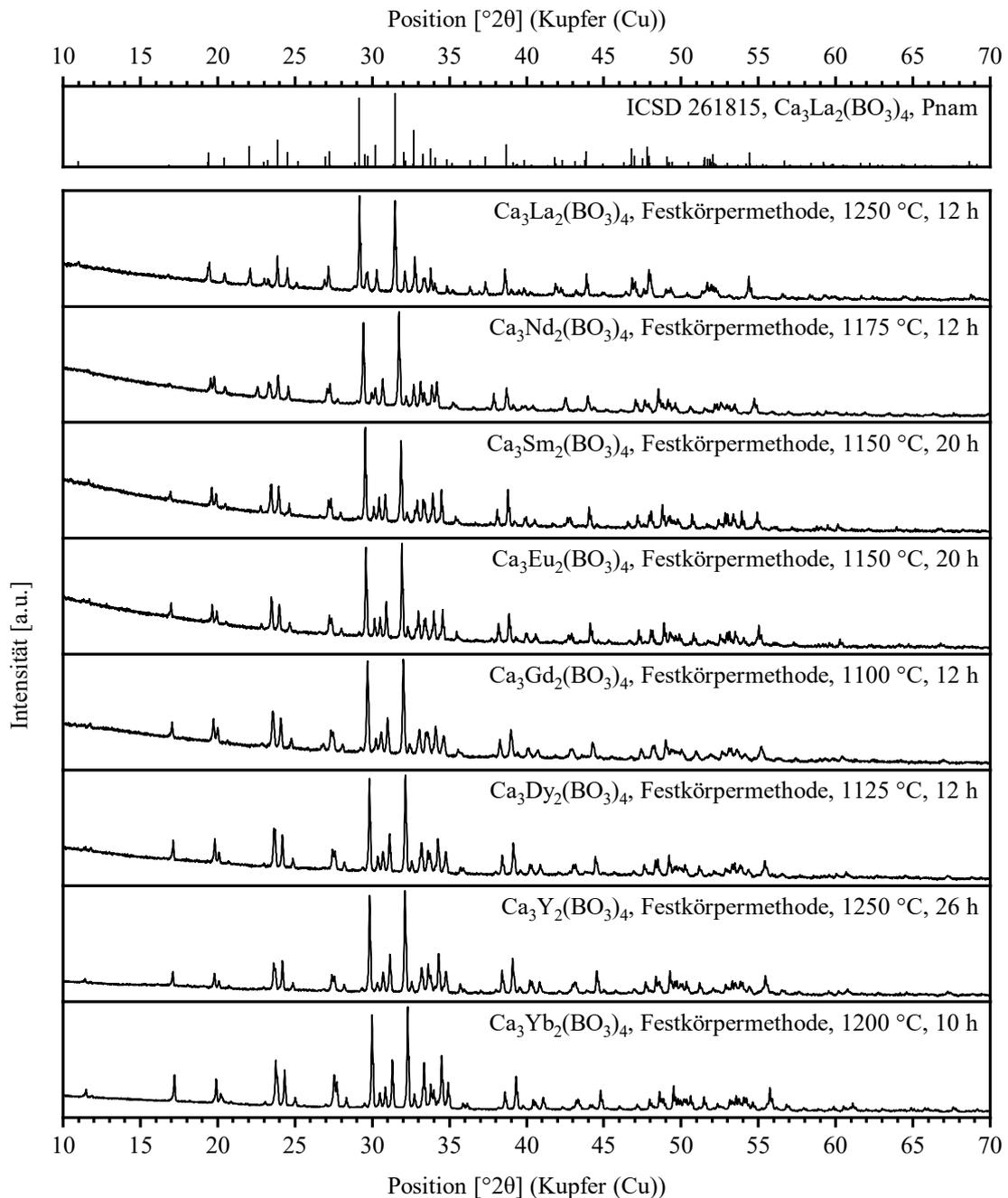


Abb. 99: Röntgendiffraktogramme der Verbindungen $\text{Ca}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb)

Tab. 38: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe $3\text{CaO}\cdot\text{La}_2\text{O}_3\cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$

Synthetisierte Phasen	Synthesebedingungen	Gitterparameter			
		a [Å]	b [Å]	c [Å]	V [Å ³]
$\text{Ca}_3\text{La}_2(\text{BO}_3)_4$	1250 °C; 12 h	7,258(9)	16,064(1)	8,675(6)	1011,66(5)
$\text{Ca}_3\text{Nd}_2(\text{BO}_3)_4$	1175 °C; 12 h	7,238(2)	15,721(3)	8,660(6)	985,54(6)
$\text{Ca}_3\text{Sm}_2(\text{BO}_3)_4$	1150 °C; 20 h	7,224(7)	15,592(4)	8,650(7)	974,52(4)
$\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$	1150 °C; 20 h	7,207(7)	15,544(5)	8,630(2)	966,93(7)
$\text{Ca}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$	1100 °C; 12 h	7,194(1)	15,542(0)	8,613(3)	963,06(9)
$\text{Ca}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$	1125 °C; 12 h	7,166(5)	15,481(1)	8,576(5)	951,53(0)
$\text{Ca}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$	1250 °C; 26 h	7,164(2)	15,446(1)	8,548(6)	945,99(1)
$\text{Ca}_3\text{Yb}_2(\text{BO}_3)_4$	1200 °C; 10 h	7,132(0)	15,399(8)	8,508(5)	934,52(0)

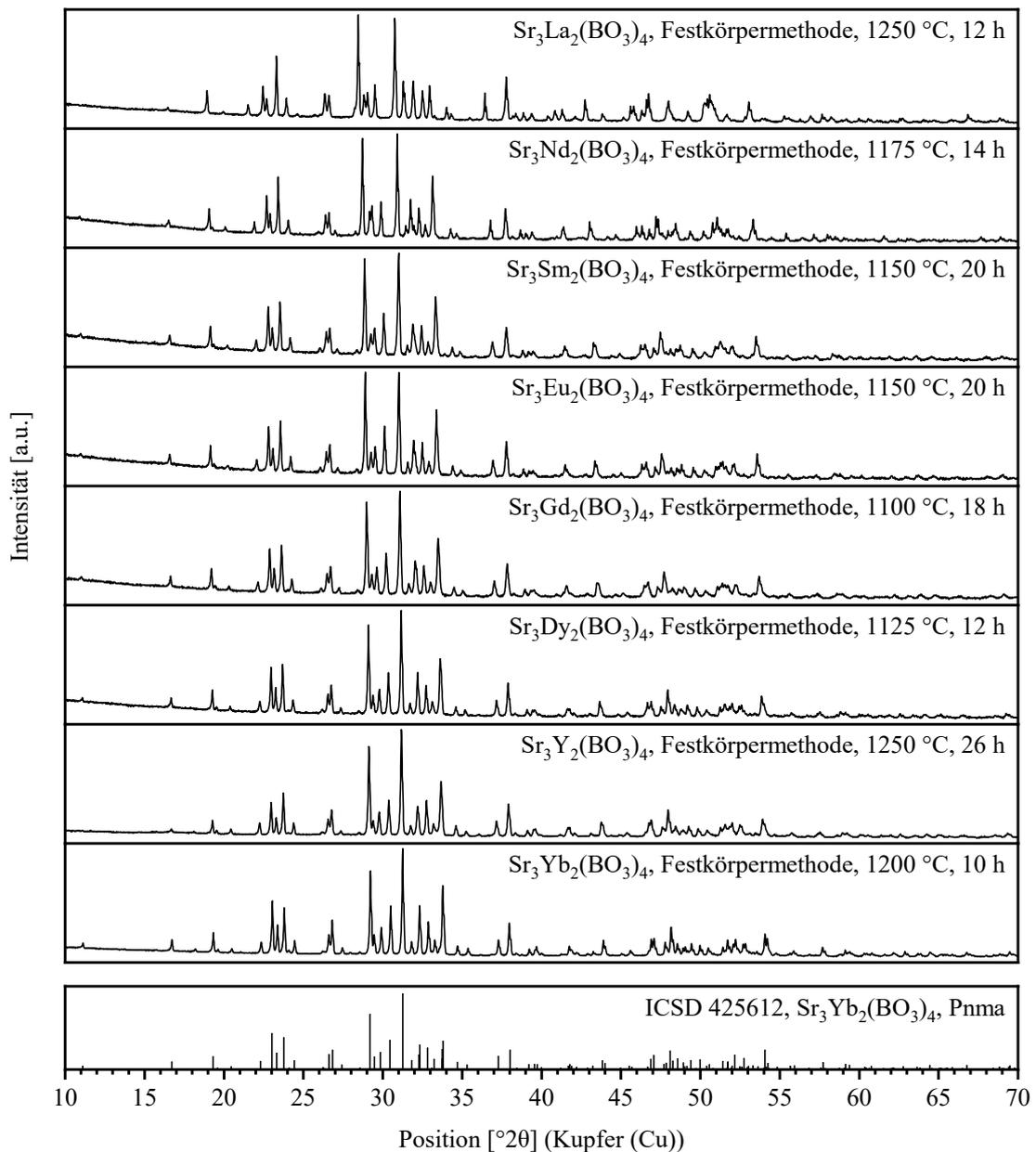
Die Röntgendiffraktogramme der reinphasig synthetisierten Calcium-Seltenerd-Borate $\text{Ca}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb) sind in Abb. 99 gezeigt. Die Referenzkarte ICSD: 261815 für $\text{Ca}_3\text{La}_2(\text{BO}_3)_4$ [206] ist in der ersten Zeile dargestellt. Von oben nach unten nehmen die Ionenradien der eingebauten Seltenen Erden ab. Die Strukturen besitzen die gleiche Kristallstruktur, was sich in den sehr ähnlichen Röntgendiffraktogrammen widerspiegelt. Die Verfeinerung der Daten war mit der orthorhombischen Raumgruppe Pnma (Nr. 62) erfolgreich. Die Kristallstruktur ist isostrukturell zu der von $\text{Sr}_2\text{Eu}_3(\text{BO}_3)_4$ und ist bereits in Abschnitt 5.4.3 beschrieben: sie besteht aus isolierten BO_3 -Dreiecken und drei unabhängigen M1O_8 -, M2O_8 - und M3O_8 -Polyedern, die durch Ecken und Kanten verbunden sind (vgl. Abb. 81).

$\text{Sr}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb)

Tab. 39 fasst die Ergebnisse der Synthese der Strontium-Seltenerd-Borate $\text{Sr}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb) zusammen. Analog zum vorherigen Abschnitt war der Einbau der Seltenen Erden in Borate in der Sr-Serie von Lanthan mit großem Ionenradius bis zu Ytterbium mit kleinem Ionenradius durchweg erfolgreich. Die zugehörigen Röntgendiffraktogramme der reinphasig synthetisierten Phasen $\text{Sr}_3\text{La}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Nd}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Sm}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$ und $\text{Sr}_3\text{Yb}_2(\text{BO}_3)_4$ sind in Abb. 100 gezeigt. Zudem ist die Referenzkarte ICSD 425612 für $\text{Sr}_3\text{Yb}_2(\text{BO}_3)_4$ [222] im unteren Bereich dargestellt. Ausgehend von der ICSD-Karte konnten die Gitterparameter aller Phasen der Sr-Reihe mit Pnma (Nr. 62) mittels Rietveld-Methode verfeinert werden. Die verfeinerten Gitterparameter sind ebenfalls in Tab. 39 aufgeführt. Die Gitterparameter unterscheiden sich nur leicht voneinander und sind direkt abhängig von den Ionenradien der eingebauten Seltenen Erden.

Tab. 39: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe $3\text{SrO}\cdot\text{La}_2\text{O}_3\cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$

Synthetisierte Phasen	Synthesebedingungen	Gitterparameter			
		a [Å]	b [Å]	c [Å]	V [Å ³]
$\text{Sr}_3\text{La}_2(\text{BO}_3)_4$	1250 °C; 12 h	7,414(5)	16,516(9)	8,904(2)	1090,46(1)
$\text{Sr}_3\text{Nd}_2(\text{BO}_3)_4$	1300 °C; 15 h	7,421(0)	16,211(0)	8,839(5)	1063,42(8)
$\text{Sr}_3\text{Sm}_2(\text{BO}_3)_4$	1250 °C; 12 h	7,419(4)	16,137(8)	8,788(0)	1052,23(0)
$\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$	1250 °C; 12 h	7,412(8)	16,093(8)	8,766(2)	1045,81(4)
$\text{Sr}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$	1100 °C; 10 h	7,414(7)	16,070(7)	8,747(9)	1042,39(9)
$\text{Sr}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$	1075 °C; 25 h	7,399(2)	15,966(8)	8,709(0)	1028,90(8)
$\text{Sr}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$	1200 °C; 15 h	7,387(1)	15,960(6)	8,671(3)	1022,37(8)
$\text{Sr}_3\text{Yb}_2(\text{BO}_3)_4$	1200 °C; 22 h	7,381(5)	15,893(2)	8,660(2)	1015,99(7)

Abb. 100: Röntgendiffraktogramme der Verbindungen $\text{Sr}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb)

Um die Koordinationsumgebung von B-O in den synthetisierten Verbindungen zu bestätigen, wurden FTIR-Untersuchungen durchgeführt. Abb. 101 zeigt das IR-Spektrum des KBr-Presslings im Bereich von 1400 bis 400 cm^{-1} . In diesem Bereich liegen die Schwingungspeaks, die für die planare BO_3 -Gruppe charakteristisch sind. Die Auswertung der Daten erfolgte durch Vergleich mit Literaturdaten bekannter Orthoborate [223, 224, 102, 225]. Die Deformations-schwingungen der BO_3 -Einheit erscheinen im IR-Spektrum als Banden bei 592 cm^{-1} , 731 cm^{-1} und 787 cm^{-1} . Die schwache Bande bei 918 cm^{-1} ist der symmetrischen Streckschwingung innerhalb der Boreinheit zugordnet. Die zwei breiten Peaks bei 1261 cm^{-1} und 1185 cm^{-1} sind auf die Dehnungsschwingung der dreieckigen BO_3 -Gruppe zurückzuführen [102].

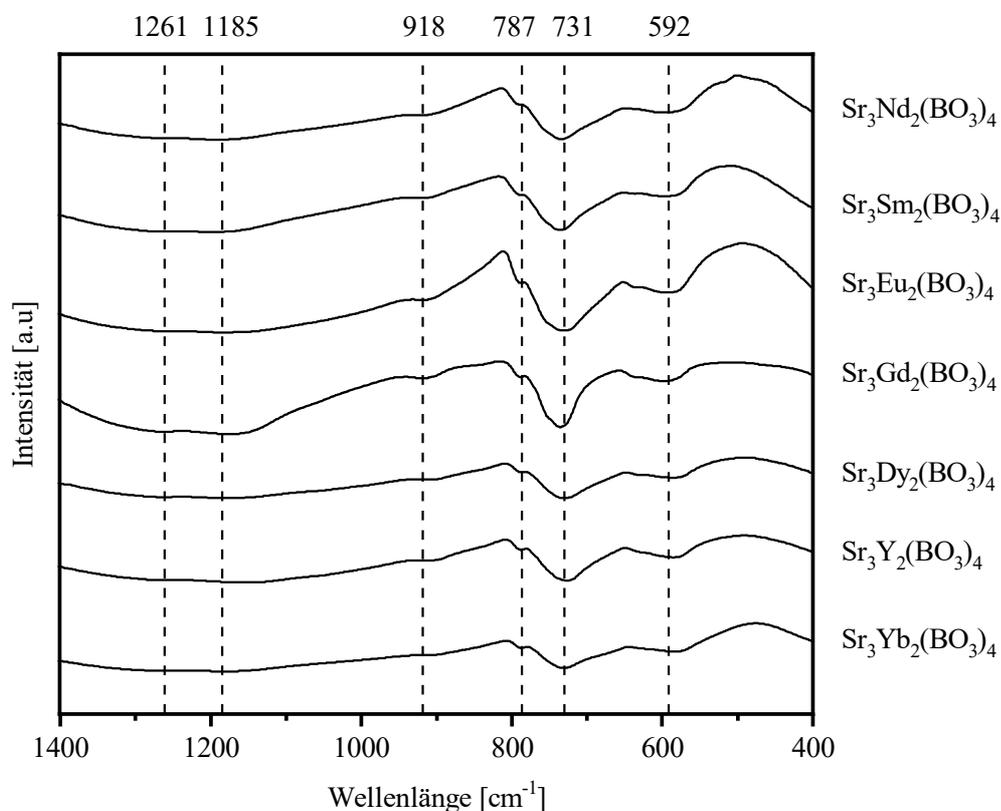


Abb. 101: FTIR-Spektren von $\text{Sr}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb)

Die Zusammensetzung der Orthoborate wurde mithilfe der EDX-Spektroskopie überprüft. Für die Verbindung $\text{Sr}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$ ist das EDX-Spektrum in Abb. 102 gezeigt. Die Messung ergab erwartungsgemäß, dass in der Struktur Strontium, Dysprosium und Bor enthalten sind. Gemessen an drei Punkten ergab sich ein Atomverhältnis von Sr:Dy:B von circa 2,8:1,8:4,3, was dem theoretischen Verhältnis (3:2:4) sehr nah ist.

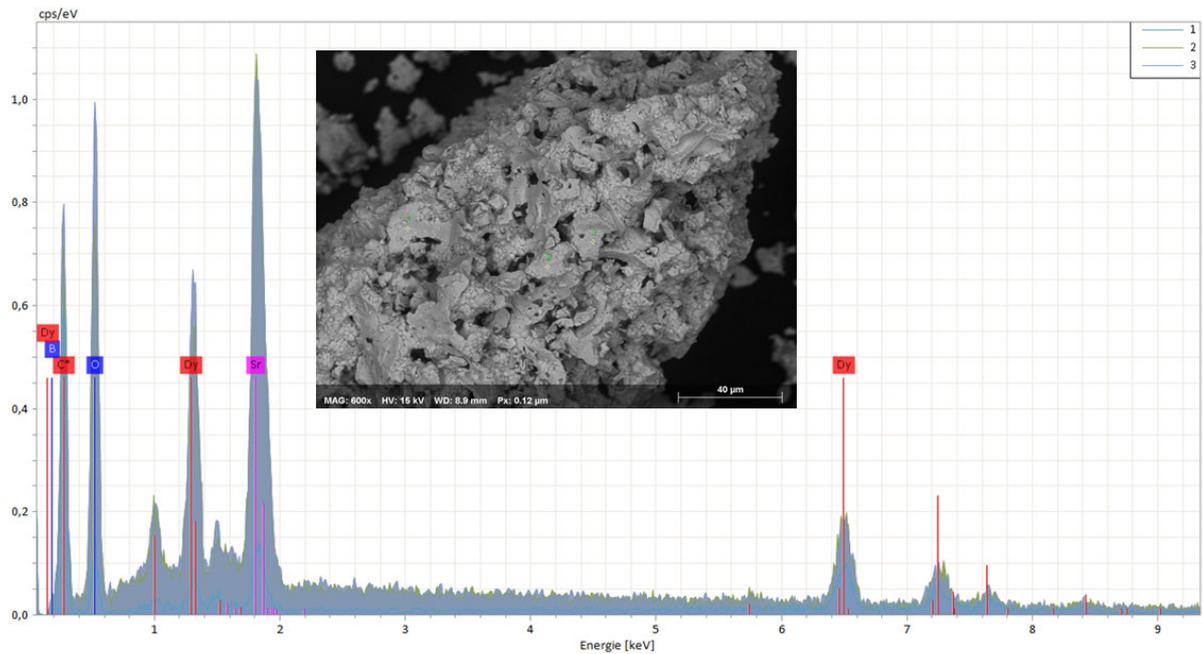


Abb. 102: EDX-Spektrum von $\text{Sr}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$

$\text{Ba}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb)

Das Ergebnis der Synthesereihe der Barium-Seltenerd-Borate $\text{Ba}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb) ist in Tab. 40 zusammengefasst. Dabei war die Synthese bis auf $\text{Ba}_3\text{Yb}_2(\text{BO}_3)_4$ erfolgreich. Die nötige Sinter Temperatur variierte zwischen 1000 und 1300 °C, die Sinterdauer betrug zwischen 10 und 30 Stunden. Bis zu fünfmal wurden die Pulverproben zwischen den drei bis vierstündigen Sinterschritten durch Aufmahlen erneut homogenisiert. Die Röntgendiffraktogramme der reinphasigen Borate $\text{Ba}_3\text{La}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Ba}_3\text{Nd}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Ba}_3\text{Sm}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Ba}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Ba}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$ und $\text{Ba}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$ sind in Abb. 103 abgebildet. Zur Phasenidentifizierung ist oben die Referenzkarte ICDD: 01-077-0546 für $\text{Ba}_3\text{La}_2(\text{BO}_3)_4$ [226] und unten die Referenzkarte ICDD: 00-048-0307 [227] für $\text{Ba}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$ abgebildet.

Tab. 40: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese von der Reihe $3\text{BaO}\cdot\text{La}_2\text{O}_3\cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$

Einwaage-stöchiometrie	Synthesebedingungen	Ergebnisse
$3\text{BaO}\cdot\text{La}_2\text{O}_3\cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$	1300 °C; 40 h	$\text{Ba}_3\text{La}_2(\text{BO}_3)_4$
$3\text{BaO}\cdot\text{Nd}_2\text{O}_3\cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$	1125 °C; 18 h	$\text{Ba}_3\text{Nd}_2(\text{BO}_3)_4$
$3\text{BaO}\cdot\text{Sm}_2\text{O}_3\cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$	1125 °C; 18 h	$\text{Ba}_3\text{Sm}_2(\text{BO}_3)_4$
$3\text{BaO}\cdot\text{Eu}_2\text{O}_3\cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$	1150 °C; 18 h	$\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$
$3\text{BaO}\cdot\text{Gd}_2\text{O}_3\cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$	1100 °C; 10 h	$\text{Ba}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$
$3\text{BaO}\cdot\text{Dy}_2\text{O}_3\cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$	1150 °C; 12 h	$\text{Ba}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$
$3\text{BaO}\cdot\text{Y}_2\text{O}_3\cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$	1200 °C; 22 h	$\text{Ba}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$
$3\text{BaO}\cdot\text{Yb}_2\text{O}_3\cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$	1000 - 1150 °C; 30 h	$\text{Ba}_6\text{Yb}_5(\text{BO}_3)_9$; $\text{Ba}_3\text{Yb}(\text{BO}_3)_3$; Yb_2O_3

Die Bariumborate $\text{Ba}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy und Y) kristallisieren in orthorhombischer Struktur mit der Raumgruppe Pnma (Nr. 62). Sie sind isostrukturell zu den bereits beschriebenen Calcium- und Strontiumboraten ($\text{Ca}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$). Von $\text{Ba}_3\text{La}_2(\text{BO}_3)_4$ zu $\text{Ba}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$ kommt es zu einer leichten Verschiebung der Peakpositionen bspw. für den intensivsten (231)-Peak von $26,91^\circ 2\theta$ zu $30,04^\circ 2\theta$. Grund dafür ist der größere Ionenradius von Lanthan im Vergleich zu Ytterbium. Die Verfeinerung der Gitterparameter folgte stets der Korrektur des Probenhöhenfehlers mittels Siliziumzusatz. Die verfeinerten Gitterparameter sind in Tab. 41 angegeben.

Das Sintern der stöchiometrischen Mischung $3\text{BaO}\cdot\text{Yb}_2\text{O}_3\cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$ führte zu zwei verschiedenen Barium-Ytterbium-Boraten. Die Zielverbindung konnte nicht hergestellt werden, auch eine Variation von Sintertemperatur, Sinterdauer und Abkühlrate änderte das Ergebnis nicht. Die Probe wurde bei maximal 1150 °C gesintert, da sie bereits bei 1180 °C schmilzt. Die Zuordnung der Peaks zu $\text{Ba}_3\text{Yb}(\text{BO}_3)_3$ (ICDD 01-077-0977 [228]) und Yb_2O_3 (ICDD 01-084-1879 [157]) war aufgrund der vorhandenen charakteristischen Peaks wenig problematisch. Die Phasenzugehörigkeit der übrigbleibenden Peaks konnte weder mittels ICDD- noch ICSD-Datenbank identifiziert werden. Die einzige sinnvolle Zuordnung war mit der Referenzkarte COD: 2108449 für $\text{Ba}_6\text{Lu}_5(\text{BO}_3)_9$ [229] möglich (vgl. Abb. 104).

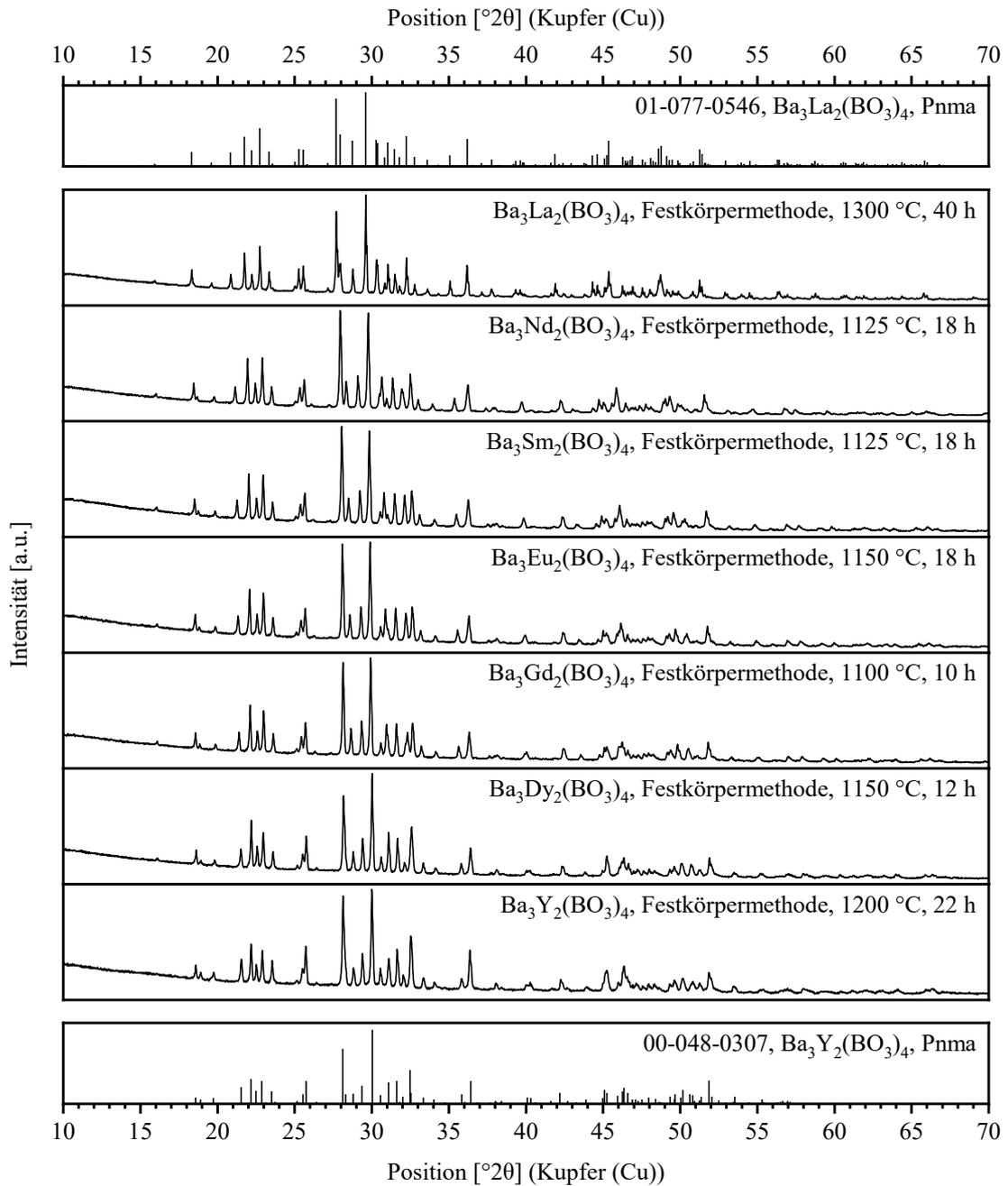
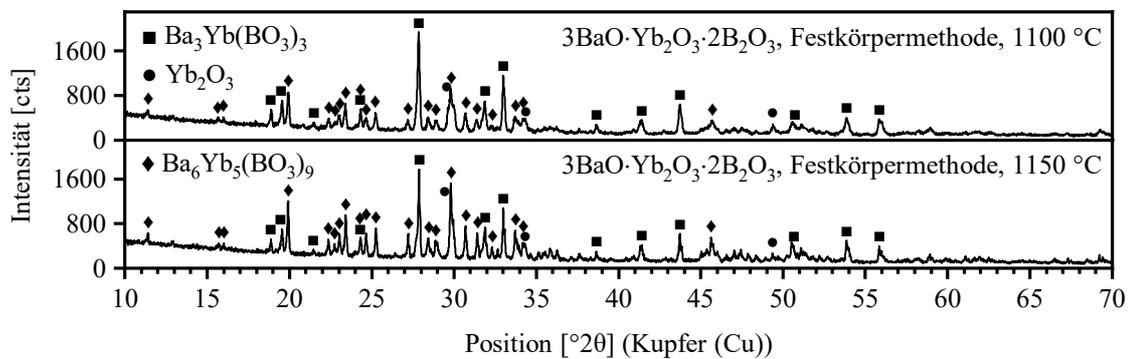


Abb. 103: Röntgendiffraktogramme der Verbindungen $\text{Ba}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy und Y)

Tab. 41: Verfeinerte Gitterparameter für $\text{Ba}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy und Y) bei Raumtemperatur. Raumgruppe: Pnma

Verbindungen	a [Å]	b [Å]	c [Å]	V [Å ³]
$\text{Ba}_3\text{La}_2(\text{BO}_3)_4$	7,740(2)	17,026(5)	9,051(5)	1192,901
$\text{Ba}_3\text{Nd}_2(\text{BO}_3)_4$	7,738(3)	16,807(5)	8,979(8)	1167,952
$\text{Ba}_3\text{Sm}_2(\text{BO}_3)_4$	7,733(3)	16,719(3)	8,952(7)	1157,564
$\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$	7,727(8)	16,667(9)	8,947(4)	1152,500
$\text{Ba}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$	7,721(0)	16,618(2)	8,942(6)	1147,429
$\text{Ba}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$	7,699(0)	16,515(6)	8,960(9)	1139,429
$\text{Ba}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$	7,693(7)	16,469(7)	8,969(6)	1136,581

Da sich die Ionenradien von dreiwertigem Lutetium (86,1 pm) und dreiwertigem Ytterbium (86,8) leicht unterscheiden [25], kann man an dieser Stelle von einer isostrukturellen Verbindung ausgehen. Die mittels Rietveld-Methode erfolgte Verfeinerung der Phase, ausgehend von der Struktur für $\text{Ba}_6\text{Lu}_5(\text{BO}_3)_9$, resultierte in den Gitterparametern $a = 13,103(5)$ Å, $b = 9,992(4)$ Å, $c = 20,542(0)$ Å, $\alpha = \gamma = 90^\circ$ und $\beta = 106,77^\circ$. Es handelt sich um eine monoklinische Struktur mit der Raumgruppe $C12/c1$ (Nr. 15). Die vollständigen Reflexlisten sind im Anhang angegeben.

Abb. 104: Röntgendiffraktogramme von $3\text{BaO}\cdot\text{Yb}_2\text{O}_3\cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$

5.6.3. Sm^{3+} -Lumineszenz in $\text{M}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ (M = Ca, Sr, Ba)

Die Leuchtstoffe $\text{M}_3\text{Eu}_{2(1-x)}\text{Sm}_{2x}(\text{BO}_3)_4$ (M = Ca, Sr und Ba; $x \leq 0,02$) wurden mittels Festkörpermethode synthetisiert. Die stöchiometrische Menge der Metalloxide bzw. -nitrate und Borsäure wurden homogen aufgemahlen und bei 1150°C für 6 h gesintert. Nach einer Sinterzeit von 2 Stunden wurden die Proben erneut aufgemahlen bzw. homogenisiert. Die Röntgendiffraktogramme der dotierten Wirtsgitter sind in Abb. 105 gezeigt. Jede Spalte steht für eine Erdalkalireihe: In der ersten Spalte ist das Wirtsgitter $\text{Ca}_3\text{Eu}_{2(1-x)}\text{Sm}_{2x}(\text{BO}_3)_4$, in der zweiten $\text{Sr}_3\text{Eu}_{2(1-x)}\text{Sm}_{2x}(\text{BO}_3)_4$ und in der dritten $\text{Ba}_3\text{Eu}_{2(1-x)}\text{Sm}_{2x}(\text{BO}_3)_4$ dargestellt. In der ersten Zeile sieht man die undotierten Wirtsgitter ($x = 0,00$), mit zunehmender Zeilenzahl steigt die

Dotierungskonzentration der Wirtsgitter bis 2,00 mol-% Sm^{3+} ($x = 0,02$). Röntgenographisch konnte keine Nebenphase detektiert werden.

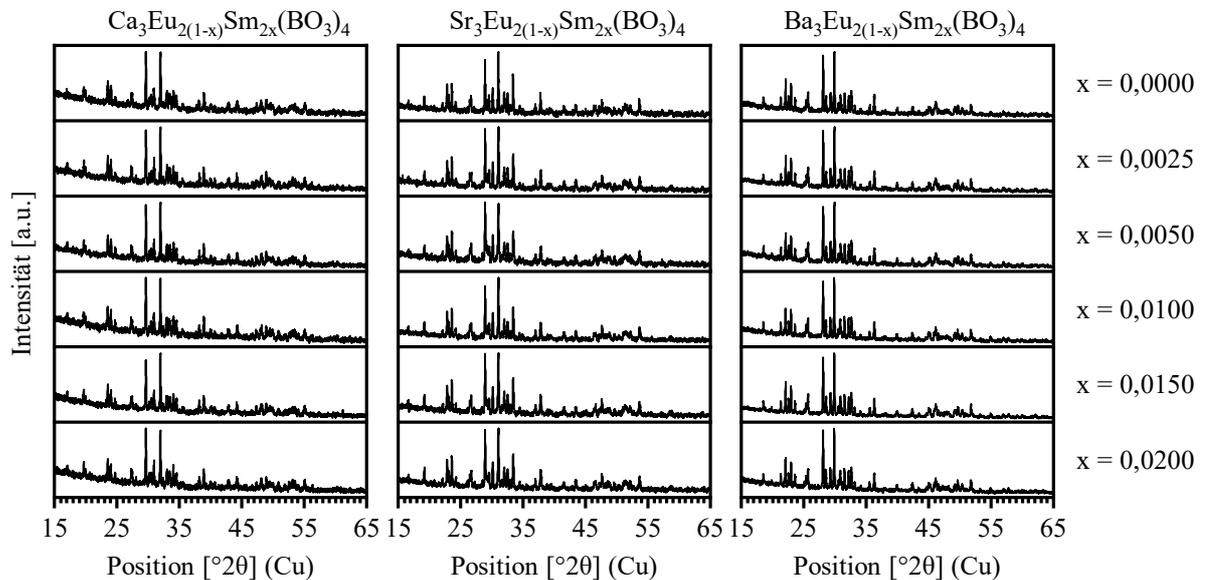


Abb. 105: Röntgendiffraktogramme von mit Sm^{3+} dotiertem $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ und $\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$

Die Anregungs- und Emissionsspektren der Wirtsgitter sind in Abb. 106 dargestellt. Sie bestehen aus für Eu^{3+} charakteristischen Übergängen. Die Zuordnung der Übergänge zu entsprechenden Wellenlängen ist in Tab. 42 aufgelistet. Die Übergänge wurden ausführlich in Abschnitt 5.3.3 beschrieben. Die Röntgendiffraktogramme der mit 2 mol-% Sm^{3+} dotierten Erdalkali-Europium-Aluminate zeigen eine sehr große Übereinstimmung zu den nicht dotierten Wirtsgittern. Die Anregungs- und Emissionsintensitäten von Eu^{3+} sind so hoch, dass die von Sm^{3+} verursachte Lumineszenz überdeckt wird.

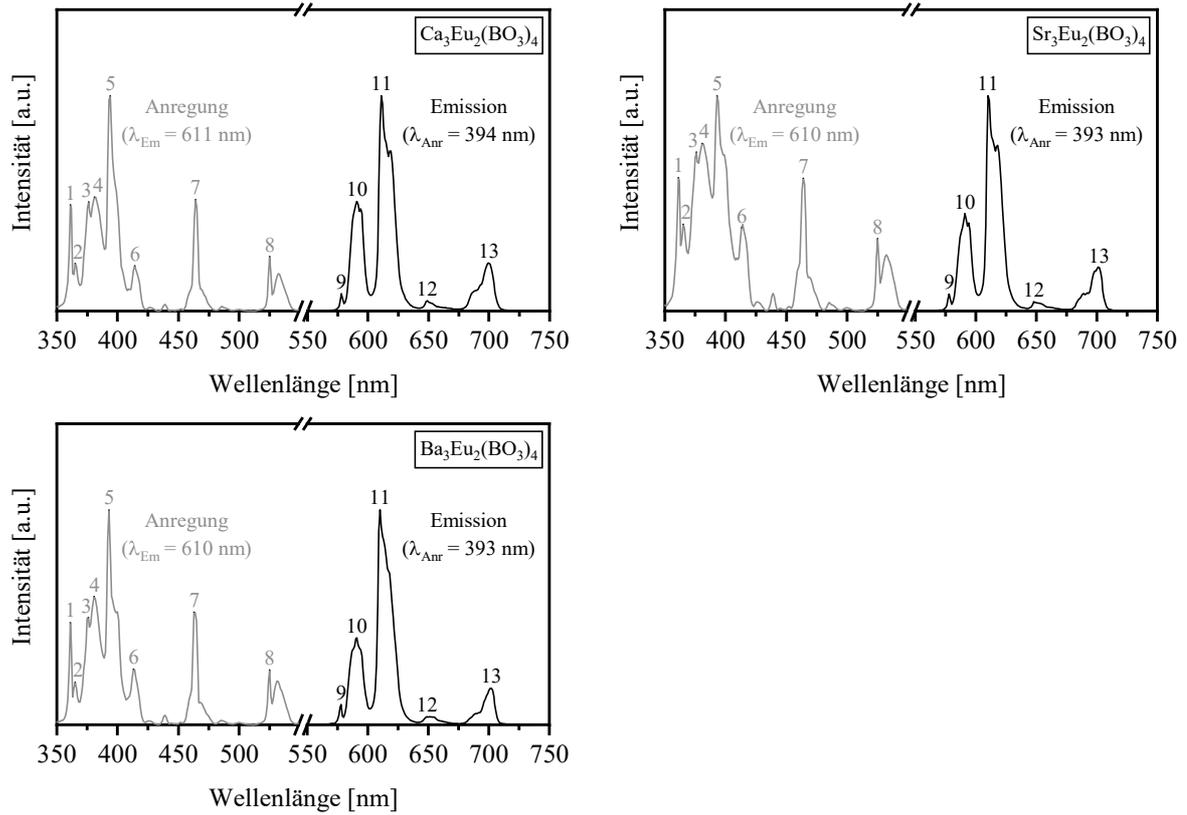


Abb. 106: Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ und $\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$, Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 42

Tab. 42: Beobachtete Eu^{3+} -Übergänge in $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ und $\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ (Nummerierung siehe Abb. 106)

Peak Nr.	Übergang	beobachtete Wellenlänge [nm] im Wirtsgitter		
		$\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$	$\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$
1	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{D}_4$	361	361	361
2	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{L}_8$	365	365	365
3	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{G}_3$	376	376	376
4	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{L}_7$	381	381	381
5	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{L}_6$	394	393	393
6	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{D}_3$	414	414	413
7	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{D}_2$	464	464	463
8	${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{D}_1$	525	525	525
9	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_0$	578	578	578
10	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_1$	591	591	591
11	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_2$	611	610	610
12	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_3$	649	648	649
13	${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_4$	700	701	702

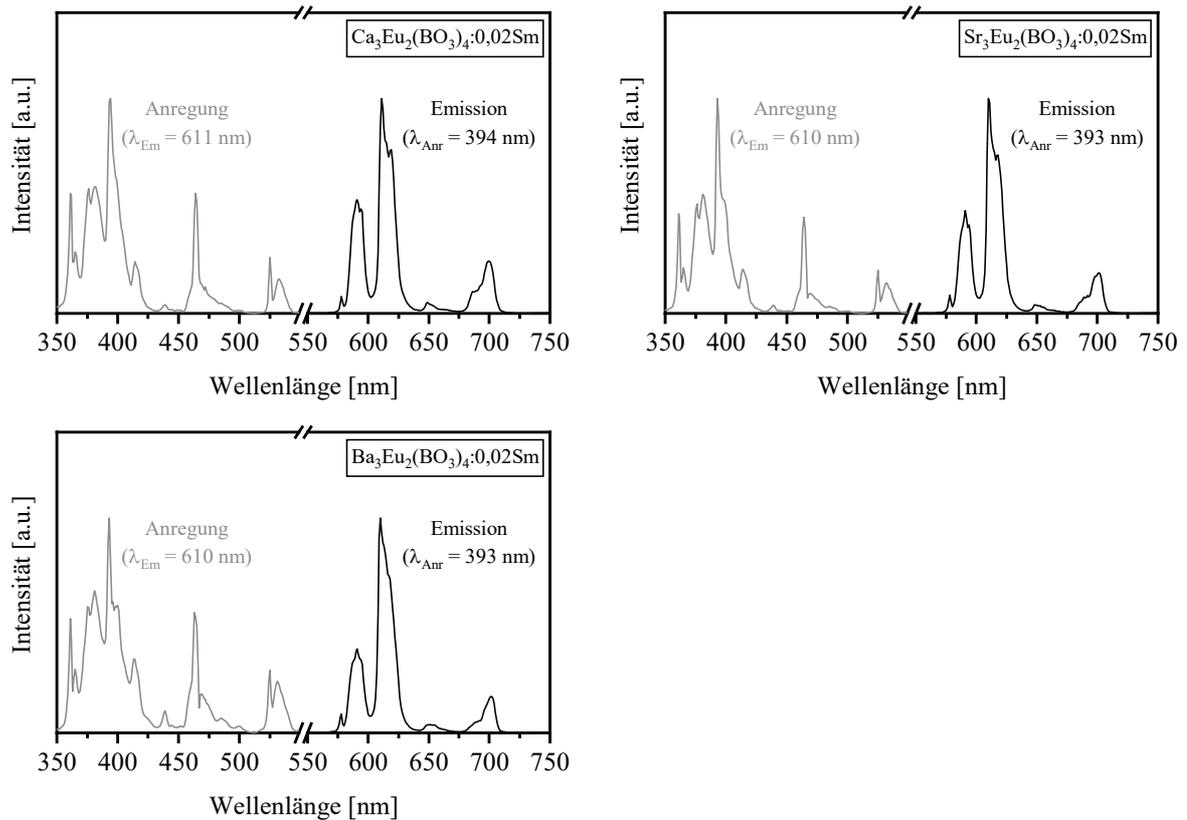


Abb. 107: Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4:0,02\text{Sm}$, $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4:0,02\text{Sm}$ und $\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4:0,02\text{Sm}$, Raumtemperatur

5.6.4. Dy^{3+} -Lumineszenz in $\text{M}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ ($\text{M} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$)

Die Dotierung der Wirtsgitter $\text{M}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ ($\text{M} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) mit Dy^{3+} erfolgte, analog zum vorherigen Abschnitt, mittels Festkörpermethode bei $1150 \text{ }^\circ\text{C}$ für 6 Stunden. Die Röntgendiffraktogramme der mit bis zu 2,00 mol-% Dy^{3+} dotierten Erdalkali-Europium-Aluminate sind in Abb. 108 gezeigt. Dabei ist die Darstellungsart gleich der im vorherigen Abschnitt. Erwartungsgemäß konnte auch hier keine Nebenphase detektiert werden.

Die Anregungs- und Emissionsspektren von mit 2 mol-% Dy^{3+} dotiertem $\text{M}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ ($\text{M} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) sind in Abb. 109 gezeigt. Auch hier ist die Lumineszenzintensität des Europiums des Wirtsgitters so intensiv, dass die Anregungswellenlänge von Dy^{3+} nicht sichtbar ist (Eu^{3+} : ${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{L}_8$ bei 361 bzw. 362 nm und Dy^{3+} : ${}^6\text{H}_{15/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{11/2}$ bei ca. 360 nm). Im Emissionsspektrum sind lediglich die für Eu^{3+} typischen Übergänge, die bereits in Abschnitt 5.6.3 aufgelistet sind, erkennbar. Aufgrund der großen Überlappung der Anregungswellenlänge des Eu^{3+} des Wirtsgitter und des Aktivators Dy^{3+} wurden keine Dy^{3+} -konzentrationsabhängigen Lumineszenzmessungen durchgeführt.

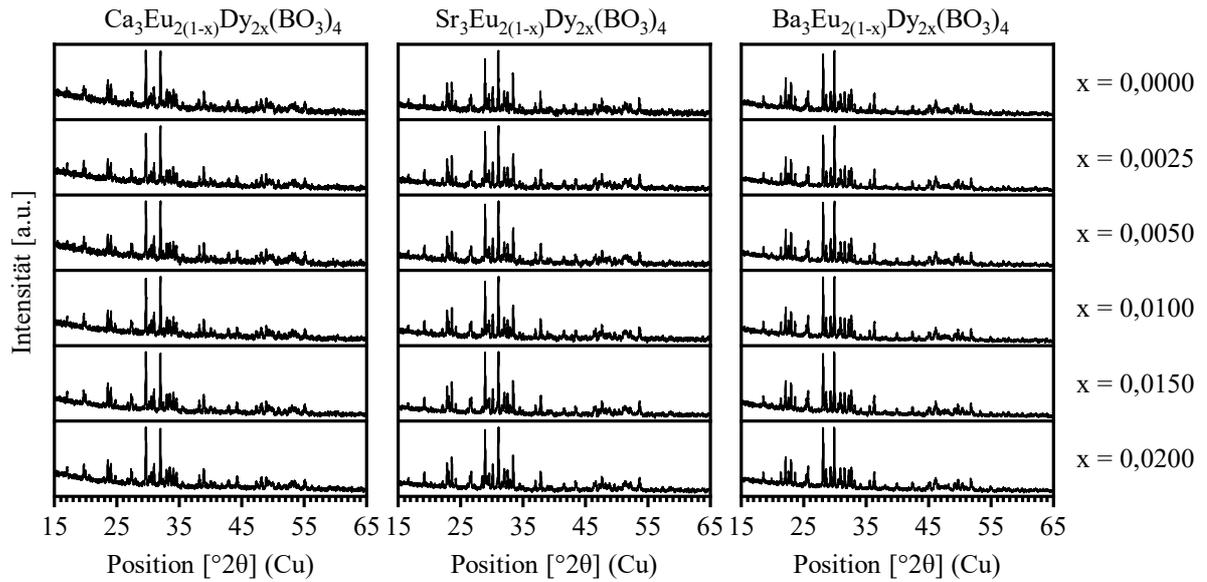


Abb. 108: Röntgendiffraktogramme von mit Dy^{3+} dotiertem $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ und $\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$

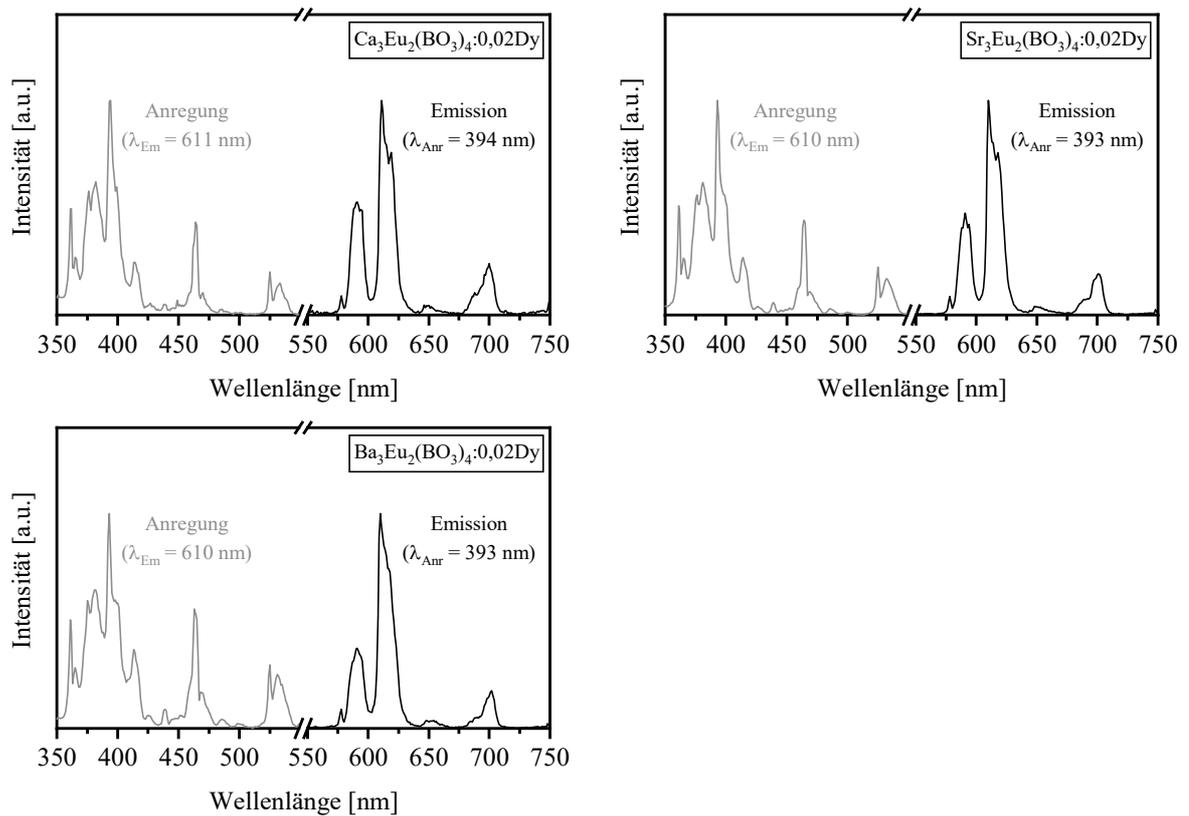


Abb. 109: Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4:0,02\text{Dy}$, $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4:0,02\text{Dy}$ und $\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4:0,02\text{Dy}$, Raumtemperatur

5.6.5. Zusammenfassung und Diskussion

Ein Überblick der Erdalkali-Seltenerd-Borate, die im Rahmen dieser Arbeit reinphasig mittels Festkörpermethode synthetisiert wurden, ist in Tab. 43 gegeben. Stöchiometrische Mengen an Ausgangsoxiden bzw. Nitraten wurden gut homogenisiert und je nach gewünschter Phase bei 1000 bis 1300 °C für 10 bis 30 Stunden im Muffelofen gesintert. Dabei wurde darauf geachtet, 5 mol-% Überschuss an Borsäure zuzugeben, um den Borverlust beim Sintern zu kompensieren.

Tab. 43: Darstellung der durchgeführten Synthesen von Erdalkali-Seltenerd-Boraten

	CaO	SrO	BaO
La₂O₃	Ca ₃ La ₂ (BO ₃) ₄	Sr ₃ La ₂ (BO ₃) ₄	Ba ₃ La ₂ (BO ₃) ₄
Nd₂O₃	Ca ₃ Nd ₂ (BO ₃) ₄	Sr ₃ Nd ₂ (BO ₃) ₄	Ba ₃ Nd ₂ (BO ₃) ₄
Sm₂O₃	Ca ₃ Sm ₂ (BO ₃) ₄	Sr ₃ Sm ₂ (BO ₃) ₄	Ba ₃ Sm ₂ (BO ₃) ₄
Eu₂O₃	Ca ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄	Sr ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄	Ba ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄
Gd₂O₃	Ca ₃ Gd ₂ (BO ₃) ₄	Sr ₃ Gd ₂ (BO ₃) ₄	Ba ₃ Gd ₂ (BO ₃) ₄
Dy₂O₃	Ca ₃ Dy ₂ (BO ₃) ₄	Sr ₃ Dy ₂ (BO ₃) ₄	Ba ₃ Dy ₂ (BO ₃) ₄
Y₂O₃	Ca ₃ Y ₂ (BO ₃) ₄	Sr ₃ Y ₂ (BO ₃) ₄	Ba ₃ Y ₂ (BO ₃) ₄
Yb₂O₃	Ca ₃ Yb ₂ (BO ₃) ₄	Sr ₃ Yb ₂ (BO ₃) ₄	Ba ₃ Yb ₂ (BO ₃) ₄

grau hinterlegt: stabile Verbindungen

durchgestrichen: theoretische Zusammensetzung der nicht stabilen Verbindung

Die in Tab. 43 grau hinterlegten stabilen Verbindungen sind zueinander isostrukturell, sie kristallisieren in orthorhombischer Struktur mit der Raumgruppe Pnma (Nr. 62). Bei der Zuordnung der Raumgruppe kam außer Pnma ebenfalls P2₁cn (Nr. 33) infrage. Anhand der Röntgendiffraktogramme sind beide Raumgruppen durch das Auftreten der systematisch ausgelöschten Reflexe möglich. Die Verfeinerung der Daten erfolgte mit der Raumgruppe Pnma, welche eine höhere Symmetrie aufweist. Die Anordnung der Struktureinheiten ist der des Strukturtyps Gd₅Si₄ mit vier Formeleinheiten pro Elementarzelle sehr ähnlich [230]. Die Erdalkali- und Seltenerd-Atome ersetzen in der Struktur von Gd₅Si₄ formal die Gadolinium-Atome, während die isolierten Borat-Anionen (BO₃)³⁻ die Siliziumplätze übernehmen [231]. Die planaren (BO₃)³⁻-Einheiten konnten des Weiteren mittels FTIR bestätigt werden.

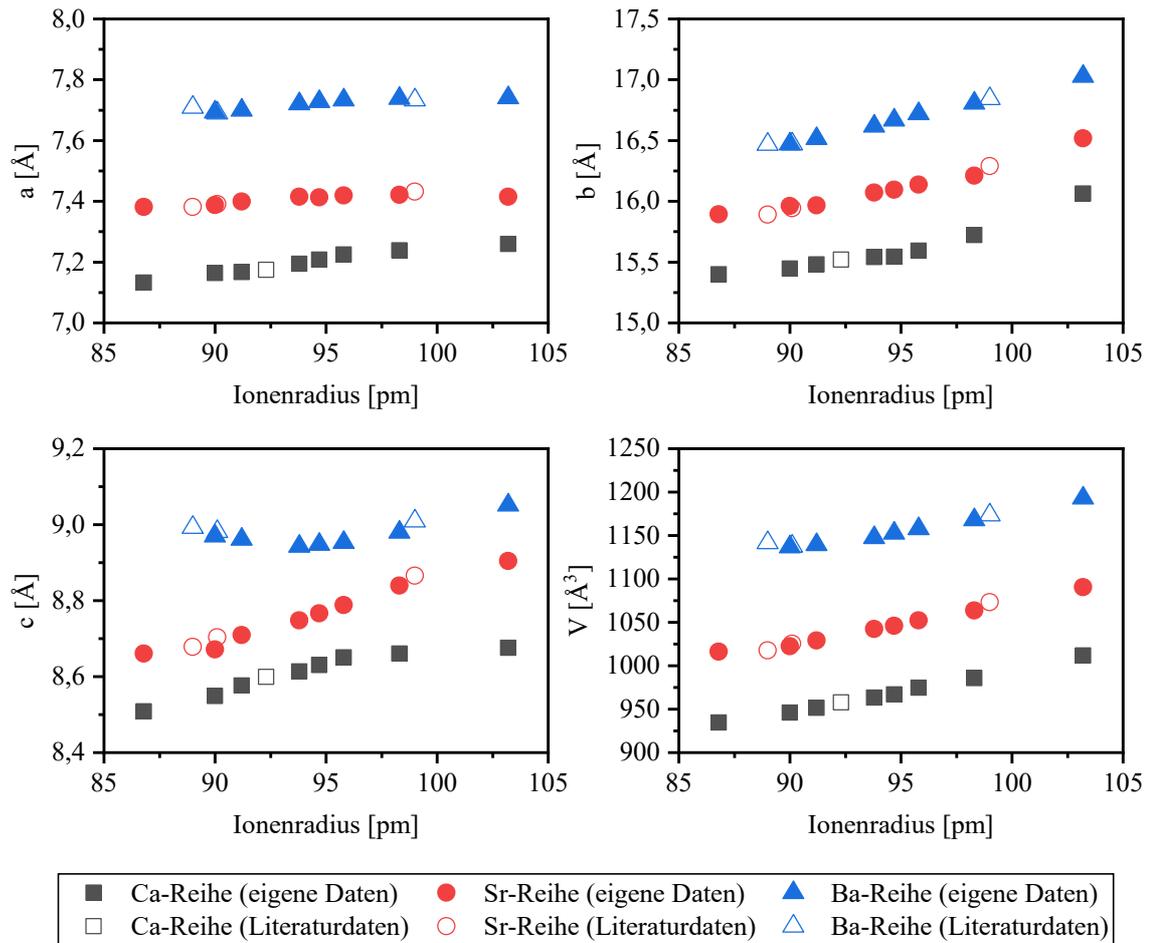


Abb. 110: Abhängigkeit der $M_3RE_2(BO_3)_4$ -Gitterparameter vom REE^{3+} -Ionenradius

Um die Abhängigkeit der Gitterparameter der synthetisierten Phasen von den eingebauten Seltenen Erden zu verdeutlichen wurden die verfeinerten Gitterparameter a , b , c sowie das Zellvolumen V in Abb. 110 gegen die Ionenradien der Seltenen Erden aufgetragen. Die Plots für den Einheitszellparameter b und das Volumen verhalten sich nahezu linear, während die Variationen der Gitterparameter a und c offensichtlich nichtlinear sind. Die beobachtete Nichtlinearität ist wahrscheinlich auf Unterschiede in der partiellen Besetzung der Erdalkalimetalle durch REE-Ionen zurückzuführen [232].

Die Synthese der Leuchtstoffe $M_3Eu_2(BO_3)_4:xSm$ und $M_3Eu_2(BO_3)_4:xDy$ ($0,0025 \leq x \leq 0,02$) erfolgte mittels Festkörpersynthese bei 1150 °C für 6 h. Röntgenographische Untersuchungen haben gezeigt, dass dabei keine neue Phase entstanden ist: aufgrund der ähnlichen Ionenradien nehmen Samarium und Dysprosium die Atomposition von Europium ein. Aus diesem Grund sind auch die Anregungs- und Emissionsspektren der dotierten und nicht dotierten Phasen sehr ähnlich. Der stärkste Peak im Anregungsspektrum ist dem Übergang ${}^7F_0 \rightarrow {}^5L_6$ von Eu^{3+}

zuzuordnen (bei ca. 394 nm), im Emissionsspektrum entspricht das Maximum dem Übergang $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$ von Eu^{3+} . Es konnten keine zusätzlichen Übergänge detektiert werden, die typisch für Sm^{3+} oder Dy^{3+} wären. Die starken elektronischen Übergänge von Eu^{3+} überlappten mit den elektronischen Übergängen von Sm^{3+} und Dy^{3+} . Aus diesem Grund kann an dieser Stelle nicht prognostiziert werden, ob eine höhere Dotierungskonzentration zu einem anderen Ergebnis führen würde.

6. Zusammenfassung und Ausblick

Weißer LEDs gewinnen als Leuchtmittel in den letzten zwei Jahrzehnten zunehmend an Bedeutung. Sie sind charakterisiert durch eine hohe Lichtausbeute, kleine erforderliche Baugrößen und insbesondere einen geringen Energiebedarf. Trotz weltweit intensiver Forschung zur Verbesserung dieser Leuchtstoffe besteht nach wie vor ein hohes Optimierungspotenzial. Bessere WLEDs zeichnen sich dabei durch verbesserte Lumineszenzeigenschaften und eine gesteigerte Energieeffizienz aus. Die vorliegende Arbeit stellt eine Erweiterung des Forschungsstands zu energieeffizienten WLED dar. Im Fokus steht die Synthese und Charakterisierung von Festkörperverbindungen wie Aluminaten und Boraten mit Erdalkalimetallen und deren Überprüfung in Hinblick auf ihre Eignung als Wirtsgitter für lumineszierende Stoffe.

Die Synthese der reinphasigen Wirtsgitter geschah vorzugsweise mittels Pechini-Methode, da die gute Homogenisierung der Ausgangssubstanzen in einer Lösung die notwendige Sinterdauer verkürzt und eine niedrigere Sintertemperatur benötigt wird. Für borhaltige Verbindungen kam die Festkörpermethode zum Einsatz, um die Bildung einer Borschicht zu vermeiden. Weiterhin wurde versucht, neue und bereits bekannte Wirtsgitterverbindungen mit dreiwertigem Samarium und Dysprosium zu dotieren, um den Einfluss der Kristallsymmetrie auf die optischen Eigenschaften zu untersuchen und ggf. den optimalen Dotierungsgehalt festzustellen.

Die reinphasige Synthese und anschließende Charakterisierung der Wirtsgitter sind essentielle Schritte vor der Analyse der Wirkung einer Dotierung der Wirtsgitter mit Seltenen Erden. Deshalb wurden zuerst die Wirtsgitter mit der allgemeinen Formel $M^{2+}M^{3+}_2O_4$ systematisch hergestellt und charakterisiert. Als zweiwertige Metalle wurden dabei Calcium, Strontium und Barium verwendet. Als M^{3+} fungierten Al^{3+} (Abschnitt 5.1), B^{3+} (Abschnitt 5.2) und REE^{3+} (Abschnitt 5.3). $CaAl_2O_4$ und $SrAl_2O_4$ besitzen eine monokline Struktur ($P2_1/n$ bzw. $P2_1$), $BaAl_2O_4$ kristallisiert in hexagonaler Struktur mit der Raumgruppe $P6_3$. CaB_2O_4 und SrB_2O_4 sind isostrukturell und kristallisieren im orthorhombischen Kristallsystem $Pbcn$, während BaB_2O_4 die trigonale Kristallstruktur $R3c$ besitzt. Im Bereich der Erdalkali-Seltenerd-Verbindungen $MREE_2O_4$ waren nicht alle Verbindungen stabil. Aufgrund der ähnlichen Ionenradien der Seltenen Erden ist es möglich, eine systemische Untersuchung der Stabilität der orthorhombischen $MREE_2O_4$ durchzuführen. Die zweiwertigen Erdalkalimetalle müssen in

den Lücken, die durch das Netzwerk von $[\text{REEO}_6]$ -Oktaedern entstehen, stabilisiert werden können. Liegt das Ionenverhältnis von Seltener Erde zu Erdalkali-Metall ($r_{\text{REE}^{3+}}/r_{\text{M}^{2+}}$) zwischen 0,64 und 0,81, dann ist diese Verbindung stabil. Für die Stabilität der orthorhombischen MREE_2O_4 wurde bisher keine Regel für das zulässige Verhältnis der Ionenradien festgelegt. Die verfeinerten Gitterparameter der Erdalkali-Seltenerd-Oxide sind in Übereinstimmung mit den Literaturwerten [131, 129, 115, 155, 233–235].

Im Rahmen der gezielten Suche nach weiteren für die Herstellung von lumineszierenden Materialien geeigneten Wirtsgitterverbindungen, insbesondere unter Einbindung von Seltenerdelementen als Kation, wurden die Systeme SrAl_2O_4 - SrEu_2O_4 und SrB_2O_4 - SrEu_2O_4 analysiert (Abschnitt 5.4). Dabei ergaben sich die intermediären Verbindungen SrEuAlO_4 im erstgenannten System sowie $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ bei letzterem. Bei der systematischen Untersuchung des Verbindungstyps SrEuAlO_4 mit variierenden Erdalkali-Metallen und Seltenen Erden ergab sich eine Abhängigkeit der Stabilität der tetragonalen intermediären Verbindung vom Ionenradius der substituierten Elemente. Die Ca-Reihe war vollständig stabil, während die Sr-Reihe lediglich mit größeren Seltenen Erden kristallisierte. Der größere Ionenradius von Barium erschwerte den Einbau von Seltenen Erden in diesen Strukturtyp: die einzig stabile Verbindung der Ba-Reihe, BaLaAlO_4 , kristallisiert nicht wie erwartet in tetragonaler, sondern in orthorhombischer Struktur. Für die stabilen tetragonalen MREEAlO_4 wurde eine zulässige maximale Abweichung von 22,7 % zwischen den Ionenradien festgestellt. Die Verbindungen $\text{M}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ waren, mit Ausnahme von $\text{Ba}_3\text{Yb}_2(\text{BO}_3)_4$, durchgängig stabil und besitzen eine orthorhombische Kristallstruktur (Nr. 62). Die mittels Pawley-Fit verfeinerten Gitterparameter zeigten ebenfalls eine lineare Abhängigkeit vom Ionenradius der eingebauten Seltenen Erden.

Ein vielversprechender nächster Schritt zur Ermittlung geeigneter Wirtsgitter ist die systematische Analyse möglicher Hochtemperaturmodifikationen. Weiterhin wäre es für zukünftige Arbeiten von großem Interesse, anstatt von Bor und Aluminium andere Elemente aus der dritten Hauptgruppe (bspw. Gallium oder Indium) in das Wirtsgitter einzubauen. Dies würde völlig neue Strukturtypen als Wirtsgitter ermöglichen. So wurden z.B. von Michler die Verbindungen MGa_2O_4 und MLaGaO_4 ($\text{M} = \text{Ca}$ und Sr) untersucht [236]. Dabei konnte festgestellt werden, dass lediglich SrLaGaO_4 in tetragonaler Struktur kristallisiert.

Zur Überprüfung der Eignung der synthetisierten monophasigen Verbindungen als Wirtsgitter für Leuchtstoffe ist eine Dotierung mit geeigneten Aktivatoren notwendig. Zu den wichtigsten Aktivatoren gehören dreiwertiges Samarium und Dysprosium. Beide zeigen sehr effiziente Absorptionsbanden im blauen bzw. nahen UV-Bereich, was eine der wichtigsten

Anforderungen für den Einsatz in WLEDs ist. In den obengenannten Anregungswellenlängenbereichen zeigt Sm^{3+} intensive rot-orangene Emission und Dy^{3+} gelbe Emission. In der vorliegenden Arbeit wurden die Erdalkali-Aluminate und -Borate mit Sm^{3+} und Dy^{3+} im Bereich von 0,25 bis 2,00 mol-% monodotiert. Na^+ wurde als Ladungskompensator stets mit in die Struktur eingebaut. Vergleicht man die Syntheseerfolge der Leuchtstoffe $\text{MAl}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ mit $\text{MB}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ bzw. $\text{MAl}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ mit $\text{MB}_2\text{O}_4:\text{Dy}$, dann lässt sich feststellen, dass die Wirtsgitter MB_2O_4 besser geeignet erscheinen: die meisten der synthetisierten Phasen blieben röntgenographisch reinphasig. Bei den Erdalkalialuminaten traten, mit Ausnahme von $\text{BaAl}_2\text{O}_4:\text{Sm}$, ab einer Dotierung von ca. 1,50 mol-% Nebenphasen wie SmAlO_3 und $\text{SrDyAl}_3\text{O}_7$ auf.

Für zukünftige, weiterführende Arbeiten zur Verbesserung der Syntheseerfolge könnten andere Synthesemethode zum Einsatz kommen. Abgesehen von den hier in der Arbeit eingesetzten Methoden der Pechini- und Festkörpersynthese sind die Verbrennungsmethode (sol combustion) und Fällungsmethode (precipitation method) in der Literatur am weitesten verbreitet. Die Verbrennungsmethode ist eine Weiterentwicklung der Pechini-Methode. Die durch den Einsatz von Glycin als Brennstoff erreichte hohe Reaktionstemperatur sorgt für eine erfolgreiche Synthese der reinphasigen Pulverproben. So können ohne Strukturänderung bis zu 4 mol-% Dy^{3+} in BaAl_2O_4 eingebaut werden [77]. In dieser Arbeit konnte ein maximaler Dotierungsgehalt von 1 mol-% erreicht werden.

Ein direkter Vergleich der in dieser Arbeit synthetisierten $\text{MAl}_2\text{O}_4:\text{Sm}$, $\text{MB}_2\text{O}_4:\text{Sm}$, $\text{MAl}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ und $\text{MB}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ untereinander gestaltet sich schwierig, da die Lumineszenzeigenschaften sehr stark von den Synthesebedingungen abhängen. Die unterschiedliche Kristallinität und Korngröße der Pulverproben hat einen erheblichen Einfluss auf die Lumineszenzeigenschaften. Um bei einem Leuchtstoff wie $\text{SrB}_2\text{O}_4:\text{xSm}^{3+}$ ($\text{x} = 0,0025; 0,005; 0,01; 0,015$ und $0,02$) die optimale Dotierungskonzentration zu ermitteln wurde die Synthesereihe an einem einzigen Tag unter konstanten Bedingungen synthetisiert, auch die Lumineszenzmessungen wurden zum gleichen Zeitpunkt durchgeführt. Betrachtet man die Leuchtstoffgruppen, sind aufgrund der hohen Intensität der Emission insbesondere $\text{CaB}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ und $\text{BaAl}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ von großem Interesse. Bei $\text{BaAl}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ wurde schon bei einem Dotierungsgehalt von 0,25 mol-% das Lumineszenzmaximum erreicht. Die sehr hohe Emission sowohl im grünen (563 nm) als auch im orangenen Bereich (599 nm) macht $\text{CaB}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ äußerst attraktiv für den Einsatz in WLEDs. Für zukünftige Untersuchungen zur Erhöhung der Lumineszenzintensitäten könnten weitere Alkalimetalle wie bspw. Li^+ und K^+ anstatt Na^+ zur

Ladungskompensation eingesetzt werden. Je nach Größe der Alkalimetalle besetzen diese verschiedene Defektpositionen in der Kristallstruktur und verändern die Symmetrie der lokalen Umgebung des Aktivator-Ions Sm^{3+} bzw. Dy^{3+} . Die bestgeeigneten Alkalimetalle müssen experimentell festgestellt werden. Im Fall des Leuchtstoffs $\text{CaMgB}_2\text{O}_4:\text{Sm}$ kann bspw. mit Li^+ die höchste Emissionsintensität erreicht werden, während für den Leuchtstoff $\text{CaZrO}_3:\text{Er}, \text{Y}$ K^+ die optimale Wahl darstellt [71, 74].

Basierend auf den erzielten Ergebnissen scheint in einem nächsten Schritt die systematische Co-Dotierung der Wirtsgitter mit weiteren Seltenen Erden sinnvoll. Dies ermöglicht nicht nur eine wesentliche Erhöhung der Emissionsintensitäten, sondern auch einen sehr langen Nachleuchteffekt (Phosphoreszenz). Derartige Stoffe sind als sogenannte persistente Lumineszenzmaterialien bekannt [159, 237, 160, 238–242]. Brito und Hölsa et al. beobachteten, dass unter den bekannten persistenten Leuchtstoffen die Kombination von Sr als Wirtskation mit einer Co-Dotierung mit Dy^{3+} unabhängig vom Wirtsgittertyp die besten Lumineszenzeigenschaften erzielt [243].

Unerwartet war das Ausbleiben jeglicher Fluoreszenz bei $\text{BaAl}_2\text{O}_4:\text{Sm}$, $\text{SrB}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ und $\text{BaB}_2\text{O}_4:\text{Dy}$. Möglicherweise wurde bereits bei einer Dotierung mit 0,25 mol-% die Fluoreszenzlöschung erreicht. Wahrscheinlicher ist jedoch, dass im System eine strahlungslose Deaktivierung stattfindet. Um sicherzustellen, dass die Ursache nicht in den Synthesebedingungen oder im Zusatz von Na^+ liegt, sollte eine weitere Synthesemethode wie bspw. die Verbrennungsmethode zur Überprüfung der Ergebnisse eingesetzt werden.

Abschließend wurden die europiumhaltigen Wirtsgitter hinsichtlich ihrer Lumineszenzeigenschaften untersucht. In der Literatur lässt sich eine Vielzahl an Analysen der verschiedenen Europium-dotierten Wirtsgitter finden. Die meisten Quellen betrachten jedoch ausschließlich dreiwertiges Europium. Es existieren lediglich wenige Studien zu Lumineszenzeigenschaften von schon im Wirtsgitter enthaltenen Europium. Zu diesen Wirtsgittern zählen allerdings die in dieser Arbeit reinphasig synthetisierten Stoffe SrEu_2O_4 , BaEu_2O_4 , CaEuAlO_4 , SrEuAlO_4 , $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ und $\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$. Die Lumineszenzanalysen zeigten bei allen betrachteten Materialien sehr scharfe Banden, die den elektronischen Übergängen zwischen verschiedenen Energieniveaus der Europium-Ionen entsprechen. Die optimale Anregungswellenlänge liegt bei diesen Wirtsgittern im Bereich zwischen 393 und 395 nm, was dem Übergang ${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{L}_6$ von Eu^{3+} entspricht. Der intensivste Emissionsübergang ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_2$ liegt bei 610 bzw. 611 nm für orthorhombische Wirtsgitter und bei 618 bzw. 619 nm für

tetragonale Wirtsgitter. Die Lumineszenzintensität war dabei so hoch, dass die Messungen mit dem kleinsten Eingangs- und Ausgangsschlitz erfolgen mussten.

Die eben genannten Wirtsgitter wurden mit Dy^{3+} bzw. Sm^{3+} im Bereich von 0,25 – 2,00 mol-% dotiert. Ziel dieser Vorgehensweise war es, abhängig vom Dotierungsgehalt den Einfluss der Kationen auf die Eu^{3+} -Emission zu studieren. Die Leuchtstoffe konnten dabei durchweg röntgenographisch reinphasig synthetisiert werden. Aus der Literatur ist bekannt, dass ein Energieübertrag von Dy^{3+} und Sm^{3+} auf Eu^{3+} existiert. Die Eu^{3+} -Lumineszenz war jedoch derart intensiv, dass die Übergänge von Dy^{3+} und Sm^{3+} im Anregungsspektrum von Eu^{3+} vollständig überdeckt wurden. Lediglich bei $\text{CaEuAlO}_4:\text{Sm}$ und $\text{SrEuAlO}_4:\text{Sm}$ konnte der Sm-Übergang bei 406 nm und 484 nm eindeutig detektiert und dem Übergang ${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{K}_{11/2}$ und ${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{11/2} + {}^4\text{M}_{15/2}$ zugeordnet werden. Bei Anregung der Leuchtstoffe $\text{CaEuAlO}_4:\text{Sm}$ und $\text{SrEuAlO}_4:\text{Sm}$ mit einer Wellenlänge von 406 nm konnten die für Eu^{3+} charakteristischen Emissionsübergänge detektiert werden (${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_1$ und ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_2$). Bei einer Dotierung mit 2 mol-% Sm^{3+} stieg die rote Emission um das Vierfache bei CaEuAlO_4 und das Zweifache bei SrEuAlO_4 . Für zukünftige Arbeiten sollte der maximale Dotierungsgehalt höher gewählt werden, um den optimalen Gehalt an Samarium bei diesem System festlegen zu können. Weiterhin wäre es interessant zu sehen, ab welchem Gehalt die Sm-Übergänge im Emissionsspektrum detektiert werden können. Diese Leuchtstoffe sind deshalb besonders interessant, da sich Europium anstatt mit der üblichen Wellenlänge von 395 nm mit einer Wellenlänge von 406 bzw. 484 nm aufgrund des Energietransfers von Samarium auf Europium anregen lässt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden insgesamt 61 verschiedene Wirtsgitter reinphasig synthetisiert. Die kristallographischen Daten von $\text{Ca}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Ca}_3\text{La}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Ca}_3\text{Nd}_2(\text{BO}_3)_4$ und $\text{Ca}_3\text{Yb}_2(\text{BO}_3)_4$ wurden zur Archivierung in der ICDD-Datenbank weitergeleitet. Die systematischen Untersuchungen der MREE_2O_4 und MREEAlO_4 machte es möglich eine Beziehung zwischen Struktur und Stabilität für die untersuchten Verbindungstypen herzustellen. Als potenzielle Leuchtstoffe für WLEDs wurden die dreiwertigen Seltenen Erden Samarium und Dysprosium in die verschiedenen Wirtsgittertypen eingebaut, insgesamt wurden 26 Leuchtstoffsysteme untersucht. Dabei zeigten drei dieser Systeme keinerlei Fluoreszenz ($\text{BaAl}_2\text{O}_4:\text{Sm}$, $\text{SrB}_2\text{O}_4:\text{Dy}$ und $\text{BaB}_2\text{O}_4:\text{Dy}$). Die optimale Dotierungskonzentration wurde für jeden Leuchtstoff experimentell festgestellt. Die vorliegende Arbeit liefert damit einen umfassenden Beitrag zur Erweiterung des Forschungsstands bereits bekannter sowie bisher in der Forschungslandschaft nicht betrachteter

Leuchtstoffe und bietet damit eine Grundlage für die weitere systematische Suche nach immer effizienteren Leuchtstoffen.

Literaturverzeichnis

- [1] Tonzani, S.: Lighting technology: Time to change the bulb. In: *Nature*, Vol. 459 (2009), Iss. 7245, pp. 312-314.
- [2] Nisson, N.; Wilson, A.: *The Virginia Energy Savers Handbook*, 2008.
- [3] Humphreys, C.J.: Solid-State Lighting. In: *MRS Bulletin* 33 (2008), Heft 4, S. 459-470.
- [4] Ye, S.; Xiao, F.; Pan, Y.X. et al.: Phosphors in phosphor-converted white light-emitting diodes: Recent advances in materials, techniques and properties. In: *Materials Science and Engineering: R: Reports* 71 (2010), Heft 1, S. 1-34.
- [5] Yamada, M.; Narukawa, Y.; Tamaki, H. et al.: A Methodological Study of the Best Solution for Generating White Light Using Nitride-Based Light-Emitting Diodes. In: *IEICE Transactions on Electronics* E88-C (2005), Heft 9, S. 1860-1871.
- [6] Sheu, J.K.; Chang, S.J.; Kuo, C.H. et al.: White-light emission from near UV InGaN-GaN LED chip precoated with blue/green/red phosphors. In: *IEEE Photonics Technology Letters* 15 (2003), Heft 1, S. 18-20.
- [7] Krames, M.R.; Shchekin, O.B.; Mueller-Mach, R. et al.: Status and Future of High-Power Light-Emitting Diodes for Solid-State Lighting. In: *Journal of Display Technology* 3 (2007), Heft 2, S. 160-175.
- [8] Höpfe, H.A.: Aktuelle Entwicklungen auf dem Gebiet der anorganischen Leuchtstoffe. In: *Angewandte Chemie* 121 (2009), Heft 20, S. 3626-3636.
- [9] Ropp, R.C. (ed.): *Luminescence and the solid state*. ScienceDirect (Online service), Studies in inorganic chemistry no. 21, Elsevier, Amsterdam, 2004.
- [10] Shinde, K.N.; Dhoble, S.J.; Swart, H.C. et al.: *Phosphate Phosphors for Solid-State Lighting*, Heft 174, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2012.
- [11] Pawade, V.; Dhoble, S.J.: *Phosphors for energy saving and conversion technology*. CRC Press/Taylor & Francis Group, Boca Raton FL, 2018.
- [12] Ronda, C.: *Luminescence – From theory to applications*. Wiley-VCH, Weinheim, 2008.
- [13] Vijaya, N.; Kumar, K.U.; Jayasankar, C.K.: Dy³⁺-doped zinc fluorophosphate glasses for white luminescence applications. In: *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, Vol. 113 (2013), pp. 145-153.
- [14] Raju, K.V.; Raju, C.N.; Sailaja, S. et al.: Emission analysis of Sm³⁺ and Dy³⁺: Ba₃Y₂WO₉ ceramics. In: *Journal of Luminescence* 134 (2013), S. 297-302.
- [15] Holleman, A.F.; Wiberg, N.: *Lehrbuch der anorganischen Chemie*. De Gruyter, Berlin, 2007.
- [16] Skoog, D.A.; Holler, F.J.; Crouch, S.R.: *Instrumentelle Analytik – Grundlagen - Geräte - Anwendungen*, Lehrbuch, Springer Spektrum, Berlin, 2013.
- [17] Binnewies, M.; Finze, M.; Jäckel, M. et al.: *Allgemeine und Anorganische Chemie*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2016.
- [18] Jüstel, T.; Nikol, H.; Ronda, C.: Neue Entwicklungen auf dem Gebiet lumineszierender Materialien für Beleuchtungs- und Displayanwendungen. In: *Angewandte Chemie* 110 (1998), Heft 22, S. 3250-3271.
- [19] Kasap, S.; Capper, P.: *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*. Springer International Publishing, Cham, 2017.
- [20] Kim, S.-B.; Kum, B.G.; Jang, H.M. et al.: Luminescence efficiencies of self- and Tm³⁺ activated CaWO₄ under vacuum ultraviolet radiation excitation. In: *Journal of Luminescence* 131 (2011), Heft 8, S. 1625-1628.
- [21] Shi, S.; Liu, X.; Gao, J. et al.: Spectroscopic properties and intense red-light emission of (Ca, Eu, M)WO₄ (M = Mg, Zn, Li). In: *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, Vol. 69 (2008), Iss. 2, pp. 396-399.

- [22] Adler, B.; Müller, R.: Seltene Erdmetalle – Gewinnung, Verwendung und Recycling, Berichte aus der Biomechatronik Heft 10, Univ.-Verl. Ilmenau, Ilmenau, 2014.
- [23] Cotton, S.: Lanthanide and actinide chemistry, Inorganic chemistry, Wiley, Chichester, 2006.
- [24] Förg, K.: Fluoreszenz-Spektroskopie – Physikalisches Fortgeschrittenenpraktikum FP28. Universität Augsburg, Lehrstuhl für Festkörperchemie Ausgabe 2016.
- [25] Shannon, R.D.: Revised effective ionic radii and systematic studies of interatomic distances in halides and chalcogenides. In: Acta Crystallographica Section A 32 (1976), Heft 5, S. 751-767.
- [26] Dieke, G.H.; Crosswhite, H.M.: Spectra and energy levels of rare earth ions in crystals. Interscience, New York, 1968.
- [27] Jüstel, T.; Schwung, S.: Leuchtstoffe, Lichtquellen, Laser, Lumineszenz. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2016.
- [28] Gardiner, J.H.: M. Lecoq De Boisbaudran. In: Nature, Vol. 90 (1912), Iss. 2244, pp. 255-256.
- [29] Lei, B.; Liu, Y.; Tang, G. et al.: Spectra and long-lasting properties of Sm³⁺-doped yttrium oxysulfide phosphor. In: Materials Chemistry and Physics 87 (2004), Heft 1, S. 227-232.
- [30] Karali, T.; Can, N.; Townsend, P.D. et al.: Radioluminescence and thermoluminescence of rare earth element and phosphorus-doped zircon. In: American Mineralogist 85 (2000), 5-6, S. 668-681.
- [31] Yen, W.M.; Shionoya, S.; Yamamoto, H.: Phosphor handbook, The CRC Press laser and optical science and technology series, CRC Press/Taylor and Francis, Boca Raton FL, 2007.
- [32] Lei, B.; Li, B.; Zhang, H. et al.: Preparation and luminescence properties of CaSnO₃:Sm³⁺ phosphor emitting in the reddish orange region. In: Optical Materials 29 (2007), Heft 11, S. 1491-1494.
- [33] Carnall, W.T.; Goodman, G.L.; Rajnak, K. et al.: A systematic analysis of the spectra of the lanthanides doped into single crystal LaF₃. In: The Journal of Chemical Physics 90 (1989), Heft 7, S. 3443-3457.
- [34] Yang, H.K.; Chung, J.W.; Moon, B.K. et al.: Crystalline and photoluminescence characteristics of YVO₄:Sm³⁺ thin films grown by pulsed laser deposition under oxygen pressure. In: Journal of Luminescence 129 (2009), Heft 5, S. 492-495.
- [35] Raju, G.S.R.; Buddhudu, S.: Emission analysis of Sm³⁺ and Dy³⁺:MgLaLiSi₂O₇ powder phosphors. In: Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, Vol. 70 (2008), Iss. 3, pp. 601-605.
- [36] Liu, Z.; Stevens-Kalceff, M.A.; Riesen, H.: Effects of postannealing on the photoluminescence properties of coprecipitated nanocrystalline BaFCl:Sm³⁺. In: The Journal of Physical Chemistry A, Vol. 117 (2013), Iss. 9, pp. 1930-1934.
- [37] Wang, Q.; Ci, Z.; Zhu, G. et al.: Multicolor bright Ln³⁺ (Ln = Eu, Dy, Sm) activated tungstate phosphor for multifunctional applications. In: Optical Materials Express 4 (2014), Heft 1, S. 142.
- [38] Taikar, D.R.: Synthesis and luminescence property of SrY₂O₄:M (M = Eu³⁺, Tb³⁺, Sm³⁺, Ce³⁺, Bi³⁺) phosphors. In: Journal of Luminescence 204 (2018), S. 24-29.
- [39] Tian, M.; Li, P.; Wang, Z. et al.: Synthesis, color-tunable emission, thermal stability, luminescence and energy transfer of Sm³⁺ and Eu³⁺ single-doped M₃TbBO₃)₃ (M = Sr and Ba) phosphors. In: CrystEngComm 18 (2016), Heft 36, S. 6934-6947.
- [40] Sáez Puche, R.; Caro, P.: Rare earths, Cursos de verano de El Escorial, Editorial Complutense, Madrid, 1998.

- [41] Su, Q.; Pei, Z.; Lin, J. et al.: Luminescence of Dy³⁺ enhanced by sensitization. In: Journal of Alloys and Compounds 225 (1995), 1-2, S. 103-106.
- [42] Lemański, K.; Dereń, P.J.: Luminescent properties of dysprosium(III) ions in LaAlO₃ nanocrystallites. In: Journal of Rare Earths 29 (2011), Heft 12, S. 1195-1197.
- [43] Li, Y.-C.; Chang, Y.-H.; Lin, Y.-F. et al.: Synthesis and luminescent properties of Ln³⁺ (Eu³⁺, Sm³⁺, Dy³⁺)-doped lanthanum aluminum germanate LaAlGe₂O₇ phosphors. In: 439 (2007), 1-2, S. 367-375.
- [44] Crookes, W.: On the Phosphorescent Spectra of Sδ and Europium. In: Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character 76 (1905), Heft 511, S. 411-414.
- [45] Jørgensen, C.K.; Judd, B.R.: Hypersensitive pseudoquadrupole transitions in lanthanides. In: Molecular Physics 8 (1964), Heft 3, S. 281-290.
- [46] Momma, K.; Izumi, F.: VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data. In: Journal of Applied Crystallography 44 (2011), Heft 6, S. 1272-1276.
- [47] Nienhaus, U.: Fluoreszenzspektroskopie Ausgabe 2012.
- [48] Kakihana, M.: Invited review "Sol-gel" preparation of high temperature superconducting oxides. In: Journal of Sol-Gel Science and Technology 6 (1996), Heft 1, S. 7-55.
- [49] Prodjosantoso, A.K.; Kennedy, B.J.: Synthesis and Evolution of the Crystalline Phases in Ca_{1-x}Sr_xAl₂O₄. In: Journal of Solid State Chemistry 168 (2002), Heft 1, S. 229-236.
- [50] Dougill, M.W.: Crystal Structure of Calcium Monoaluminate. In: Nature 180 (1957), Heft 4580, S. 292-293.
- [51] Raab, B.; Pöllmann, H.: Investigations of the hydration behavior of high reactive pure cement phases. In: International Cement Microscopy Association (Hrsg.): Proceedings of the 32nd International Conference on Cement Microscopy, New Orleans, Louisiana, USA, 2010, S. 1-20.
- [52] Avdeev, M.; Yakovlev, S.; Yaremchenko, A.A. et al.: Transitions between P2₁, P6₃(√3A) and P6₃22 modifications of SrAl₂O₄ by in situ high-temperature X-ray and neutron diffraction. In: Journal of Solid State Chemistry 180 (2007), Heft 12, S. 3535-3544.
- [53] Wang, S.; Gao, H.; Fang, L. et al.: Synthesis and Characterization of BaAl₂O₄ Catalyst and its Photocatalytic Activity Towards Degradation of Methylene Blue Dye. In: Zeitschrift für Physikalische Chemie 233 (2019), Heft 8, S. 1161-1181.
- [54] Hörkner, W.; Müller-Buschbaum, H.: Zur Kristallstruktur von BaAl₂O₄. In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie 451 (1979), Heft 1, S. 40-44.
- [55] Matsuzawa, T.: A New Long Phosphorescent Phosphor with High Brightness, SrAl₂O₄:Eu²⁺,Dy³⁺. In: Journal of The Electrochemical Society 143 (1996), Heft 8, S. 2670.
- [56] Jestin Lenus, A.; Govinda Rajan, K.; Yousuf, M. et al.: Luminescence behaviour of rare earth doped alkaline earth aluminates prepared by the halide route. In: Materials Letters 54 (2002), Heft 1, S. 70-74.
- [57] Hörkner, W.; Müller-Buschbaum, H.: Zur kristallstruktur von CaAl₂O₄. In: Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry 38 (1976), Heft 5, S. 983-984.
- [58] Schulze, A.-R.; Müller-Buschbaum, H.: Zur Verbindungsbildung von MeO:M₂O₃. IV. Zur Struktur von monoklinem SrAl₂O₄. In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie 475 (1981), Heft 4, S. 205-210.
- [59] Sui-Yang, H.; Mühlh, R. von der; Ravez, J. et al.: Phase transition and symmetry in BaAl₂O₄. In: Ferroelectrics 159 (1994), Heft 1, S. 127-132.
- [60] Cheng, B.; Fang, L.; Zhang, Z. et al.: BaAl₂O₄: Eu²⁺, Dy³⁺ Nanotube Synthesis by Heating Conversion of Homogeneous Coprecipitates and Afterglow Characteristics. In: The Journal of Physical Chemistry C 115 (2011), Heft 5, S. 1708-1713.

- [61] Shih, H.-R.; Chang, Y.-S.: Structure and Photoluminescence Properties of Sm^{3+} Ion-Doped YInGe_2O_7 Phosphor. In: *Materials* (Basel, Switzerland), Vol. 10 (2017), Iss. 7.
- [62] Chahar, S.; Taxak, V.B.; Dalal, M. et al.: Structural and photoluminescence investigations of Sm^{3+} doped BaY_2ZnO_5 nanophosphors. In: *Materials Research Bulletin* 77 (2016), S. 91-100.
- [63] Saddeek, Y.B.: Network structure of molybdenum lead phosphate glasses: Infrared spectra and constants of elasticity. In: *Physica B: Condensed Matter* 406 (2011), Heft 3, S. 562-566.
- [64] Huang, Y.M.; Ma, Q.: Long afterglow of trivalent dysprosium doped strontium aluminate. In: *Journal of Luminescence* 160 (2015), S. 271-275.
- [65] Ma, Q.; Zhai, B.; Huang, Y.M.: Effect of sol-gel combustion temperature on the luminescent properties of trivalent Dy doped SrAl_2O_4 . In: *Ceramics International* 41 (2015), Heft 4, S. 5830-5835.
- [66] Kumar, M.V.V.; Jamalalah, B.C.; Gopal, K.R. et al.: Optical absorption and fluorescence studies of Dy^{3+} -doped lead telluroborate glasses. In: *Journal of Luminescence* 132 (2012), Heft 1, S. 86-90.
- [67] Brik, M.G.; Ishii, T.; Tkachuk, A.M. et al.: Energy Level Structure of $\text{LiYF}_4:\text{Dy}^{3+}$: Crystal Field Analysis. In: *Materials Transactions*, Vol. 45 (2004), Iss. 7, pp. 2026-2030.
- [68] Vishwakarma, A.K.; Jha, K.; Jayasimhadri, M. et al.: Red light emitting $\text{BaNb}_2\text{O}_6:\text{Eu}^{3+}$ phosphor for solid state lighting applications. In: *Journal of Alloys and Compounds* 622 (2015), S. 97-101.
- [69] Raju, G.S.R.; Jung, H.C.; Park, J.Y. et al.: Synthesis and luminescent properties of $\text{Dy}^{3+}:\text{GAG}$ nanophosphors. In: *Journal of Alloys and Compounds* 481 (2009), 1-2, S. 730-734.
- [70] Ayvacikli, M.; Ege, A.; Can, N.: Radioluminescence of $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Ln}^{3+}$ ($\text{Ln} = \text{Eu}, \text{Sm}, \text{Dy}$) phosphor ceramic. In: *Optical Materials* 34 (2011), Heft 1, S. 138-142.
- [71] Manhas, M.; Kumar, V.; Sharma, V. et al.: Effect of alkali metal ions (Li^+ , Na^+ and K^+) on the luminescence properties of $\text{CaMgB}_2\text{O}_5:\text{Sm}^{3+}$ nanophosphor. In: *Nano-Structures & Nano-Objects* 3 (2015), S. 9-16.
- [72] Pamuluri, H.; Rathaiah, M.; Linganna, K. et al.: Role of $\text{Dy}^{3+} \rightarrow \text{Sm}^{3+}$ energy transfer in the tuning of warm to cold white light emission in $\text{Dy}^{3+}/\text{Sm}^{3+}$ co-doped $\text{Lu}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ nanogarnets. In: *New Journal of Chemistry* 42 (2018), Heft 2, S. 1260-1270.
- [73] Li, J.; Wang, Y.; Liu, B.: Influence of alkali metal ions doping content on photoluminescence of (Y, Gd) $\text{BO}_3:\text{Eu}$ red phosphors under VUV excitation. In: *Journal of Luminescence* 130 (2010), Heft 6, S. 981-985.
- [74] Maurya, A.; Bahadur, A.; Dwivedi, A. et al.: Optical properties of $\text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ co-doped calcium zirconate phosphor and temperature sensing efficiency: Effect of alkali ions (Li^+ , Na^+ and K^+). In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 119 (2018), S. 228-237.
- [75] Benourdjia, S.; Kaynar, Ü.H.; Ayvacikli, M. et al.: Preparation and cathodoluminescence characteristics of rare earth activated BaAl_2O_4 phosphors. In: *Applied radiation and isotopes: including data, instrumentation and methods for use in agriculture, industry and medicine*, Vol. 139 (2018), pp. 34-39.
- [76] Ziyauddin, M.; Tigga, S.; Brahme, N. et al.: Photoluminescence and thermoluminescence studies of $\text{CaAl}_2\text{O}_4:\text{Dy}^{3+}$ phosphor. In: *Luminescence*, Vol. 31 (2016), Iss. 1, pp. 76-80.
- [77] Zhai, B.; Ma, Q.; Xiong, R. et al.: Blue-green afterglow of $\text{BaAl}_2\text{O}_4:\text{Dy}^{3+}$ phosphors. In: *Materials Research Bulletin* 75 (2016), S. 1-6.
- [78] Ropp, R.C.: Group 13 (B, Al, Ga, In and Tl) Alkaline Earth Compounds. In: Ropp, R.C. (Hrsg.): *Encyclopedia of the Alkaline Earth Compounds*. Elsevier, 2013, S. 481-635.
- [79] Fedorov, P.P.; Kokh, A.E.; Kononova, N.G.: Barium borate $\beta\text{-BaB}_2\text{O}_4$ as a material for nonlinear optics. In: *Russian Chemical Reviews* 71 (2002), Heft 8, S. 651-671.

- [80] Babeela, C.; Girisun, T.C.; Vinitha, G.: Optical limiting behavior of β -BaB₂O₄ nanoparticles in pulsed and continuous wave regime. In: *Journal of Physics D: Applied Physics* 48 (2015), Heft 6, S. 65102.
- [81] Berezovskaya, I.V.; Efrushina, N.P.; Voloshinovskii, A.S. et al.: Luminescence and thermoluminescence of alkaline earth metaborates. In: *Radiation Measurements* 42 (2007), 4-5, S. 878-881.
- [82] Carlson, E.T.: The system: CaO-B₂O₃. In: *Bureau of Standards Journal of Research* 9 (1932), Heft 6, S. 825-832.
- [83] Chen, C.; Wu, Y.; Li, R.: The development of new NLO crystals in the borate series. In: *Journal of Crystal Growth* 99 (1990), 1-4, S. 790-798.
- [84] Dotsenko, V.P.; Berezovskaya, I.V.; Efrushina, N.P. et al.: Position of the optical absorption edge of alkaline earth borates. In: *Optical Materials* 31 (2009), Heft 10, S. 1428-1433.
- [85] Yiannopoulos, Y.D.; Chryssikos, G.D.; Kamitsos, E.I.: Structure and properties of alkaline earth borate glasses. In: *Phys. Chem. Glasses* 42 (2001), Heft 3, S. 164-172.
- [86] Xue, D.F.; Zhang, S.Y.: Structure and Non-linear Optical Properties of β -Barium Borate.
- [87] Zou, W.G.; Lü, M.; Gu, F. et al.: Luminescence properties of Eu³⁺ and Dy³⁺ doped β -BaB₂O₄ nanocrystals. In: *Optical Materials* 28 (2006), 8-9, S. 988-991.
- [88] Zheng, J.; Ying, L.; Cheng, Q. et al.: Blue-emitting SrB₂O₄:Eu²⁺ phosphor with high color purity for near-UV white light-emitting diodes. In: *Materials Research Bulletin* 64 (2015), S. 51-54.
- [89] Liu, J.; Wang, X.-D.; Wu, Z.-C. et al.: Preparation, characterization and photoluminescence properties of BaB₂O₄: Eu³⁺ red phosphor. In: *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, Vol. 79 (2011), Iss. 5, pp. 1520-1523.
- [90] Fujimoto, Y.; Yanagida, T.; Kawaguchi, N. et al.: Characterizations of Ce³⁺-Doped CaB₂O₄ Crystalline Scintillator. In: *Crystal Growth & Design* 12 (2012), Heft 1, S. 142-146.
- [91] Pekgözlü, İ.; Karabulut, H.: Synthesis and photoluminescence of Pb²⁺ doped SrB₂O₄. In: *Inorganic Materials* 45 (2009), Heft 1, S. 61-64.
- [92] Xiangzhong, C.; Weidong, Z.; Xiyang, Z. et al.: Red Emitting Phosphor (Y, Gd)BO₃:Eu³⁺ for PDP Prepared by Complex Method. In: *Journal of Rare Earths* 24 (2006), Heft 1, S. 149-152.
- [93] Marezio, M.; Remeika, J.P.; Dernier, P.D.: The crystal structure of the high-pressure phase CaB₂O₄(IV), and polymorphism in CaB₂O₄.
- [94] Marezio, M.; Plettinger, H.A.; Zachariassen, W.H.: Refinement of the calcium metaborate structure. In: *Acta Crystallographica* 16 (1963), Heft 5, S. 390-392.
- [95] Mighell, A.D.; Perloff, A.; Block, S.: The crystal structure of the high temperature form of barium borate, BaO.B₂O₃. In: *Acta Crystallographica* 20 (1966), Heft 6, S. 819-823.
- [96] Wan, S.; Zhang, X.; Zhao, S. et al.: Growth units and growth habit of α -BaB₂O₄ crystal. In: *Journal of Applied Crystallography* 40 (2007), Heft 4, S. 725-729.
- [97] Fröhlich, R.: Crystal structure of the low-temperature form of BaB₂O₄. In: *Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials* 168 (1984), 1-4.
- [98] Kim, J.B.; Lee, K.S.; Suh, I.H. et al.: Strontium Metaborate, SrB₂O₄. In: *Acta crystallographica Section C: Crystal structure communications* 52 (1996), Heft 3, S. 498-500.
- [99] Rulmont, A.; Almou, M.: Vibrational spectra of metaborates with infinite chain structure: LiBO₂, CaB₂O₄, SrB₂O₄. In: *Spectrochimica Acta Part A: Molecular Spectroscopy* 45 (1989), Heft 5, S. 603-610.

- [100] Kobayashi, S.; Ando, T.; Kanayama, A. et al.: Calciborite from the Fuka mine, Okayama Prefecture, Japan. In: *Journal of Mineralogical and Petrological Sciences* 109 (2014), Heft 1, S. 13-17.
- [101] Huang, H.-S.; Liu, Z.-H.: Enhanced photoluminescence property of $\text{CaB}_2\text{O}_4:\text{Eu}^{3+}$ phosphor prepared by calcining the $\text{Ca}_4\text{B}_{10}\text{O}_{19}\cdot 7\text{H}_2\text{O}:\text{Eu}^{3+}$ precursor. In: *Materials Research Bulletin* 49 (2014), S. 88-93.
- [102] Weir, C.E.; Schroeder, R.A.: Infrared spectra of the crystalline inorganic borates. In: *Journal of Research of the National Bureau of Standards A.* (1964), Heft 68, S. 465-487.
- [103] Filatov, S.K.; Nikolaeva, N.V.; Bubnova, R.S. et al.: Thermal expansion of $\beta\text{-BaB}_2\text{O}_4$ and BaB_4O_7 borates. In: *Glass Physics and Chemistry* 32 (2006), Heft 4, S. 471-478.
- [104] Eimerl, D.; Davis, L.; Velsko, S. et al.: Optical, mechanical, and thermal properties of barium borate. In: *Journal of Applied Physics* 62 (1987), Heft 5, S. 1968-1983.
- [105] Nikogosyan, D.N.: Beta barium borate (BBO). In: *Applied Physics A Solids and Surfaces* 52 (1991), Heft 6, S. 359-368.
- [106] Zhang, J.; Liang, S.; He, G.: Preparation and Structure Characterization of $\beta\text{-BaB}_2\text{O}_4$ Nanowires. In: *Chemistry Letters* 38 (2009), Heft 5, S. 500-501.
- [107] Zhang, Y.; Lu, C.; Sun, L. et al.: Influence of Sm_2O_3 on the crystallization and luminescence properties of boroaluminosilicate glasses. In: *Materials Research Bulletin* 44 (2009), Heft 1, S. 179-183.
- [108] Liao, J.; Liu, L.; You, H. et al.: Hydrothermal preparation and luminescence property of $\text{MWO}_4:\text{Sm}^{3+}$ (M = Ca, Sr, Ba) red phosphors. In: *Optik* 123 (2012), Heft 10, S. 901-905.
- [109] Liu, X.; Xiang, W.; Chen, F. et al.: Synthesis and photoluminescence characteristics of Dy^{3+} doped $\text{NaY}(\text{WO}_4)_2$ phosphors. In: *Materials Research Bulletin* 48 (2013), Heft 2, S. 281-285.
- [110] Komatsu, T.; Honma, T.: Nucleation and Crystal Growth in Laser-Patterned Lines in Glasses. In: *Frontiers in Materials*, Vol. 3 (2016), p. 32.
- [111] Pei, Z.; Su, Q.; Li, S.: Investigation on the luminescence properties of Dy^{3+} and Eu^{3+} in alkaline-earth borates. In: *Journal of Luminescence* 50 (1991), Heft 2, S. 123-126.
- [112] Remya, M.P.; Saritha, K.J.; Anns, G. et al.: Synthesis and photoluminescence characteristics of near white light emitting $\text{CaB}_2\text{O}_4:\text{Dy}^{3+}, \text{Li}^+$ phosphor. In: *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 119 (2018), S. 166-174.
- [113] Müller-Buschbaum, H.; Schnering, H.G.: Zur Kenntnis des CaSc_2O_4 . In: *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie* 336 (1965), 5-6, S. 295-305.
- [114] Müller-Buschbaum, H.: Zur Kenntnis von SrY_2O_4 . In: *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie* 358 (1968), 3-4, S. 138-146.
- [115] Müller-Buschbaum, H.; von Schenck, R.: Untersuchungen an SrYb_2O_4 , CaYb_2O_4 und CaLu_2O_4 ; ein Beitrag zur Kristallstruktur des Calciumferrat(III)-Typs. In: *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie* 377 (1970), Heft 1, S. 70-78.
- [116] Lopato, L.M.: Highly refractory oxide systems containing oxides of rare-earth elements. In: *Ceramurgia International* 2 (1976), Heft 1, S. 18-32.
- [117] Mitamura, T.; Ogino, H.; Kobayashi, H. et al.: Influence of Metal Ions on the Order-Disorder Transition Temperature of the Ba-M-O (M: La, Y, In, or Ga) System. In: *Journal of the American Ceramic Society*, Vol. 76 (1993), Iss. 8, pp. 2127-2128.
- [118] Wong-Ng, W.; Cook, L.; Suh, J. et al.: $\text{BaO-Nd}_2\text{O}_3\text{-CuO}_x$ subsolidus equilibria under carbonate-free conditions at $p\text{O}_2=100$ Pa and at $p\text{O}_2=21$ kPa. In: *Journal of Solid State Chemistry* 173 (2003), Heft 2, S. 476-488.
- [119] Arul Antony, S.; Nagaraja, K.; Reddy, G. et al.: A polymeric gel cum auto combustion method for the lower temperature synthesis of SrR_2O_4 (R = Y, La, Sm, Eu, Gd, Er or Yb). In: *Materials Letters* 51 (2001), Heft 5, S. 414-419.

- [120] Han, C.; Chen, X.; Liang, J. et al.: The ternary system $\text{Tm}_2\text{O}_3\text{-SrO-CuO}$: compounds and phase relations. In: *Journal of Alloys and Compounds* 309 (2000), 1-2, S. 95-99.
- [121] Zhou, L.; Shi, J.; Gong, M.: Preparation of $\text{SrR}_2\text{O}_4:\text{Eu}^{3+}$ (R = Y, Lu) phosphor and its photoluminescence properties. In: *Materials Letters* 59 (2005), Heft 16, S. 2079-2084.
- [122] Fu, Z.; Zhou, S.; Yu, Y. et al.: Photoluminescence properties and analysis of spectral structure of Eu^{3+} -doped SrY_2O_4 . In: *The Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 109 (2005), Iss. 49, pp. 23320-23325.
- [123] Zhou, L.; Shi, J.; Gong, M.: Synthesis and luminescent properties of phosphor. In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 68 (2007), Heft 8, S. 1471-1475.
- [124] Zhou, L.; Shi, J.; Gong, M.: Red phosphor $\text{SrY}_2\text{O}_4:\text{Eu}^{3+}$ synthesized by the sol-gel method. In: *Journal of Luminescence* 113 (2005), 3-4, S. 285-290.
- [125] Fu, Z.; Yang, H.K.; Jeong, J.H. et al.: Band Structure Calculations on Orthorhombic Bulk and Nanocrystalline SrY_2O_4 . In: *Journal of the Korean Physical Society*, Vol. 52 (2008), Iss. 3, pp. 635-638.
- [126] Xu, W.; Jia, W.; Revira, I. et al.: Optical Properties of Multiple Sites of Eu^{3+} in SrY_2O_4 Single-Crystal Fibers. In: *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 148 (2001), Iss. 12, H176.
- [127] Manivannan, V.; Comanzo, H.A.; Setlur, A.A. et al.: Nature of luminescent centers in Cerium-activated materials with the CaFe_2O_4 structure. In: *Journal of Luminescence* 102-103 (2003), S. 635-637.
- [128] Kobayashi, H.; Ogino, H.; Nakamura, K. et al.: Order-Disorder Transition of BaM_2O_4 Bodies (M: La, Nd, Sm, Gd, Ho or Y) Synthesized by Sintering of $\text{BaCO}_3\text{-M}_2\text{O}_3$ Mixtures. In: *Journal of the Ceramic Society of Japan* 102 (1994), Heft 1186, S. 583-586.
- [129] Karunadasa, H.; Huang, Q.; Ueland, B.G. et al.: Honeycombs of triangles and magnetic frustration in SrL_2O_4 (L = Gd, Dy, Ho, Er, Tm, and Yb). In: *Physical Review B* 71 (2005), Heft 14, S. 21.
- [130] Doi, Y.; Nakamori, W.; Hinatsu, Y.: Crystal structures and magnetic properties of magnetically frustrated systems BaLn_2O_4 and $\text{Ba}_3\text{Ln}_4\text{O}_9$ (Ln = lanthanide). In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 18 (2006), Heft 1, S. 333-344.
- [131] Besara, T.; Lundberg, M.S.; Sun, J. et al.: Single crystal synthesis and magnetism of the BaLn_2O_4 family (Ln = lanthanide). In: *Progress in Solid State Chemistry* 42 (2014), Heft 3, S. 23-36.
- [132] Dang, P.; Liang, S.; Li, G. et al.: Controllable optical tuning and improvement in $\text{Li}^+, \text{Eu}^{3+}$ -codoped $\text{BaSc}_2\text{O}_4:\text{Bi}^{3+}$ based on energy transfer and charge compensation. In: *Journal of Materials Chemistry C* 6 (2018), Heft 24, S. 6449-6459.
- [133] Hao, Z.; Zhang, J.; Zhang, X. et al.: Blue-Green-Emitting Phosphor $\text{CaSc}_2\text{O}_4:\text{Tb}^{3+}$: Tunable Luminescence Manipulated by Cross-Relaxation. In: *Journal of The Electrochemical Society* 156 (2009), Heft 3, H193.
- [134] Dubey, V.; Tiwari, R.; Tamrakar, R.K. et al.: Thermoluminescence and Photoluminescence Study of Erbium Doped CaY_2O_4 Phosphor. In: *Indian Journal of Materials Science* 2015 (2015), S. 1-5.
- [135] Mari, B.; Singh, K.C.; Sahal, M. et al.: Characterization and photoluminescence properties of some $\text{MLn}_{2(1-x)}\text{O}_4:2x\text{Eu}^{3+}$ or $2x\text{Tb}^{3+}$ systems (M = Ba or Sr, Ln = Gd or La). In: *Journal of Luminescence* 131 (2011), Heft 4, S. 587-591.
- [136] Ganguly, R.; Siruguri, V.; Gopalakrishnan, I.K. et al.: Stability of the layered $\text{Sr}_3\text{Ti}_2\text{O}_7$ structure in $\text{La}_{1.2}(\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x)_{1.8}\text{Mn}_2\text{O}_7$. In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 12 (2000), Heft 8, S. 1683-1689.
- [137] Müller-Buschbaum, H.; Schnering, H.G.V.: Zur Struktur der A-Form der Sesquioxide der Seltenen Erden. *Strukturuntersuchungen an La_2O_3* . In: *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie* 340 (1965), 5-6, S. 232-245.

- [138] Saiki, A.; Ishizawa, N.; Mizutani, N. et al.: Structural Change of C-Rare Earth Sesquioxides Yb_2O_3 and Er_2O_3 as a Function of Temperature. In: Journal of the Ceramic Association, Japan 93 (1985), Heft 1082, S. 649-654.
- [139] Yakel, H.L.: A refinement of the crystal structure of monoclinic europium sesquioxide. In: Acta Crystallographica Section B: Structural Crystallography and Crystal Chemistry 35 (1979), Heft 3, S. 564-569.
- [140] Gaume, R.; Viana, B.; Derouet, J. et al.: Spectroscopic properties of Yb-doped scandium based compounds $\text{Yb:CaSc}_2\text{O}_4$, $\text{Yb:SrSc}_2\text{O}_4$ and $\text{Yb:Sc}_2\text{SiO}_5$. In: Optical Materials 22 (2003), Heft 2, S. 107-115.
- [141] Jarosch, D.; Heger, G.: Neutron diffraction investigation of strontianite, SrCO_3 . In: Bulletin de Minéralogie 111 (1988), Heft 2, S. 139-142.
- [142] Gobichon, A.-E.; Auffrédic, J.-P.; Louër, D.: Thermal decomposition of neutral and basic lanthanum nitrates studied with temperature-dependent powder diffraction and thermogravimetric analysis. In: Solid State Ionics 93 (1996), Heft 1, S. 51-64.
- [143] Verbraeken, M.C.; Suard, E.; Irvine, J.T.S.: Structural and electrical properties of calcium and strontium hydrides. In: Journal of Materials Chemistry, Vol. 19 (2009), Iss. 18, p. 2766.
- [144] Koehler, W.C.; Wollan, E.O.: Neutron-diffraction study of the structure of the A-form of the rare earth sesquioxides. In: Acta Crystallographica 6 (1953), Heft 8, S. 741-742.
- [145] Saiki, A.; Ishizawa, N.; Mizutani, N. et al.: Structural Change of C-Rare Earth Sesquioxides Yb_2O_3 and Er_2O_3 as a Function of Temperature. In: Journal of the Ceramic Association, Japan 93 (1985), Heft 1082, S. 649-654.
- [146] Grueninger, H.W.; Bringhausen, H.: Die Kristallstruktur von Strontiumhydroxid $\text{Sr}(\text{OH})_2$. In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie 368 (1969), 1-2, S. 53-61.
- [147] Rau, R.C.: The crystal structure of Eu_3O_4 . In: Acta Crystallographica 20 (1966), Heft 6, S. 716-723.
- [148] Bärnighausen, H.; Brauer, G.: Ein neues Europiumoxid Eu_3O_4 und die isotype Verbindung Eu_2SrO_4 . In: Acta Crystallographica 15 (1962), Heft 10, S. 1059.
- [149] Fu, S.; Dai, J.; Yin, T. et al.: Synthesis and spectral properties of a new europium strontium oxide SrEu_2O_4 . In: Guang pu xue yu guang pu fen xi = Guang pu 26 (2006), Heft 6, S. 1113-1116.
- [150] Chaker, H.; Kabadou, A.; Toumi, M. et al.: Rietveld refinement of the gadolinium strontium oxide SrGd_2O_4 . In: Powder Diffraction 18 (2003), Heft 4, S. 288-292.
- [151] Carter, J.R.; Feigelson, R.S.: Preparation and Crystallographic Properties of $\text{A}^{2+}\text{B}_2^{3+}\text{O}_4$, Type Calcium and Strontium Scandates. In: Journal of the American Ceramic Society 47 (1964), Heft 3, S. 141-144.
- [152] Young, O.; Balakrishnan, G.; Lees, M.R. et al.: Magnetic properties of geometrically frustrated SrGd_2O_4 . In: Physical Review B 90 (2014), Heft 9, S. 94421.
- [153] Müller, M.; Volhard, M.-F.; Jüstel, T.: Photoluminescence and afterglow of deep red emitting $\text{SrSc}_2\text{O}_4:\text{Eu}^{2+}$. In: RSC Advances 6 (2016), Heft 10, S. 8483-8488.
- [154] Horyn, R.; Lukaszewicz, K.: Refinement of the Crystal Structure of CaCs_2O_4 . In: Bulletin de l'Academie Polonaise des Sciences 14 (1966), S. 499-504.
- [155] Hodorowicz, E.; Hodorowicz, S.A.; Eick, H.A.: Phases observed at 900 - 1100°C in the binary Ln-Ba-O systems for Ln = Dy, Ho, Er, Tm, and Yb. In: Journal of Solid State Chemistry 84 (1990), Heft 2, S. 401-407.
- [156] Müller-Buschbaum, H.; Schrandt, O.: Zur Kristallstruktur von $\text{Ba}_3\text{Ln}_4\text{O}_9$ (Ln = Dy, Er, Y/Yb). In: Journal of Alloys and Compounds 191 (1993), Heft 1, S. 151-154.
- [157] Schleid, T.; Meyer, G.: Single crystals of rare earth oxides from reducing halide melts. In: Journal of the Less Common Metals 149 (1989), S. 73-80.

- [158] Agafonov, V.; Kahn, A.; Michel, D. et al.: Crystal structure of BaSc₂O₄; its relation with perovskite. In: *Materials Research Bulletin* 18 (1983), Heft 8, S. 975-981.
- [159] Min, X.; Huang, Z.; Fang, M. et al.: Energy transfer from Sm³⁺ to Eu³⁺ in red-emitting phosphor LaMgAl₁₁O₁₉:Sm³⁺, Eu³⁺ for solar cells and near-ultraviolet white light-emitting diodes. In: *Inorganic chemistry*, Vol. 53 (2014), Iss. 12, pp. 6060-6065.
- [160] Brito, S.L.; Lodi, T.A.; Muniz, R.F. et al.: Energy transfer investigation of Sm³⁺/Eu³⁺ CaBAI glasses. In: *Journal of Luminescence* 219 (2020), S. 116947.
- [161] Lin, H.; Yang, D.; Liu, G. et al.: Optical absorption and photoluminescence in Sm³⁺- and Eu³⁺-doped rare-earth borate glasses. In: *Journal of Luminescence* 113 (2005), 1-2, S. 121-128.
- [162] Wu, X.; Jiao, Y.; Ren, Q. et al.: Photoluminescence and energy transfer in Sr₃La(BO₃)₃:Ce, Sm and Sr₂TiO₄:Sm, Eu phosphors. In: *Optics & Laser Technology* 108 (2018), S. 456-465.
- [163] Yadav, R.S.; Dwivedi, Y.; Rai, S.B.: Structural and optical properties of Eu³⁺, Sm³⁺ codoped La(OH)₃ nano-crystalline red emitting phosphor. In: *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, Vol. 132 (2014), pp. 599-603.
- [164] Zhong, J.; Zhao, W.; Lan, L. et al.: Hydrothermal synthesis and luminescence properties of Eu³⁺ and Sm³⁺ codoped BiPO₄. In: *Journal of Rare Earths* 32 (2014), Heft 1, S. 5-11.
- [165] Guan, H.; Song, Y.; Ma, P. et al.: Magnetic-downconversion luminescent bifunctional BaGdF₅:Dy³⁺, Eu³⁺ nanospheres: energy transfer, multicolor luminescence and paramagnetic properties. In: *RSC Advances*, Vol. 6 (2016), Iss. 58, pp. 53444-53453.
- [166] Opravil, T.; Ptáček, P.; Šoukal, F. et al.: Solid-state synthesis of SrY₂O₄ and SrSm₂O₄. In: *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 123 (2016), Heft 1, S. 181-194.
- [167] Shimomura, Y.; Kurushima, T.; Kijima, N.: Photoluminescence and Crystal Structure of Green-Emitting Phosphor CaSc₂O₄:Ce³⁺. In: *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie* 154 (2007), Heft 8, J234.
- [168] Fava, J.; Le Flem, G.: Les phases SrLa₂Al₂O₇ et SrGd₂Al₂O₇. In: *Materials Research Bulletin* 10 (1975), Heft 2, S. 75-80.
- [169] Smirnov, Y.E.; Zvereva, I.A.: Short-range ordering of cations in complex oxides LnSrAlO₄ (Ln = La, Nd, Sm, Eu). In: *Vestnik Sankt-Peterburgskogo Universiteta, Seriya 4: Fizika, Khimiya* (2005), Heft 3, S. 34-42.
- [170] Fava, J.; Oudalov, Y.P.; Reau, J.M. et al.: Sur une nouvelle famille d'alluminates double de strontium ou d'europium divalent et de terres rares. In: *CR Seances Acad. Sci., Ser. C* 274 (1972), S. 1837-1839.
- [171] Ruddlesden, S.N.; Popper, P.: New compounds of the K₂NiF₄ type. In: *Acta Crystallographica* 10 (1957), Heft 8, S. 538-539.
- [172] Sobolewski, R.; Gierlowski, P.; Kula, W. et al.: High-T/sub c/ thin films on low microwave loss alkaline-rare-earth-aluminate crystals. In: *IEEE Transactions on Magnetics* 27 (1991), Heft 2, S. 876-879.
- [173] Brown, R.; Pendrick, V.; Kalokitis, D. et al.: Low-loss substrate for microwave application of high-temperature superconductor films. In: *Applied Physics Letters* 57 (1990), Heft 13, S. 1351-1353.
- [174] Pajaczkowska, A.; Gloubokov, A.: Synthesis, growth and characterization of tetragonal ABCO₄ crystals. In: *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials* 36 (1998), 1-2, S. 123-162.
- [175] Fan, X.C.; Chen, X.M.; Liu, X.Q.: Structural Dependence of Microwave Dielectric Properties of SrRAlO₄ (R = Sm, Nd, La) Ceramics: Crystal Structure Refinement and Infrared Reflectivity Study. In: *Chemistry of Materials* 20 (2008), Heft 12, S. 4092-4098.
- [176] Chen, X.M.; Xiao, Y.; Liu, X.Q. et al.: SrLnAlO₄ (Ln = Nd and Sm) Microwave Dielectric Ceramics. In: *Journal of Electroceramics* 10 (2003), Heft 2, S. 111-115.

- [177] Liu, X.Q.; Chen, X.M.; Xiao, Y.: Preparation and characterization of LaSrAlO₄ microwave dielectric ceramics. In: *Materials Science and Engineering: B* 103 (2003), Heft 3, S. 276-280.
- [178] Shannon, R.D.; Oswald, R.A.; Parise, J.B. et al.: Dielectric constants and crystal structures of CaYAlO₄, CaNdAlO₄, and SrLaAlO₄, and deviations from the oxide additivity rule. In: *Journal of Solid State Chemistry* 98 (1992), Heft 1, S. 90-98.
- [179] Berkowski, M.: SrLaGaO₄-SrLaAlO₄ solid solutions: new promising substrate materials for HTSc, Heft 251,, 1997.
- [180] Smirnov, Y.E.; Zvereva, I.A.: Cation Distribution and Interatomic Interactions in Oxides with Heterovalent Isomorphism: III. Complex Aluminates LnCaAlO₄ (Ln = Y, La, Nd, Gd, Ho, Er, Yb). In: *Russian Journal of General Chemistry* 71 (2001), Heft 6, S. 845-852.
- [181] Vasylechko, L.; Kodama, N.; Matkovskii, A. et al.: Crystal structure and optical spectroscopy of CaGdAlO₄:Er single crystal. In: *Journal of Alloys and Compounds* 300-301 (2000), S. 475-478.
- [182] Kadyan, S.; Singh, S.; Simantilleke, A. et al.: Rapid-gel combustion synthesis, structure and luminescence investigations of trivalent europium doped MGdAlO₄ (M = Mg²⁺, Ca²⁺, Sr²⁺ and Ba²⁺) nanophosphors (2020).
- [183] Di, J.Q.; Xu, X.D.; Xia, C.T. et al.: Crystal growth, polarized spectra, and laser performance of Yb:CaGdAlO₄ crystal. In: *Laser Physics* 26 (2016), Heft 4, S. 45803.
- [184] Geng, D.; Li, G.; Shang, M. et al.: Nanocrystalline CaYAlO₄:Tb³⁺/Eu³⁺ as promising phosphors for full-color field emission displays. In: *Dalton Transactions*, Vol. 41 (2012), Iss. 10, pp. 3078-3086.
- [185] Mosses, R.; Wells, J.-P.; Gallagher, H. et al.: Czochralski growth and IR-to-visible upconversion of Ho³⁺- and Er³⁺-doped SrLaAlO₄. In: *Chemical Physics Letters* 286 (1998), 3-4, S. 291-297.
- [186] Mendhe, M.S.; Puppalwar, S.P.; Dhoble, S.J.: Novel single-component CaLaAlO₄:Tb³⁺, Eu³⁺ phosphor for white light-emission. In: *Optical Materials* 82 (2018), S. 47-55.
- [187] Howard, C.J.; Kennedy, B.J.; Chakoumakos, B.C.: Neutron powder diffraction study of rhombohedral rare-earth aluminates and the rhombohedral to cubic phase transition. In: *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 12 (2000), Iss. 4, pp. 349-365.
- [188] Müller-Buschbaum, H.; Lehmann, U.: Zum Problem der Oktaederstreckung an La₂CuO₄, La₂NiO₄ mit einem Beitrag über CaSmAlO₄. In: *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie* 447 (1978), Heft 1, S. 47-52.
- [189] Wang, C.-H.; Guo, D.-F.; Li, Z.-F. et al.: Crystal structure of Sr₆Y₂Al₄O₁₅: XRD refinements and first-principle calculations. In: *Journal of Solid State Chemistry* 192 (2012), S. 195-200.
- [190] Antic, B.; Önnnerud, P.; Rodic, D. et al.: The structure characteristics of the diluted magnetic semiconductor Y_{2-x}Dy_xO₃. In: *Powder Diffraction* 8 (1993), Heft 4, S. 216-220.
- [191] Fotiev, V.A.; Berezovskaya, I.V.; Efryushina, N.P. et al.: ChemInform Abstract: Novel Phases in the Systems Based on the Oxides of Strontium, Aluminum and Rare Earth Elements. In: *ChemInform*, Vol. 20 (1989), Iss. 47.
- [192] Azhagiri, A.; Ponnusamy, V.; Satheesh Kumar, R.: A development of new red phosphor based on europium doped as well as substituted Barium Lanthanum Aluminate (BaLaAlO₄: Eu³⁺). In: *Optical Materials* 90 (2019), S. 127-138.
- [193] Ryba-Romanowski, W.; Gołąb, S.; Pisarski, W.A. et al.: Optical characterization of BaLaAlO₄:Nd. In: *Journal of Alloys and Compounds* 259 (1997), 1-2, S. 69-73.
- [194] Do Dinh, C.; Lewy-Bertaut, E.F.: Paramètres atomiques de BaAl₂O₄ et études des solutions solides BaFe_xAl_{2-x}O₄ et BaGa_xAl_{2-x}O₄. In: *Bulletin de Minéralogie* 88 (1965), Heft 3, S. 413-416.

- [195] Bartos, A.; Lieb, K.P.; Uhrmacher, M. et al.: Refinement of atomic positions in bixbyite oxides using perturbed angular correlation spectroscopy. In: *Acta Crystallographica Section B: Structural Science* 49 (1993), Heft 2, S. 165-169.
- [196] Kovba, L.M.; Lykova, L.N.; Balashov, V.L.: New Compound in the Barium Oxide-Lanthanum Oxide (La_2O_3)-Tungsten Trioxide System. In: *Chemischer Informationsdienst* 16 (1985), Heft 20.
- [197] Rodriguez-Liviano, S.; Becerro, A.I.; Alcántara, D. et al.: Synthesis and properties of multifunctional tetragonal $\text{Eu}:\text{GdPO}_4$ nanocubes for optical and magnetic resonance imaging applications. In: *Inorganic chemistry*, Vol. 52 (2013), Iss. 2, pp. 647-654.
- [198] Vidya, Y.S.; Anantharaju, K.S.; Nagabhushana, H. et al.: Combustion synthesized tetragonal $\text{ZrO}_2:\text{Eu}^{3+}$ nanophosphors: structural and photoluminescence studies. In: *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, Vol. 135 (2015), pp. 241-251.
- [199] Liao, J.; Zhou, D.; Yang, B. et al.: Sol-gel preparation and photoluminescence properties of tetragonal $\text{ZrO}_2:\text{Y}^{3+}, \text{Eu}^{3+}$ nanophosphors. In: *Optical Materials* 35 (2012), Heft 2, S. 274-279.
- [200] Zhou, Y.; Lin, J.; Wang, S.: Energy transfer and upconversion luminescence properties of $\text{Y}_2\text{O}_3:\text{Sm}$ and $\text{Gd}_2\text{O}_3:\text{Sm}$ phosphors. In: *Journal of Solid State Chemistry* 171 (2003), 1-2, S. 391-395.
- [201] Li, X.; Yang, Z.; Guan, L. et al.: Fabrication and luminescence properties of red emitting phosphor $\text{Y}_2\text{O}_2\text{S}:\text{Sm}^{3+}$ for white LED by combustion method. In: *Journal of Alloys and Compounds* 464 (2008), 1-2, S. 565-568.
- [202] Xiao, Y.; Cheng, X.; Liu, X.: Stability and microwave dielectric characteristics of $(\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{LaAlO}_4$ ceramics (2007).
- [203] Singh, S.; Kadyan, S.; Sheoran, S. et al.: Synthesis and optical investigations of Eu^{3+} activated MYAlO_4 ($\text{M} = \text{Ca}$ and Sr) as promising display nanomaterials. In: *Optik* 208 (2020), S. 164552.
- [204] Saidu, A.; Wagiran, H.; Saeed, M.A. et al.: Thermoluminescence response of rare earth activated zinc lithium borate glass. In: *Radiation Physics and Chemistry* 144 (2018), S. 413-418.
- [205] Xu, J.-L.; Tu, C.-Y.; Wang, Y. et al.: Multi-wavelength continuous-wave laser operation of $\text{Yb}:\text{Ca}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$ disordered crystal. In: *Optical Materials* 33 (2011), Heft 11, S. 1766-1769.
- [206] Mill, B.V.; Tkachuk, A.M.; Belokoneva, E.L. et al.: Growth, structure, and intensities of spectra of $\text{Ln}_2\text{Ca}_3\text{B}_4\text{O}_{12}:\text{Nd}^{3+}$ crystals ($\text{Ln} = \text{Y}, \text{La}, \text{Gd}$). In: *Optics and Spectroscopy* 84 (1998), Heft 1, S. 65-72.
- [207] Wei, B.; Hu, Z.; Lin, Z. et al.: Growth and spectral properties of $\text{Er}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ -codoped $\text{Ca}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$ crystal. In: *Journal of Crystal Growth* 273 (2004), 1-2, S. 190-194.
- [208] Gaumé, R.; Haumesser, P.-H.; Antic-Fidancev, E. et al.: Crystal field calculations of Yb^{3+} -doped double borate crystals for laser applications. In: *Journal of Alloys and Compounds* 341 (2002), 1-2, S. 160-164.
- [209] Brenier, A.; Tu, C.; Wang, Y. et al.: Diode-pumped laser operation of Yb^{3+} -doped $\text{Y}_2\text{Ca}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ crystal. In: *Journal of Applied Physics*, Vol. 104 (2008), Iss. 1, p. 13102.
- [210] Gudzenko, L.; Kosmyna, M.; Shekhovtsov, A. et al.: Crystal Growth and Glass-Like Thermal Conductivity of $\text{Ca}_3\text{RE}_2(\text{BO}_3)_4$ ($\text{RE} = \text{Y}, \text{Gd}, \text{Nd}$) Single Crystals. In: *Crystals* 7 (2017), Heft 3, S. 88.
- [211] Gao, S.F.; Lv, S.Z.; Zhu, Z.J. et al.: Polarized spectral properties and potential application of large-size $\text{Nd}^{3+}:\text{Ba}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$ crystal. In: *Laser Physics*, Vol. 24 (2014), Iss. 6, p. 65701.

- [212] Dzhurinskii, B.F.; Tananev, I.V.; Aliev, O.A.: Synthesis of single crystals of double borates in the system $\text{Ln}_2\text{O}_3\text{-SrO-B}_2\text{O}_3$. In: *Inorganic Materials* 4 (1968), S. 1972-1974.
- [213] Bambauer, H.U.; Kindermann, B.: Darstellung und kristallographische Daten von Orthoboraten $(\text{SE})_2\text{Ca}_3[\text{BO}_3]_4$. In: *Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials* 147 (1978), 1-4.
- [214] Bambauer, H.U.; Khodaverdi, A.; Kindermann, B. et al.: Synthese und kristallographische Daten von $\text{Yb}_2\text{Ca}_3[\text{BO}_3]_4$. In: *Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials* 146 (1977), 1-3, S. 1075.
- [215] Abdullaev, G.K.; Mamedov, K.S.: Crystal structure of the binary orthoborate of erbium and strontium, $\text{Er}_2\text{Sr}_3(\text{BO}_3)_4$. In: *Journal of Structural Chemistry* 17 (1976), Heft 1, S. 166-168.
- [216] Abdullaev, G.K.; Mamedov, K.S.: Crystal structure of $\text{Nd}_2\text{Sr}_3(\text{BO}_3)_4$. In: *Journal of Structural Chemistry* 15 (1974), Heft 1, S. 145-147.
- [217] Abdullaev, G.K.; Mamedov, K.S.; Amirov, S.T.: Crystal structure of $\text{La}_2\text{Sr}_3(\text{BO}_3)_4$. In: *Kristallografiya* 18 (1973), Heft 5, S. 1075-1077.
- [218] Palkina, K.K.; Kuznetsov, V.G.; Moruga, L.G.: Crystal structure of $\text{Pr}_2\text{Sr}_3(\text{BO}_3)_4$. In: *Zhurnal Strukturnoj Khimii* 14 (1973), Heft 6, S. 1053-1057.
- [219] Zhang, Y.; Lin, Z.; Zhang, L. et al.: Growth and optical properties of Yb^{3+} -doped $\text{Sr}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$ crystal. In: *Optical Materials* 29 (2007), Heft 5, S. 543-546.
- [220] Yan, J.F.; Hong, H.-P.: Crystal structure of a new mini-laser material, $\text{Nd}_2\text{Ba}_3(\text{BO}_3)_4$. In: *Materials Research Bulletin* 22 (1987), Heft 10, S. 1347-1353.
- [221] Zhang, Y.; Li, Y.: Red photoluminescence and crystal structure of $\text{Sr}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$. In: *Journal of Alloys and Compounds* 384 (2004), 1-2, S. 88-92.
- [222] Fu-Lin, L.; Jian-Hua, H.; Xing-Hong, G. et al.: Growth and structure of $\text{Sr}_3\text{Yb}_2(\text{BO}_3)_4$ Crystal. In: *Jiegou Huaxue* 32 (2013), S. 434-438.
- [223] Dobretsova, E.A.; Borovikova, E.Y.; Boldyrev, K.N. et al.: IR spectroscopy of rare-earth aluminum borates $\text{RAl}_3(\text{BO}_3)_4$ ($\text{R} = \text{Y}, \text{Pr-Yb}$). In: *Optics and Spectroscopy* 116 (2014), Heft 1, S. 77-83.
- [224] Lixia, Z.; Tao, Y.; Jiang, W. et al.: FT-IR and Raman spectroscopic study of hydrated rubidium (cesium) borates and alkali double borates. In: *Russian Journal of Inorganic Chemistry* 52 (2007), Heft 11, S. 1786-1792.
- [225] Jun, L.; Shuping, X.; Shiyang, G.: FT-IR and Raman spectroscopic study of hydrated borates. In: *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 51 (1995), Heft 4, S. 519-532.
- [226] Hamaganova, T.N.; Trunov, V.K.; Dzhurinskii, B.F. et al.: Crystal-structure of $\text{Ba}_3\text{La}(\text{BO}_3)_4$, $\text{Ba}_3\text{Pr}(\text{BO}_3)_4$. In: *Kristallografiya* 35 (1990), S. 856-860.
- [227] Ma, P.; Chen, J.; Hu, Z. et al.: Structure Of $\text{Ba}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$ Crystal. In: *Materials Research Innovations* 9 (2005), Heft 3, S. 63-64.
- [228] Ilyukhin, A.B.; Dzhurinskij, B.F.: Crystal structures of double borates $\text{LnBa}_3(\text{BO}_3)_3$ ($\text{Ln} = \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Tm}, \text{Yb}, \text{Lu}$). In: *Zhurnal Neorganicheskoi Khimii* 38 (1993), Heft 10, S. 1625-1630.
- [229] Filatov, S.K.; Biryukov, Y.P.; Bubnova, R.S. et al.: The novel borate $\text{Lu}_5\text{Ba}_6\text{B}_9\text{O}_{27}$ with a new structure type: synthesis, disordered crystal structure and negative linear thermal expansion. In: *Acta Crystallographica Section B: Structural Science*, Vol. 75 (2019), Pt 4, pp. 697-703.
- [230] Höpfe, H.A.; Kazmierczak, K.; Grumbt, C. et al.: The Oxonitridoborate $\text{Eu}_5(\text{BO}_{2.51(7)}\text{N}_{0.49(7)})_4$ and the Mixed-Valent Borates $\text{Sr}_3\text{Ln}_2(\text{BO}_3)_4$ ($\text{Ln} = \text{Ho}, \text{Er}$). In: *European Journal of Inorganic Chemistry*, Vol. 2013 (2013), Iss. 31, pp. 5443-5449.

- [231] Misra, S.; Miller, G.J.: Gd_{5-x}Y_xTt₄ (Tt = Si or Ge): effect of metal substitution on structure, bonding, and magnetism. In: *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 130 (2008), Iss. 42, pp. 13900-13911.
- [232] Sulich, A.; Domagala, J.Z.; Härtwig, J. et al.: Nature and spatial distribution of extended defects in Czochralski-grown Ca₃RE₂(BO₃)₄ (RE = Y, Gd) orthoborate single crystals. In: *Journal of Physics D: Applied Physics* 52 (2019), Heft 5, S. 55102.
- [233] Erfan, S.; Ravi Kumar, V.; Suresh, G. et al.: Luminescence Studies of Eu Doped AY₂O₄ (A=Ca, Ba) Phosphor. In: *International Journal of Luminescence and Applications* 5 (2015), Heft 2, S. 261-263.
- [234] Li, H.-F.; Wildes, A.; Hou, B. et al.: Magnetization, crystal structure and anisotropic thermal expansion of single-crystal SrEr₂O₄. In: *RSC Advances* 4 (2014), Heft 96, S. 53602-53607.
- [235] Li, H.-F.; Zhang, C.; Senyshyn, A. et al.: Incommensurate antiferromagnetic order in the manifoldly-frustrated SrTb₂O₄ with transition temperature up to 4.28 K. In: *Frontiers in Physics* 2 (2014), Heft 10, S. 599.
- [236] Michler, N.: Einbau von Seltenerdelementen in Erdalkaligallate – Synthese, Charakterisierung und Anwendung. Halle, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Master Thesis, 2018.
- [237] Ramakrishna, G.; Naik, R.; Nagabhushana, H. et al.: White light emission and energy transfer (Dy³⁺ → Eu³⁺) in combustion synthesized YSO: Dy³⁺, Eu³⁺ nanophosphors. In: *Optik* 127 (2016), Heft 5, S. 2939-2945.
- [238] Meza-Rocha, A.N.; Camarillo, I.; Lozada-Morales, R. et al.: Reddish-orange and neutral/warm white light emitting phosphors: Eu³⁺, Dy³⁺ and Dy³⁺/Eu³⁺ in potassium-zinc phosphate glasses. In: *Journal of Luminescence* 183 (2017), S. 341-347.
- [239] Gedekar, K.A.; Wankhede, S.P.; Moharil, S.V. et al.: d-f luminescence of Ce³⁺ and Eu²⁺ ions in BaAl₂O₄, SrAl₂O₄ and CaAl₂O₄ phosphors. In: *Journal of Advanced Ceramics* 6 (2017), Heft 4, S. 341-350.
- [240] Aitasalo, T.; Hölsä, J.; Jungner, H. et al.: Thermoluminescence study of persistent luminescence materials: Eu²⁺- and R³⁺-doped calcium aluminates, CaAl₂O₄:Eu²⁺, R³⁺. In: *The Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 110 (2006), Iss. 10, pp. 4589-4598.
- [241] Yu, Y.-T.; Kim, B.-G.: Effects of adding B₂O₃ as a flux on phosphorescent properties in synthesis of SrAl₂O₄:(Eu²⁺, Dy³⁺) phosphor. In: *Korean Journal of Chemical Engineering* 20 (2003), Heft 5, S. 973-976.
- [242] Yamamoto, H.; Matsuzawa, T.: Mechanism of long phosphorescence of SrAl₂O₄:Eu²⁺, Dy³⁺ and CaAl₂O₄:Eu²⁺, Nd³⁺. In: *Journal of Luminescence* 72-74 (1997), S. 287-289.
- [243] Brito, H.F.; Hölsä, J.; Laamanen, T. et al.: Persistent luminescence mechanisms: human imagination at work. In: *Optical Materials Express* 2 (2012), Heft 4, S. 371.

Anhang

Tabelle A 1: Gitterparameter und Reflexliste von CaAl_2O_4 (rel. Int. > 1,0 %)

Calcium Aluminat				CaAl_2O_4				GoF = 2,07			
P2 ₁ /n	Z = 4			a = 8,700(8) Å	b = 8,091(2) Å	c = 17,478(6) Å					
	V = 1069,39(1) Å ³			$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 119,64(8)^\circ$	$\gamma = 90^\circ$					
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
15,99	0	1	2	5,5375	1,29	41,48	-4	0	4	2,1752	1,78
16,03	1	1	0	5,5245	1,93	42,07	0	2	6	2,1461	1,47
16,06	-1	1	2	5,5154	2,16	42,21	3	2	0	2,1393	2,31
18,96	1	1	1	4,6772	5,00	42,31	-3	2	6	2,1345	2,06
19,00	-1	1	3	4,6661	4,69	42,34	1	3	3	2,1329	1,60
20,31	-1	0	4	4,3694	1,63	43,03	-4	1	4	2,1006	1,44
21,95	0	2	0	4,0456	8,69	43,13	0	1	7	2,0959	1,01
22,73	0	2	1	3,9093	1,20	43,48	-4	1	5	2,0798	1,02
23,59	-2	0	4	3,7691	1,73	44,77	0	4	0	2,0228	4,08
23,95	-2	1	3	3,7124	2,85	44,77	-4	1	6	2,0228	5,85
24,24	-1	2	1	3,6684	1,17	46,26	-2	3	6	1,9608	1,35
25,99	2	1	0	3,4253	1,64	47,12	2	2	4	1,9270	6,62
26,99	-1	2	3	3,3013	2,80	47,25	-2	2	8	1,9223	14,22
27,85	1	1	3	3,2008	2,23	47,42	-4	2	4	1,9158	6,66
27,91	-1	1	5	3,1936	2,72	49,62	-1	4	4	1,8356	2,05
28,21	0	2	3	3,1606	2,94	49,63	-4	1	8	1,8354	1,56
29,16	2	1	1	3,0600	1,72	54,50	-4	3	5	1,6822	1,16
29,25	-2	1	5	3,0507	1,38	55,25	-5	1	3	1,6613	1,17
30,04	1	2	2	2,9728	3,54	55,45	-1	0	10	1,6558	1,37
30,08	-1	2	4	2,9686	100,00	58,25	0	5	2	1,5827	1,26
30,14	-2	2	2	2,9625	18,81	58,26	1	5	0	1,5824	1,49
30,74	-2	2	3	2,9064	1,72	58,27	-1	5	2	1,5822	1,43
31,12	1	0	4	2,8714	3,23	58,45	3	4	0	1,5776	1,31
31,19	-1	0	6	2,8650	2,89	58,46	2	3	5	1,5774	1,28
31,30	-2	0	6	2,8558	6,55	58,53	-3	4	6	1,5757	1,49
31,35	-3	0	2	2,8506	1,96	59,68	4	3	0	1,5480	1,11
31,43	0	1	5	2,8441	1,55	59,96	0	5	3	1,5414	1,05
32,44	-2	2	4	2,7577	1,14	60,28	1	2	8	1,5342	4,40
35,43	0	0	6	2,5317	14,90	60,35	-1	2	10	1,5324	3,45
35,59	3	0	0	2,5205	31,32	60,46	4	2	2	1,5300	3,74
35,70	-3	0	6	2,5127	9,21	60,49	1	3	7	1,5292	3,43
36,80	1	3	1	2,4404	2,04	60,56	-1	3	9	1,5277	3,78
36,97	0	2	5	2,4293	1,08	60,64	-5	2	2	1,5258	2,51
37,18	0	1	6	2,4162	9,11	60,66	-4	2	10	1,5254	3,95
37,34	3	1	0	2,4065	19,77	60,77	-5	2	8	1,5229	3,05
37,45	-3	1	6	2,3997	8,81	60,98	1	5	2	1,5181	3,14
37,70	2	1	3	2,3842	1,42	61,01	-1	5	4	1,5175	4,86
37,82	-2	1	7	2,3769	1,29	62,53	-2	4	8	1,4843	1,21
38,46	2	2	2	2,3386	1,09	63,64	3	0	6	1,4610	1,10
38,47	-1	2	6	2,3381	1,70	63,64	-2	3	10	1,4609	2,58
38,56	-2	2	6	2,3331	2,09	63,72	1	4	6	1,4593	1,64
38,68	-1	1	7	2,3260	2,39	63,74	-3	3	10	1,4589	1,01
39,19	1	3	2	2,2970	1,75	63,78	-1	4	8	1,4581	2,08
39,27	-2	3	2	2,2923	2,57	63,81	3	4	2	1,4574	3,28
39,72	-2	3	1	2,2672	1,77	63,86	-3	0	12	1,4565	2,28
41,01	0	3	4	2,1989	3,29	63,89	-5	3	4	1,4559	1,68
41,08	2	3	0	2,1957	4,20	64,06	-2	5	5	1,4524	1,23
41,12	-2	3	4	2,1934	2,60	64,17	-6	0	6	1,4501	4,25
41,16	2	0	4	2,1916	1,40	66,34	-2	5	6	1,4079	1,02
41,29	-2	0	8	2,1847	3,19	69,98	0	6	1	1,3433	1,79

Tabelle A 2: Gitterparameter und Reflexliste von SrAl₂O₄ (rel. Int. > 1,0 %)

Strontium Aluminat						SrAl ₂ O ₄				GoF = 1,44	
P2 ₁						Z = 4	a = 5,151(2) Å	b = 8,834(0) Å	c = 8,444(8) Å		
						V = 383,64(7) Å ³	α = 90 °	β = 93,31(1) °	γ = 90 °		
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,52	0	1	1	6,0950	8,42	47,63	-2	1	3	1,9076	4,76
17,24	1	0	0	5,1398	6,06	47,79	0	2	4	1,9019	6,98
19,69	-1	0	1	4,5054	3,70	48,70	1	1	4	1,8683	12,38
19,97	1	1	0	4,4423	48,64	48,82	1	3	3	1,8638	1,60
20,10	0	2	0	4,4149	26,17	50,23	-1	2	4	1,8148	1,81
21,07	0	0	2	4,2135	1,96	51,08	-2	2	3	1,7867	2,53
22,13	-1	1	1	4,0134	12,71	52,68	0	4	3	1,7362	3,35
22,72	0	2	1	3,9109	18,42	53,82	2	2	3	1,7020	1,44
23,07	1	1	1	3,8515	10,34	54,49	3	1	0	1,6826	2,94
23,37	0	1	2	3,8029	2,61	54,65	-2	0	4	1,6780	1,59
26,59	1	2	0	3,3496	3,69	54,76	2	4	0	1,6751	3,68
28,12	1	0	2	3,1705	1,36	54,91	1	5	0	1,6707	4,61
28,27	-1	2	1	3,1538	10,14	55,00	-3	1	1	1,6683	1,46
28,43	-1	1	2	3,1367	100,00	55,19	-1	4	3	1,6630	1,97
29,27	0	2	2	3,0485	96,39	55,44	0	1	5	1,6560	5,67
29,92	1	1	2	2,9841	78,58	55,69	-1	3	4	1,6491	5,00
33,44	0	1	3	2,6773	2,15	55,86	-1	5	1	1,6447	1,50
33,51	-1	2	2	2,6717	1,17	56,48	-2	3	3	1,6280	7,23
34,87	2	0	0	2,5707	35,17	56,50	1	4	3	1,6274	1,00
35,10	1	3	0	2,5547	77,19	57,43	1	3	4	1,6033	8,28
35,49	-1	0	3	2,5276	1,68	57,44	-1	1	5	1,6030	4,08
35,90	-2	0	1	2,4995	1,32	57,64	3	2	0	1,5978	2,06
36,37	2	1	0	2,4682	8,22	57,79	-3	1	2	1,5941	6,64
36,43	-1	3	1	2,4646	8,59	58,13	-3	2	1	1,5856	3,91
36,96	-1	1	3	2,4301	10,46	58,13	2	0	4	1,5855	3,61
37,03	1	3	1	2,4257	8,42	58,47	-2	4	2	1,5772	5,14
37,12	2	0	1	2,4202	3,64	58,56	0	2	5	1,5750	2,80
37,23	0	3	2	2,4134	2,98	58,82	-2	2	4	1,5686	3,91
37,32	1	0	3	2,4076	4,07	59,05	-1	5	2	1,5632	10,64
37,36	-2	1	1	2,4050	7,12	59,40	3	2	1	1,5547	1,02
37,93	0	2	3	2,3705	3,75	59,56	1	1	5	1,5508	2,12
38,54	2	1	1	2,3342	4,58	59,89	1	5	2	1,5432	8,44
38,73	1	1	3	2,3229	3,38	60,16	2	4	2	1,5370	10,45
39,98	-2	0	2	2,2533	3,46	60,33	3	1	2	1,5330	8,45
40,57	2	2	0	2,2217	16,17	60,49	-1	2	5	1,5293	2,03
40,74	-1	3	2	2,2131	13,36	60,70	0	4	4	1,5245	3,67
40,84	0	4	0	2,2080	8,66	60,83	-3	2	2	1,5215	1,08
41,11	-1	2	3	2,1938	10,24	61,69	-3	0	3	1,5023	2,06
41,32	-2	1	2	2,1834	7,57	62,15	2	2	4	1,4923	3,60
41,48	-2	2	1	2,1753	1,56	62,55	1	2	5	1,4837	1,21
41,84	1	3	2	2,1575	16,08	62,67	3	3	0	1,4813	14,85
42,19	2	0	2	2,1404	6,39	62,68	-3	1	3	1,4811	1,60
42,28	0	4	1	2,1360	1,74	62,79	-1	4	4	1,4786	1,71
42,56	2	2	1	2,1224	1,07	63,10	0	6	0	1,4721	10,19
42,88	0	0	4	2,1072	18,79	63,53	-2	4	3	1,4633	1,14
44,15	0	1	4	2,0497	1,44	63,54	0	3	5	1,4630	1,02
44,54	0	3	3	2,0326	3,52	64,28	-1	5	3	1,4480	1,57
44,63	1	4	0	2,0289	2,22	64,54	-2	5	1	1,4427	1,15
45,14	-2	2	2	2,0072	10,97	65,21	-2	1	5	1,4296	4,07
45,53	-1	0	4	1,9906	1,98	65,93	2	4	3	1,4156	1,40
45,72	-1	4	1	1,9829	1,64	66,29	3	1	3	1,4088	1,22
46,39	0	4	2	1,9559	20,62	66,50	0	0	6	1,4049	2,56

Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
46,44	-2	0	3	1,9537	1,94	67,29	-2	5	2	1,3903	1,22
46,74	-1	1	4	1,9419	4,58	68,05	-2	2	5	1,3766	2,22
46,88	2	3	0	1,9365	1,86	69,35	3	4	0	1,3540	1,48
47,15	2	2	2	1,9261	24,67	69,79	-3	4	1	1,3465	1,69
47,53	1	0	4	1,9115	1,00						

Tabelle A 3: Gitterparameter und Reflexliste von BaAl₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Barium Aluminat						BaAl ₂ O ₄					GoF = 1,34	
P6 ₃						Z = 8	a = 10,449(6) Å	b = 10,449(6) Å	c = 8,794(0) Å			
						V = 831,60(8) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 120 °			
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	
16,98	1	1	0	5,2162	0,40	54,54	2	2	4	1,6813	8,45	
19,63	2	0	0	4,5184	47,16	54,65	4	2	1	1,6780	0,13	
20,21	0	0	2	4,3909	5,75	54,83	5	0	2	1,6729	0,33	
22,10	2	0	1	4,0184	9,26	55,55	3	1	4	1,6530	0,27	
22,49	1	0	2	3,9500	0,14	56,08	2	0	5	1,6386	1,59	
26,06	2	1	0	3,4168	0,16	56,14	4	1	3	1,6371	0,18	
27,99	2	1	1	3,1847	2,13	56,61	5	1	0	1,6246	0,20	
28,31	2	0	2	3,1503	100,00	56,84	3	3	2	1,6185	0,15	
29,62	3	0	0	3,0137	0,13	57,65	5	1	1	1,5976	0,99	
31,35	3	0	1	2,8508	0,19	57,83	4	2	2	1,5932	14,58	
34,33	2	2	0	2,6103	37,56	58,52	4	0	4	1,5760	5,44	
35,10	1	1	3	2,5545	0,25	59,04	2	1	5	1,5635	0,23	
35,77	3	1	0	2,5080	0,78	60,05	5	0	3	1,5394	0,18	
35,86	2	2	1	2,5023	3,36	60,73	5	1	2	1,5239	0,16	
36,11	3	0	2	2,4856	0,56	60,95	3	0	5	1,5188	0,36	
36,52	2	0	3	2,4583	1,55	61,40	3	2	4	1,5088	0,87	
37,25	3	1	1	2,4118	0,30	61,45	6	0	0	1,5077	5,95	
39,84	4	0	0	2,2609	9,66	62,45	6	0	1	1,4860	0,21	
40,15	2	2	2	2,2444	22,50	62,89	4	2	3	1,4766	0,78	
40,52	2	1	3	2,2243	0,25	63,27	4	1	4	1,4685	0,13	
41,05	0	0	4	2,1970	8,83	63,38	4	3	1	1,4663	0,26	
41,19	4	0	1	2,1896	1,37	63,44	0	0	6	1,4651	0,82	
42,30	1	0	4	2,1350	0,13	63,77	2	2	5	1,4584	0,19	
44,71	1	1	4	2,0252	0,46	64,25	5	2	0	1,4485	0,31	
44,85	3	2	1	2,0194	0,88	64,37	1	0	6	1,4462	0,21	
45,06	4	0	2	2,0105	17,22	64,69	3	1	5	1,4398	0,19	
45,88	2	0	4	1,9763	11,68	65,22	5	2	1	1,4293	0,33	
46,56	2	2	3	1,9492	0,69	65,39	6	0	2	1,4261	0,71	
47,16	4	1	1	1,9257	0,39	65,65	5	1	3	1,4209	0,21	
47,69	3	1	3	1,9055	0,15	66,19	1	1	6	1,4107	0,25	
50,66	4	1	2	1,8005	0,16	66,94	5	0	4	1,3968	0,40	
50,98	4	0	3	1,7901	0,55	67,10	2	0	6	1,3938	2,26	
51,54	5	0	1	1,7719	0,14	67,41	4	0	5	1,3881	0,61	
52,53	3	3	0	1,7407	0,26	68,10	5	2	2	1,3758	0,14	
53,02	1	0	5	1,7256	0,17	68,73	3	3	4	1,3647	0,26	
53,57	4	2	0	1,7094	5,07	69,62	4	2	4	1,3494	4,50	
54,11	3	2	3	1,6934	0,24	69,78	2	1	6	1,3467	0,23	

Tabelle A 4: Gitterparameter und Reflexliste von CaB₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Calcium Borat					CaB ₂ O ₄					GoF = 1,40					
Pbcn					Z = 4	a = 11,597(4) Å	b = 4,279(1) Å	c = 6,219(8) Å							
					V = 308,66(7) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °							
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]				
15,29	2	0	0	5,7903	19,28	54,38	2	2	2	1,6859	7,35				
22,15	1	1	0	4,0106	0,52	54,59	3	1	3	1,6797	7,93				
26,42	1	1	1	3,3702	61,58	55,35	4	2	1	1,6586	0,49				
28,70	0	0	2	3,1075	22,08	55,99	6	0	2	1,6411	8,20				
29,65	2	1	1	3,0101	46,31	57,43	3	2	2	1,6033	1,22				
29,74	1	0	2	3,0016	100,00	58,83	4	1	3	1,5685	0,91				
30,84	4	0	0	2,8973	22,29	59,41	0	0	4	1,5544	0,44				
31,18	3	1	0	2,8666	17,55	59,83	7	1	0	1,5445	1,24				
32,67	2	0	2	2,7388	15,03	60,00	1	0	4	1,5406	0,43				
34,42	3	1	1	2,6032	43,99	60,36	6	1	2	1,5322	2,04				
36,54	1	1	2	2,4571	0,36	60,71	5	2	1	1,5242	0,84				
39,02	2	1	2	2,3066	2,07	61,54	4	2	2	1,5057	10,61				
40,26	4	1	1	2,2381	15,12	61,73	2	0	4	1,5014	3,47				
42,23	0	2	0	2,1385	36,89	61,85	7	1	1	1,4990	8,43				
42,62	4	0	2	2,1196	23,53	62,33	0	2	3	1,4884	0,87				
42,88	3	1	2	2,1075	1,64	62,90	1	2	3	1,4763	1,16				
44,41	5	1	0	2,0382	4,24	63,60	7	0	2	1,4618	0,47				
44,78	0	2	1	2,0223	0,32	64,01	5	1	3	1,4534	1,11				
45,16	2	2	0	2,0063	10,99	64,22	8	0	0	1,4492	0,82				
45,49	1	2	1	1,9922	1,82	64,57	3	0	4	1,4422	1,17				
46,87	5	1	1	1,9368	52,58	64,59	2	2	3	1,4417	0,73				
46,99	6	0	0	1,9320	2,21	64,99	6	2	0	1,4338	1,12				
47,58	2	2	1	1,9094	6,73	65,87	2	1	4	1,4167	0,84				
47,85	4	1	2	1,8993	6,08	66,60	5	2	2	1,4030	0,76				
48,97	5	0	2	1,8585	4,00	66,92	6	2	1	1,3972	1,33				
49,46	1	1	3	1,8413	38,99	67,36	3	2	3	1,3890	0,71				
51,43	2	1	3	1,7754	0,27	67,68	7	1	2	1,3833	0,29				
51,85	0	2	2	1,7620	3,58	67,86	1	3	1	1,3800	2,16				
52,49	1	2	2	1,7420	6,35	68,43	4	0	4	1,3699	1,80				
53,18	4	2	0	1,7209	3,22	68,62	3	1	4	1,3666	0,55				
53,73	5	1	2	1,7046	0,27	69,49	2	3	1	1,3516	1,42				
54,09	6	1	1	1,6942	1,74										

Tabelle A 5: Gitterparameter und Reflexliste von SrB₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Strontium Borat					SrB ₂ O ₄					GoF = 2,01					
Pbcn					Z = 4	a = 11,992(3) Å	b = 4,330(0) Å	c = 6,596(1) Å							
					V = 342,51(2) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °							
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]				
14,76	2	0	0	5,9981	1,54	44,45	2	2	0	2,0365	0,33				
25,68	1	1	1	3,4659	2,46	45,32	5	1	1	1,9996	0,81				
27,01	0	0	2	3,2986	0,66	45,33	6	0	0	1,9989	0,24				
28,03	1	0	2	3,1805	0,83	46,64	2	2	1	1,9459	0,18				
28,78	2	1	1	3,0994	0,25	46,92	1	1	3	1,9349	0,70				
29,77	4	0	0	2,9985	0,65	50,37	0	2	2	1,8100	0,15				
30,40	3	1	0	2,9376	0,13	51,90	3	1	3	1,7603	0,22				
30,91	2	0	2	2,8902	0,69	52,06	4	2	0	1,7553	0,16				
33,36	3	1	1	2,6835	1,51	52,79	2	2	2	1,7328	0,25				
40,63	4	0	2	2,2187	0,54	53,57	6	0	2	1,7095	0,18				
41,68	0	2	0	2,1652	0,52	59,62	4	2	2	1,5495	0,35				

Tabelle A 6: Gitterparameter und Reflexliste von BaB₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Barium Borat				BaB₂O₄				GoF = 1,62			
R3c				Z = 18	a = 12,528(3) Å	b = 12,528(3) Å	c = 12,729(2) Å				
				V = 1730,28(9) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 120 °				
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,13	1	1	0	6,2626	24,46	55,21	2	1	7	1,6623	0,22
16,14	1	0	-2	5,4885	4,68	55,23	5	1	4	1,6618	0,50
21,51	2	0	2	4,1280	4,04	56,00	6	1	-1	1,6407	2,21
22,77	2	1	1	3,9027	4,48	57,26	5	2	-3	1,6077	2,40
24,60	3	0	0	3,6161	55,25	57,26	5	2	3	1,6077	2,62
25,34	1	1	3	3,5125	100,00	57,51	6	1	2	1,6013	0,86
25,83	2	1	-2	3,4468	0,33	57,68	4	2	5	1,5968	1,66
28,48	2	2	0	3,1317	13,06	58,36	4	1	-6	1,5799	1,22
29,23	1	0	4	3,0533	17,03	58,36	4	1	6	1,5799	1,57
30,50	3	1	-1	2,9282	7,37	58,59	1	0	-8	1,5742	0,21
32,60	2	0	-4	2,7446	1,33	58,93	4	4	0	1,5660	0,70
32,90	3	1	2	2,7202	3,37	59,33	3	1	-7	1,5563	0,66
35,60	2	2	3	2,5197	36,42	59,35	4	3	4	1,5559	0,36
35,69	2	1	4	2,5139	0,36	59,71	5	1	-5	1,5473	0,67
35,97	4	0	-2	2,4951	2,42	60,09	5	3	-1	1,5385	0,11
36,76	3	2	1	2,4426	1,18	60,60	2	0	8	1,5268	0,31
37,98	4	1	0	2,3674	9,89	61,53	5	3	2	1,5059	2,03
38,82	3	2	-2	2,3179	4,01	61,53	7	0	-2	1,5059	0,45
41,26	3	1	-4	2,1863	0,86	62,07	6	2	1	1,4941	0,19
41,73	2	1	-5	2,1628	2,43	62,35	3	3	6	1,4881	3,38
42,58	0	0	6	2,1214	7,41	63,25	4	4	3	1,4691	0,99
43,30	3	3	0	2,0879	5,24	63,29	3	2	7	1,4683	0,16
43,75	4	1	-3	2,0674	15,62	63,30	6	1	-4	1,4679	0,46
43,75	4	1	3	2,0674	14,35	63,48	6	2	-2	1,4642	0,79
43,82	4	0	4	2,0642	0,64	63,65	4	3	-5	1,4608	0,55
44,06	5	0	2	2,0537	4,15	64,83	7	1	0	1,4370	0,30
44,74	4	2	-1	2,0242	7,20	66,41	3	1	8	1,4066	0,37
45,09	1	1	6	2,0093	5,78	67,12	5	3	-4	1,3934	1,63
46,27	3	2	4	1,9605	3,19	67,12	7	0	4	1,3934	0,29
46,50	4	2	2	1,9515	0,67	67,46	6	1	5	1,3873	1,39
46,70	3	1	5	1,9435	1,65	67,81	5	4	1	1,3809	1,11
47,15	5	1	1	1,9261	2,84	67,89	1	1	9	1,3796	3,25
48,56	3	3	3	1,8734	0,32	68,08	6	0	-6	1,3762	1,10
48,84	5	1	-2	1,8632	0,15	68,08	6	0	6	1,3762	0,84
49,79	3	0	-6	1,8298	6,40	68,29	4	0	-8	1,3724	0,25
49,79	3	0	6	1,8298	7,28	68,60	6	3	0	1,3669	1,45
50,43	6	0	0	1,8082	2,28	68,94	7	1	-3	1,3611	0,77
50,90	5	0	-4	1,7927	2,56	68,94	7	1	3	1,3611	0,96
51,29	3	2	-5	1,7797	0,54	68,97	4	2	-7	1,3604	1,43
51,71	4	3	1	1,7663	1,08	68,99	6	2	4	1,3602	0,41
52,03	2	2	6	1,7564	2,89	69,16	5	4	-2	1,3572	0,10
52,64	5	2	0	1,7373	1,79	69,93	5	2	-6	1,3441	0,41
53,09	4	2	-4	1,7235	0,32	69,93	5	2	6	1,3441	0,32
53,30	4	3	-2	1,7174	1,13						

Tabelle A 7: Gitterparameter und Reflexliste von CaSc_2O_4 (rel. Int. > 0,1 %)

Calcium Scandanat				CaSc_2O_4			GoF = 0,89				
Pnma				Z = 4	a = 9,462(1) Å	b = 3,141(3) Å	c = 11,111(6) Å				
				V = 330,26(7) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$				
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
15,93	0	0	2	5,5589	1,19	54,46	4	1	3	1,6835	2,12
18,50	1	0	2	4,7933	1,73	56,79	4	0	5	1,6199	0,21
18,73	2	0	0	4,7333	11,18	57,39	5	1	1	1,6042	1,15
24,69	2	0	2	3,6033	11,38	57,67	3	0	6	1,5972	16,08
25,80	1	0	3	3,4502	0,60	58,47	6	0	0	1,5772	10,49
29,41	3	0	1	3,0351	4,56	58,63	1	1	6	1,5733	12,68
29,52	0	1	1	3,0237	9,37	58,65	3	1	5	1,5728	3,09
30,62	2	0	3	2,9172	1,83	58,73	0	2	0	1,5708	23,19
31,02	1	1	1	2,8802	6,06	59,01	5	0	4	1,5642	2,16
32,19	0	0	4	2,7786	54,48	59,07	4	1	4	1,5626	17,15
32,61	3	0	2	2,7436	100,00	59,11	6	0	1	1,5616	1,76
33,59	1	0	4	2,6661	1,46	59,33	5	1	2	1,5563	16,19
34,09	1	1	2	2,6276	59,54	60,25	1	2	1	1,5348	0,22
34,23	2	1	0	2,6176	26,37	61,02	6	0	2	1,5173	1,44
35,20	2	1	1	2,5479	0,79	61,26	2	1	6	1,5119	8,25
37,41	3	0	3	2,4019	3,17	61,57	2	0	7	1,5051	2,61
37,50	0	1	3	2,3962	2,55	62,14	1	2	2	1,4926	0,92
37,51	2	0	4	2,3960	2,02	62,22	2	2	0	1,4908	0,91
37,97	2	1	2	2,3680	2,51	62,49	5	1	3	1,4852	2,40
38,73	1	1	3	2,3229	55,59	62,84	2	2	1	1,4776	1,02
38,89	4	0	1	2,3142	2,08	63,77	4	0	6	1,4584	3,00
41,33	3	1	1	2,1828	32,01	64,12	6	0	3	1,4511	0,42
41,45	4	0	2	2,1769	11,84	64,63	5	0	5	1,4410	0,36
41,71	1	0	5	2,1639	3,93	64,69	2	2	2	1,4399	0,72
42,24	2	1	3	2,1377	8,05	64,69	4	1	5	1,4397	1,22
43,77	3	1	2	2,0665	2,96	65,51	3	1	6	1,4237	1,58
44,54	1	1	4	2,0327	11,25	65,80	3	0	7	1,4181	0,68
45,03	2	0	5	2,0118	0,72	65,87	0	1	7	1,4169	0,32
45,45	4	0	3	1,9940	0,27	66,25	6	1	0	1,4095	1,66
47,62	3	1	3	1,9081	10,58	66,69	1	1	7	1,4013	0,88
47,70	2	1	4	1,9051	43,24	66,75	5	1	4	1,4002	1,61
48,11	4	1	0	1,8900	24,31	66,85	6	1	1	1,3983	0,48
48,77	5	0	1	1,8659	0,84	67,04	3	2	1	1,3950	0,43
48,84	4	1	1	1,8632	13,62	67,36	0	0	8	1,3891	0,40
50,15	1	0	6	1,8177	0,72	67,70	2	2	3	1,3830	1,12
50,17	3	0	5	1,8169	0,69	68,18	1	0	8	1,3744	3,29
50,24	0	1	5	1,8145	7,40	68,34	6	0	4	1,3716	9,43
50,93	5	0	2	1,7916	0,65	68,58	0	2	4	1,3674	8,17
51,00	4	1	2	1,7893	3,41	68,64	6	1	2	1,3662	0,59
52,64	3	1	4	1,7372	0,47	68,82	3	2	2	1,3631	14,66
53,05	2	0	6	1,7248	15,16	69,15	2	1	7	1,3573	0,87
54,09	2	1	5	1,6942	2,42	69,39	1	2	4	1,3533	0,43
54,39	5	0	3	1,6854	0,46						

Tabelle A 8: Gitterparameter und Reflexliste von SrSm₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Strontium Samarium Oxid				SrSm ₂ O ₄			GoF = 1,24				
Pnma				Z = 4	a = 10,142(6) Å	b = 3,519(8) Å	c = 12,116(6) Å				
				V = 432,55(7) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °				
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
11,38	1	0	1	7,7710	0,48	51,92	0	2	0	1,7596	18,43
14,62	0	0	2	6,0545	1,20	52,58	5	1	1	1,7391	3,47
17,04	1	0	2	5,1983	10,51	52,77	3	0	6	1,7335	16,73
17,48	2	0	0	5,0686	10,57	53,02	1	1	6	1,7258	17,76
18,96	2	0	1	4,6758	0,81	53,68	1	0	7	1,7060	0,66
22,86	2	0	2	3,8872	4,35	53,83	4	1	4	1,7017	19,86
23,70	1	0	3	3,7509	0,45	54,23	6	0	0	1,6902	3,01
26,36	0	1	1	3,3789	6,12	54,24	0	2	2	1,6898	5,59
27,37	3	0	1	3,2554	1,79	54,31	5	1	2	1,6877	15,34
27,81	1	1	1	3,2056	3,69	54,79	6	0	1	1,6740	0,54
28,23	2	0	3	3,1583	0,30	55,05	1	2	2	1,6668	1,89
29,47	0	0	4	3,0283	52,27	55,21	2	2	0	1,6624	0,98
30,26	3	0	2	2,9514	100,00	55,46	2	1	6	1,6554	5,24
30,65	1	1	2	2,9142	99,66	55,77	2	2	1	1,6470	0,29
30,91	2	1	0	2,8907	46,59	56,11	2	0	7	1,6379	0,33
31,80	2	1	1	2,8118	7,51	56,48	6	0	2	1,6280	0,28
33,76	0	1	3	2,6528	0,33	57,12	5	1	3	1,6114	3,49
34,35	2	1	2	2,6089	1,87	57,44	2	2	2	1,6031	0,36
34,47	2	0	4	2,5999	3,11	57,83	1	2	3	1,5931	0,38
34,58	3	0	3	2,5918	2,29	58,38	4	0	6	1,5795	1,78
34,93	1	1	3	2,5665	18,80	58,84	4	1	5	1,5682	0,88
35,38	4	0	0	2,5350	0,16	59,21	6	0	3	1,5592	0,39
36,17	4	0	1	2,4813	1,48	59,38	5	0	5	1,5553	0,52
37,61	3	1	1	2,3898	9,60	59,38	3	1	6	1,5551	0,68
38,16	1	0	5	2,3565	1,26	59,68	3	2	1	1,5481	0,44
38,26	2	1	3	2,3506	7,28	60,23	1	1	7	1,5352	1,78
38,46	4	0	2	2,3385	3,79	60,74	6	1	0	1,5236	0,44
39,94	3	0	4	2,2556	0,71	60,83	0	2	4	1,5215	9,87
40,25	1	1	4	2,2388	6,62	61,15	0	0	8	1,5144	1,10
41,26	2	0	5	2,1861	0,30	61,27	6	1	1	1,5117	19,80
42,05	4	0	3	2,1471	1,28	61,28	3	2	2	1,5115	4,85
43,23	2	1	4	2,0912	46,50	61,90	1	0	8	1,4978	2,15
43,32	3	1	3	2,0870	1,77	62,49	2	1	7	1,4850	0,45
43,98	4	1	0	2,0570	28,22	62,84	6	1	2	1,4776	0,25
44,65	4	1	1	2,0280	2,33	62,92	6	0	4	1,4760	9,02
44,85	0	0	6	2,0191	0,50	63,82	2	2	4	1,4573	1,49
45,30	5	0	1	2,0003	0,45	64,13	2	0	8	1,4511	1,01
45,41	0	1	5	1,9956	1,88	64,63	4	1	6	1,4410	1,87
45,78	1	0	6	1,9802	1,42	64,91	4	2	1	1,4354	0,36
46,05	3	0	5	1,9693	0,53	65,14	5	0	6	1,4310	0,98
46,33	1	1	5	1,9581	1,20	65,21	4	0	7	1,4295	0,22
46,59	4	1	2	1,9478	0,87	65,57	5	1	5	1,4226	0,68
46,69	4	0	4	1,9440	1,67	66,16	3	1	7	1,4113	1,25
47,22	5	0	2	1,9232	2,37	66,43	4	2	2	1,4061	1,35
47,86	3	1	4	1,8991	0,64	67,45	3	2	4	1,3875	0,25
48,49	2	0	6	1,8759	6,48	67,51	6	0	5	1,3863	0,42
49,01	2	1	5	1,8570	5,79	67,75	3	0	8	1,3821	0,23
49,70	4	1	3	1,8329	0,52	67,96	1	1	8	1,3782	2,14
50,30	5	0	3	1,8124	1,46						

Tabelle A 9: Gitterparameter und Reflexliste von SrEu₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Strontium Europium Oxid				SrEu ₂ O ₄			GoF = 1,59				
Pnma				Z = 4	a = 10,135(7) Å	b = 3,496(7) Å	c = 12,079(5) Å				
				V = 428,11(4) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °				
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,66	0	0	2	6,0386	0,88	52,90	3	0	6	1,7294	10,39
17,08	1	0	2	5,1876	6,91	53,23	1	1	6	1,7194	11,66
17,49	2	0	0	5,0671	7,04	53,99	4	1	4	1,6971	13,32
22,89	2	0	2	3,8818	3,32	54,26	6	0	0	1,6892	4,81
26,52	0	1	1	3,3585	4,29	54,44	5	1	2	1,6841	9,89
27,97	1	1	1	3,1880	2,80	54,48	5	0	4	1,6830	0,69
29,56	0	0	4	3,0196	48,27	55,41	1	2	2	1,6567	1,25
30,29	3	0	2	2,9483	100,00	55,67	2	1	6	1,6496	4,39
30,81	1	1	2	2,8994	91,76	56,12	2	2	1	1,6374	0,66
30,87	1	0	4	2,8939	0,43	56,27	2	0	7	1,6335	0,11
31,05	2	1	0	2,8778	41,54	56,52	6	0	2	1,6268	1,00
31,94	2	1	1	2,7995	6,22	57,25	5	1	3	1,6078	2,83
33,93	0	1	3	2,6399	0,20	57,79	2	2	2	1,5941	1,40
34,49	2	1	2	2,5980	1,88	58,20	1	2	3	1,5839	0,29
34,55	2	0	4	2,5940	2,24	58,51	4	0	6	1,5762	1,63
34,63	3	0	3	2,5880	2,63	59,02	4	1	5	1,5639	1,10
35,10	1	1	3	2,5547	18,94	59,28	6	0	3	1,5577	0,95
36,19	4	0	1	2,4798	1,21	59,48	5	0	5	1,5528	0,53
37,74	3	1	1	2,3818	9,18	59,71	0	1	7	1,5474	0,47
38,27	1	0	5	2,3499	0,39	60,02	3	2	1	1,5400	0,48
38,42	2	1	3	2,3413	6,75	60,17	3	0	7	1,5367	0,39
38,50	4	0	2	2,3365	3,24	60,47	1	1	7	1,5297	0,16
39,97	3	1	2	2,2540	0,28	60,51	2	2	3	1,5289	1,58
40,01	3	0	4	2,2514	0,37	61,21	0	2	4	1,5130	6,96
40,43	1	1	4	2,2294	6,35	61,63	3	2	2	1,5038	11,88
41,37	2	0	5	2,1807	0,41	62,10	1	0	8	1,4934	1,28
42,10	4	0	3	2,1445	0,86	62,97	6	1	2	1,4750	4,03
43,40	2	1	4	2,0833	38,76	63,00	6	0	4	1,4742	2,18
44,10	4	1	0	2,0517	22,23	64,19	2	2	4	1,4498	1,99
44,77	4	1	1	2,0227	2,20	64,73	4	2	0	1,4390	0,22
44,99	0	0	6	2,0132	0,89	64,80	7	0	1	1,4376	0,18
45,33	5	0	1	1,9991	0,55	64,83	4	1	6	1,4370	1,39
45,61	0	1	5	1,9875	2,27	65,24	4	2	1	1,4289	0,73
45,92	1	0	6	1,9746	1,37	65,38	4	0	7	1,4263	0,11
46,16	3	0	5	1,9651	0,49	65,55	6	1	3	1,4229	0,30
46,53	1	1	5	1,9504	0,90	65,75	5	1	5	1,4192	0,84
46,72	4	1	2	1,9427	0,62	66,33	7	0	2	1,4080	0,49
46,76	4	0	4	1,9410	0,98	66,40	3	1	7	1,4069	0,63
47,26	5	0	2	1,9217	2,11	66,77	4	2	2	1,3998	1,61
48,02	3	1	4	1,8930	0,78	67,62	6	0	5	1,3844	1,21
48,63	2	0	6	1,8709	5,68	67,95	3	0	8	1,3785	0,41
49,20	2	1	5	1,8503	4,28	68,23	1	1	8	1,3734	1,95
49,84	4	1	3	1,8281	0,92	68,76	2	2	5	1,3641	0,34
50,36	5	0	3	1,8105	1,18	69,09	6	1	4	1,3584	0,81
52,29	0	2	0	1,7483	12,36	69,29	4	2	3	1,3551	0,96
52,70	5	1	1	1,7355	0,60						

Tabelle A 10: Gitterparameter und Reflexliste von SrGd₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Strontium Gadolinium Oxid			SrGd ₂ O ₄			GoF = 2,45					
Pnma			Z = 4	a = 10,103(3) Å	b = 12,018(7) Å	c = 3,464(0) Å					
			V = 420,62(6) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °					
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,65	0	2	0	6,0423	1,07	55,95	2	6	1	1,6421	0,42
17,46	2	0	0	5,0748	14,19	56,50	2	7	0	1,6275	0,81
22,90	2	2	0	3,8802	6,69	57,48	5	3	1	1,6020	1,77
26,68	0	1	1	3,3382	7,33	58,26	2	2	2	1,5824	0,60
28,13	1	1	1	3,1700	2,44	58,68	1	3	2	1,5722	0,18
29,63	0	4	0	3,0125	56,12	58,72	4	6	0	1,5712	1,04
30,98	1	2	1	2,8840	100,00	59,29	4	5	1	1,5575	0,68
31,21	2	0	1	2,8638	43,88	59,43	6	3	0	1,5540	0,45
32,10	2	1	1	2,7860	4,66	59,88	3	6	1	1,5433	0,34
34,63	2	4	0	2,5880	3,04	59,95	3	0	2	1,5419	0,30
34,66	2	2	1	2,5857	2,19	60,49	3	1	2	1,5294	0,38
35,28	1	3	1	2,5418	15,27	60,79	1	7	1	1,5224	1,26
37,90	3	1	1	2,3720	7,02	61,31	5	4	1	1,5108	0,94
38,56	4	2	0	2,3330	7,37	61,61	6	1	1	1,5041	1,61
40,63	1	4	1	2,2186	4,15	61,62	0	8	0	1,5039	0,70
43,61	2	4	1	2,0738	29,52	61,70	0	4	2	1,5021	5,53
44,27	4	0	1	2,0442	16,96	62,10	3	2	2	1,4935	11,43
44,94	4	1	1	2,0153	1,48	62,46	1	4	2	1,4858	0,37
45,84	0	5	1	1,9779	1,10	63,06	2	7	1	1,4731	6,20
46,88	4	4	0	1,9364	0,35	63,19	6	4	0	1,4704	0,12
46,91	4	2	1	1,9354	0,43	63,21	6	2	1	1,4700	0,83
48,24	3	4	1	1,8849	0,26	64,61	2	8	0	1,4414	1,15
48,80	2	6	0	1,8647	4,53	64,73	3	3	2	1,4390	1,20
49,44	2	5	1	1,8419	2,29	65,14	4	6	1	1,4309	1,62
50,05	4	3	1	1,8210	0,29	65,20	4	0	2	1,4298	0,94
52,44	4	5	0	1,7435	0,99	65,64	4	7	0	1,4213	1,33
52,74	0	0	2	1,7342	6,09	66,04	5	5	1	1,4136	1,20
52,90	5	1	1	1,7295	7,81	66,73	3	7	1	1,4005	2,01
53,51	1	6	1	1,7112	11,34	67,26	4	2	2	1,3909	1,87
54,16	1	1	2	1,6922	11,50	67,84	6	5	0	1,3804	1,81
54,22	4	4	1	1,6904	1,34	68,32	3	4	2	1,3718	1,56
54,37	6	0	0	1,6860	6,14	68,61	1	8	1	1,3668	2,62
54,65	5	2	1	1,6782	8,81	69,29	2	5	2	1,3550	2,13
55,07	0	2	2	1,6663	0,35	69,79	4	3	2	1,3466	2,64
55,88	1	2	2	1,6441	3,82						

Tabelle A 11: Gitterparameter und Reflexliste von SrDy₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Strontium Dysprosium Oxid				SrDy ₂ O ₄			GoF = 0,98				
Pnma				Z = 4	a = 10,086(0) Å	b = 3,426(1) Å	c = 11,932(7) Å				
				V = 412,34(3) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °				
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
11,44	1	0	1	7,7266	0,52	53,41	0	2	0	1,7140	13,49
14,80	0	0	2	5,9804	1,19	53,46	3	0	6	1,7127	11,47
17,22	1	0	2	5,1455	9,40	54,01	1	1	6	1,6964	13,22
17,54	2	0	0	5,0530	11,77	54,52	6	0	0	1,6819	7,79
23,04	2	0	2	3,8572	5,26	54,60	4	1	4	1,6796	16,18
24,00	1	0	3	3,7055	0,34	54,83	1	2	1	1,6731	0,57
27,02	0	1	1	3,2972	5,20	54,87	5	0	4	1,6719	0,40
27,51	3	0	1	3,2400	0,18	54,94	5	1	2	1,6698	12,12
28,46	1	1	1	3,1341	0,69	55,10	6	0	1	1,6654	0,32
29,89	0	0	4	2,9865	49,61	55,76	0	2	2	1,6474	0,27
30,46	3	0	2	2,9322	100,00	56,45	2	1	6	1,6287	3,98
31,21	1	0	4	2,8637	9,12	56,56	1	2	2	1,6258	0,65
31,33	1	1	2	2,8530	84,07	56,67	2	2	0	1,6228	0,60
31,51	2	1	0	2,8369	38,10	56,95	2	0	7	1,6157	0,21
32,41	2	1	1	2,7601	4,16	57,24	2	2	1	1,6080	0,15
34,49	0	1	3	2,5983	0,58	57,81	5	1	3	1,5936	1,28
34,88	3	0	3	2,5701	2,53	58,93	2	2	2	1,5660	0,22
34,88	2	0	4	2,5700	1,28	59,08	4	0	6	1,5623	1,29
34,99	2	1	2	2,5622	1,94	59,38	1	2	3	1,5553	0,41
35,54	4	0	0	2,5238	0,56	59,71	4	1	5	1,5474	0,77
35,65	1	1	3	2,5162	15,05	60,37	3	1	6	1,5320	0,48
36,35	4	0	1	2,4692	0,70	61,35	6	1	0	1,5098	2,06
38,19	3	1	1	2,3545	7,77	61,68	5	1	4	1,5026	0,23
38,70	4	0	2	2,3245	2,06	61,90	6	1	1	1,4979	0,40
38,71	1	0	5	2,3243	1,62	62,16	0	0	8	1,4922	1,88
38,96	2	1	3	2,3099	3,22	62,44	0	2	4	1,4862	7,71
40,45	3	1	2	2,2281	0,98	62,76	3	2	2	1,4794	16,72
41,04	1	1	4	2,1976	5,69	62,91	1	0	8	1,4762	0,71
42,38	4	0	3	2,1312	0,20	63,19	1	2	4	1,4703	1,11
44,00	3	1	3	2,0561	20,48	63,44	6	0	4	1,4651	6,47
44,00	2	1	4	2,0561	16,45	63,51	6	1	2	1,4637	1,22
44,55	4	1	0	2,0322	20,84	65,14	2	0	8	1,4309	0,66
45,23	4	1	1	2,0034	3,09	65,41	3	2	3	1,4256	0,53
45,54	5	0	1	1,9903	0,13	65,63	4	1	6	1,4215	2,13
46,29	0	1	5	1,9596	2,18	65,83	4	2	0	1,4175	0,14
46,47	1	0	6	1,9525	0,73	65,87	5	0	6	1,4168	0,56
47,12	4	0	4	1,9270	0,84	66,35	4	2	1	1,4077	0,40
47,51	5	0	2	1,9122	1,28	66,70	7	0	2	1,4012	0,16
48,63	3	1	4	1,8710	0,53	67,29	3	1	7	1,3902	0,87
49,18	2	0	6	1,8513	6,37	67,91	4	2	2	1,3792	0,17
49,89	2	1	5	1,8266	2,69	68,77	3	0	8	1,3639	0,22
50,38	4	1	3	1,8098	0,28	69,04	3	2	4	1,3593	0,17
50,67	5	0	3	1,8001	0,44	69,25	1	1	8	1,3557	1,13
53,18	5	1	1	1,7211	1,54	69,28	7	0	3	1,3552	0,67

Tabelle A 12: Gitterparameter und Reflexliste von SrY₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Strontium Yttrium Oxid				SrY ₂ O ₄			GoF = 1,10				
Pnma				Z = 4	a = 10,029(9) Å	b = 3,392(1) Å	c = 11,859(4) Å				
				V = 403,48(0) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °				
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,62	0	0	2	6,0551	0,61	53,75	0	2	0	1,7042	11,99
17,05	1	0	2	5,1964	1,26	54,18	1	1	6	1,6916	11,25
17,36	2	0	0	5,1037	3,20	54,60	6	0	0	1,6795	10,02
18,89	2	0	1	4,6938	0,48	54,75	4	1	4	1,6751	13,15
22,90	2	0	2	3,8798	6,43	54,97	5	0	4	1,6692	2,15
27,02	0	1	1	3,2973	7,79	55,10	5	1	2	1,6655	10,36
27,40	3	0	1	3,2529	0,40	56,10	0	2	2	1,6380	0,76
28,46	1	1	1	3,1338	1,62	56,64	2	1	6	1,6238	4,24
29,82	0	0	4	2,9943	51,23	57,02	2	2	0	1,6137	0,10
30,37	3	0	2	2,9406	100,00	57,08	2	0	7	1,6122	0,31
31,14	1	0	4	2,8701	4,49	57,60	2	2	1	1,5990	0,35
31,34	1	1	2	2,8516	53,52	57,99	5	1	3	1,5891	1,87
31,52	2	1	0	2,8359	25,87	59,23	4	0	6	1,5588	2,23
32,43	2	1	1	2,7587	4,53	59,30	2	2	2	1,5572	0,30
34,83	2	0	4	2,5734	0,95	59,92	4	1	5	1,5426	1,08
35,02	2	1	2	2,5600	0,79	60,12	5	0	5	1,5379	0,20
35,48	4	0	0	2,5279	0,55	60,59	3	1	6	1,5270	0,53
35,69	1	1	3	2,5136	25,24	60,82	0	1	7	1,5217	0,13
36,30	4	0	1	2,4727	0,44	61,51	3	2	1	1,5063	0,60
38,24	3	1	1	2,3519	12,21	61,59	1	1	7	1,5045	1,68
38,67	4	0	2	2,3264	2,77	61,90	5	1	4	1,4979	0,10
38,69	1	0	5	2,3252	3,33	62,07	2	2	3	1,4942	0,36
39,01	2	1	3	2,3068	4,63	62,10	6	1	1	1,4934	0,21
40,51	3	1	2	2,2250	0,93	62,35	0	0	8	1,4882	1,70
41,11	1	1	4	2,1939	5,59	62,83	0	2	4	1,4778	6,66
41,82	2	0	5	2,1585	0,16	63,11	1	0	8	1,4721	9,76
44,09	3	1	3	2,0524	28,11	63,15	3	2	2	1,4712	6,84
44,09	2	1	4	2,0521	8,31	63,59	1	2	4	1,4620	8,66
44,63	4	1	0	2,0288	18,12	63,61	6	0	4	1,4616	0,38
45,31	4	1	1	1,9998	6,81	65,31	7	0	1	1,4276	0,26
45,55	5	0	1	1,9898	0,27	65,36	2	0	8	1,4267	0,33
46,40	0	1	5	1,9552	3,70	65,83	2	2	4	1,4176	1,42
46,52	1	0	6	1,9506	0,50	65,89	4	1	6	1,4165	0,33
47,16	4	0	4	1,9256	0,27	66,08	5	0	6	1,4129	0,43
47,31	4	1	2	1,9199	1,36	66,90	7	0	2	1,3976	0,21
47,33	1	1	5	1,9192	0,22	67,58	3	1	7	1,3851	1,15
48,74	3	1	4	1,8667	0,45	68,34	4	2	2	1,3716	0,28
49,24	2	0	6	1,8489	8,50	68,35	1	2	5	1,3713	0,31
50,02	2	1	5	1,8220	3,96	69,02	3	0	8	1,3596	0,16
50,51	4	1	3	1,8056	0,80	69,48	3	2	4	1,3517	0,54
53,31	5	1	1	1,7169	1,47	69,56	1	1	8	1,3504	0,49
53,56	3	0	6	1,7097	14,74						

Tabelle A 13: Gitterparameter und Reflexliste von SrYb₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Strontium Ytterbium Oxid				SrYb ₂ O ₄			GoF = 2,24				
Pnma				Z = 4	a = 9,992(0) Å	b = 3,356(9) Å	c = 11,771(7) Å				
				V = 394,85(1) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °				
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
15,04	0	0	2	5,8852	2,01	53,92	5	1	1	1,6991	0,78
17,47	1	0	2	5,0709	12,11	54,22	3	0	6	1,6904	14,45
17,74	2	0	0	4,9955	14,74	54,64	0	2	0	1,6784	14,33
19,29	2	0	1	4,5985	0,12	54,94	1	1	6	1,6700	14,67
23,34	2	0	2	3,8086	5,51	55,00	3	1	5	1,6683	1,34
24,35	1	0	3	3,6521	0,25	55,11	6	0	0	1,6653	9,11
27,61	0	1	1	3,2281	4,99	55,36	1	0	7	1,6583	1,40
27,82	3	0	1	3,2047	0,78	55,43	4	1	4	1,6564	18,51
28,91	2	0	3	3,0857	0,79	55,54	5	0	4	1,6532	1,61
29,05	1	1	1	3,0717	3,67	55,70	6	0	1	1,6489	3,47
30,35	0	0	4	2,9428	48,57	55,72	5	1	2	1,6484	11,21
30,82	3	0	2	2,8986	100,00	57,01	0	2	2	1,6141	0,23
31,67	1	0	4	2,8229	3,40	57,40	2	1	6	1,6041	5,32
31,95	1	1	2	2,7991	91,03	57,47	6	0	2	1,6024	0,25
32,10	2	1	0	2,7862	36,62	57,81	2	0	7	1,5938	0,33
33,01	2	1	1	2,7113	2,73	57,82	1	2	2	1,5934	0,52
35,15	0	1	3	2,5507	0,30	57,91	2	2	0	1,5910	1,14
35,32	3	0	3	2,5391	0,30	58,64	5	1	3	1,5731	1,76
35,37	2	0	4	2,5356	3,53	59,90	4	0	6	1,5429	1,34
35,62	2	1	2	2,5183	2,09	60,20	2	2	2	1,5359	0,66
36,32	1	1	3	2,4715	12,26	60,63	4	1	5	1,5260	0,62
36,75	4	0	1	2,4435	0,33	61,35	3	1	6	1,5098	0,53
38,82	3	1	1	2,3180	5,73	61,75	3	0	7	1,5011	0,10
39,15	4	0	2	2,2994	2,80	62,18	6	1	0	1,4918	0,53
39,29	1	0	5	2,2915	0,23	62,41	3	2	1	1,4869	0,50
39,64	2	1	3	2,2718	1,68	62,41	1	1	7	1,4868	0,53
40,89	3	0	4	2,2053	0,46	62,58	5	1	4	1,4831	0,39
41,11	3	1	2	2,1939	1,09	62,73	6	1	1	1,4800	0,33
41,78	1	1	4	2,1605	7,11	63,14	0	0	8	1,4714	2,01
44,71	3	1	3	2,0251	5,34	63,79	0	2	4	1,4580	9,75
44,76	2	1	4	2,0233	33,84	63,90	1	0	8	1,4557	1,85
45,21	4	1	0	2,0040	23,55	64,05	3	2	2	1,4525	20,82
45,90	4	1	1	1,9755	3,90	64,21	6	0	4	1,4493	8,40
46,24	0	0	6	1,9619	0,82	64,37	6	1	2	1,4461	0,41
47,11	0	1	5	1,9275	2,10	64,54	1	2	4	1,4427	0,80
47,17	1	0	6	1,9251	1,35	66,15	2	0	8	1,4115	0,57
47,91	4	1	2	1,8970	1,69	66,66	4	1	6	1,4019	2,88
48,03	1	1	5	1,8926	0,80	66,75	3	2	3	1,4002	0,18
48,04	5	0	2	1,8922	2,18	66,76	5	0	6	1,4000	0,68
49,41	3	1	4	1,8431	1,20	66,79	2	2	4	1,3996	0,84
49,90	2	0	6	1,8261	6,48	68,40	3	1	7	1,3704	0,64
50,73	2	1	5	1,7983	1,65	69,25	4	2	2	1,3557	0,43
51,14	4	1	3	1,7847	0,58	69,82	3	0	8	1,3459	0,58
53,44	4	0	5	1,7133	0,16						

Tabelle A 14: Gitterparameter und Reflexliste von SrSc₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Strontium Scandium Oxid						SrSc ₂ O ₄				GoF = 1,29	
Pnma						Z = 4	a = 9,692(6) Å	b = 3,183(8) Å	c = 11,299(3) Å		
						V = 348,68(6) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °		
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
12,01	1	0	1	7,3647	1,33	52,05	2	0	6	1,7557	15,36
15,66	0	0	2	5,6543	1,90	53,08	5	0	3	1,7240	3,87
18,15	1	0	2	4,8844	20,43	53,12	2	1	5	1,7228	4,64
18,28	2	0	0	4,8497	0,35	53,32	4	1	3	1,7167	1,26
19,91	2	0	1	4,4568	1,33	55,55	4	0	5	1,6530	0,65
24,16	2	0	2	3,6803	16,28	56,08	5	1	1	1,6386	3,56
25,34	1	0	3	3,5124	0,96	56,51	3	0	6	1,6273	10,15
28,70	3	0	1	3,1077	2,75	56,95	6	0	0	1,6157	9,14
29,10	0	1	1	3,0658	25,76	57,58	6	0	1	1,5995	1,22
30,01	2	0	3	2,9751	0,63	57,60	1	1	6	1,5990	6,87
30,56	1	1	1	2,9231	20,29	57,61	5	0	4	1,5986	0,61
31,64	0	0	4	2,8259	51,03	57,84	4	1	4	1,5928	0,22
31,87	3	0	2	2,8057	100,00	57,85	1	0	7	1,5925	23,44
32,99	1	0	4	2,7130	8,03	57,87	0	2	0	1,5922	2,44
33,57	1	1	2	2,6676	29,56	57,99	5	1	2	1,5892	2,45
33,64	2	1	0	2,6619	11,58	59,34	1	2	1	1,5561	0,42
34,59	2	1	1	2,5910	14,50	60,14	2	1	6	1,5374	4,36
36,60	3	0	3	2,4530	1,82	60,35	0	2	2	1,5325	0,28
36,79	2	0	4	2,4413	4,53	61,08	5	1	3	1,5160	6,25
36,93	0	1	3	2,4322	1,38	62,39	4	0	6	1,4872	3,17
37,06	4	0	0	2,4239	6,56	62,50	6	0	3	1,4849	1,73
37,31	2	1	2	2,4081	0,63	63,13	5	0	5	1,4716	0,55
37,93	4	0	1	2,3700	2,61	63,35	4	1	5	1,4670	3,45
38,12	1	1	3	2,3591	67,71	63,63	2	2	2	1,4612	0,90
40,46	4	0	2	2,2276	17,67	64,18	1	2	3	1,4500	0,28
40,53	3	1	1	2,2240	26,69	64,23	3	1	6	1,4490	1,46
40,96	1	0	5	2,2014	1,96	64,64	6	1	0	1,4408	0,59
41,51	2	1	3	2,1739	8,30	64,68	0	1	7	1,4399	0,42
42,46	3	0	4	2,1272	3,26	65,23	6	1	1	1,4292	0,55
42,93	3	1	2	2,1051	3,16	65,26	5	1	4	1,4287	0,96
43,80	1	1	4	2,0651	5,92	65,48	1	1	7	1,4243	5,22
44,17	2	0	5	2,0486	1,29	65,87	3	2	1	1,4169	0,38
46,71	3	1	3	1,9432	23,85	66,09	0	0	8	1,4126	0,16
46,86	2	1	4	1,9374	17,95	66,57	2	2	3	1,4037	5,53
47,08	4	1	0	1,9287	10,04	66,63	6	0	4	1,4025	0,65
47,54	5	0	1	1,9110	0,26	66,88	1	0	8	1,3978	3,77
47,80	4	1	1	1,9012	19,78	67,47	0	2	4	1,3870	8,57
48,28	0	0	6	1,8836	0,54	67,60	3	2	2	1,3846	7,60
49,41	0	1	5	1,8432	8,43	68,25	1	2	4	1,3730	2,19
49,51	4	0	4	1,8396	2,45	69,22	2	0	8	1,3562	0,58
49,67	5	0	2	1,8340	0,55	69,74	4	1	6	1,3474	1,90
49,93	4	1	2	1,8252	2,56	69,88	7	0	2	1,3450	1,19
50,35	1	1	5	1,8108	0,59	69,96	4	0	7	1,3436	0,27

Tabelle A 15: Gitterparameter und Reflexliste von BaLa₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Barium Lanthan Oxid				BaLa ₂ O ₄			GoF = 1,15				
Pnma				Z = 4	a = 10,676(6) Å	b = 3,706(5) Å	c = 12,646(5) Å				
				V = 500,46(1) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °				
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
10,84	1	0	1	8,1565	1,66	52,09	1	2	2	1,7542	2,27
14,00	0	0	2	6,3223	1,93	52,21	2	2	0	1,7507	0,30
16,28	1	0	2	5,4400	0,94	52,74	2	2	1	1,7342	0,54
16,60	2	0	0	5,3376	2,53	52,78	2	1	6	1,7329	1,43
18,02	2	0	1	4,9175	0,13	53,45	6	0	2	1,7128	1,58
21,77	2	0	2	4,0787	5,81	54,09	5	1	3	1,6942	1,57
22,66	1	0	3	3,9206	0,79	54,33	2	2	2	1,6872	1,22
25,02	0	1	1	3,5566	0,67	54,74	1	2	3	1,6755	1,36
25,99	3	0	1	3,4255	2,40	55,51	4	0	6	1,6541	4,18
26,39	1	1	1	3,3743	1,02	55,84	4	1	5	1,6451	1,41
26,93	2	0	3	3,3081	1,67	56,05	6	0	3	1,6393	0,99
28,21	0	0	4	3,1614	60,15	56,34	5	0	5	1,6316	0,83
28,76	3	0	2	3,1012	100,00	56,63	0	1	7	1,6239	0,71
29,13	1	1	2	3,0630	8,84	56,91	2	2	3	1,6168	0,68
29,31	2	1	0	3,0444	3,97	57,13	3	0	7	1,6109	0,31
29,44	1	0	4	3,0313	5,38	57,34	1	1	7	1,6055	0,38
30,17	2	1	1	2,9598	1,68	57,40	6	1	0	1,6041	1,14
32,62	2	1	2	2,7430	0,43	57,68	5	1	4	1,5968	0,41
32,90	2	0	4	2,7202	1,28	57,90	6	1	1	1,5914	2,40
32,91	3	0	3	2,7192	1,55	58,31	1	2	4	1,5811	5,34
33,24	1	1	3	2,6934	3,83	59,02	1	0	8	1,5637	3,74
33,55	4	0	0	2,6690	0,96	59,39	6	1	2	1,5548	0,47
34,31	4	0	1	2,6115	0,58	59,45	2	1	7	1,5537	0,11
35,66	3	1	1	2,5157	1,15	59,57	6	0	4	1,5507	28,28
36,37	2	1	3	2,4680	1,80	60,39	2	2	4	1,5316	0,15
36,51	4	0	2	2,4589	2,74	61,09	2	0	8	1,5157	0,39
38,04	3	0	4	2,3635	0,78	61,32	4	1	6	1,5105	1,17
38,33	1	1	4	2,3465	0,31	61,83	6	1	3	1,4992	1,20
39,39	2	0	5	2,2856	0,66	61,98	4	0	7	1,4961	0,22
41,13	2	1	4	2,1930	1,99	62,60	7	0	2	1,4827	0,95
41,14	3	1	3	2,1925	3,34	62,71	1	2	5	1,4804	0,46
41,67	4	1	0	2,1659	4,41	62,73	4	2	2	1,4800	0,26
42,30	4	1	1	2,1348	0,88	62,85	3	1	7	1,4774	0,70
42,87	0	0	6	2,1077	1,12	63,77	3	2	4	1,4584	0,75
43,27	0	1	5	2,0891	1,00	63,92	6	0	5	1,4553	0,91
43,74	1	0	6	2,0678	0,18	64,44	3	0	8	1,4447	1,50
43,88	3	0	5	2,0616	0,49	64,64	1	1	8	1,4408	1,06
44,14	1	1	5	2,0502	1,08	64,70	2	2	5	1,4395	0,15
44,16	4	1	2	2,0490	0,13	65,10	4	2	3	1,4318	0,72
44,38	4	0	4	2,0394	0,61	65,16	6	1	4	1,4305	0,18
44,76	5	0	2	2,0230	2,23	66,61	2	1	8	1,4029	5,51
45,48	3	1	4	1,9928	1,05	66,67	7	1	1	1,4018	0,82
46,27	2	0	6	1,9604	5,20	67,14	1	0	9	1,3931	0,65
46,65	2	1	5	1,9455	4,84	67,25	5	2	1	1,3911	0,93
47,14	4	1	3	1,9265	1,34	67,45	4	1	7	1,3873	0,22
47,71	5	0	3	1,9048	2,03	67,86	1	2	6	1,3801	0,66
49,12	0	2	0	1,8532	2,00	67,96	3	2	5	1,3782	1,78
49,62	4	0	5	1,8359	0,94	68,05	7	1	2	1,3766	11,40
49,77	5	1	1	1,8307	1,17	68,22	7	0	4	1,3737	0,26
50,27	3	0	6	1,8135	16,70	68,34	4	2	4	1,3716	1,16
50,63	3	1	5	1,8016	1,49	68,62	5	2	2	1,3665	0,32
51,08	4	1	4	1,7868	1,84	68,99	4	0	8	1,3601	0,69

Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
51,30	6	0	0	1,7794	82,00	69,31	6	1	5	1,3546	1,47
51,61	5	0	4	1,7695	1,06	69,78	2	2	6	1,3467	0,34
51,85	6	0	1	1,7620	1,18						

Tabelle A 16: Gitterparameter und Reflexliste von BaNd₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Barium Neodym Oxid						BaNd ₂ O ₄					GoF = 1,31		
Pnma						Z = 4	a = 10,589(6) Å	b = 3,604(6) Å	c = 12,446(9) Å				
						V = 475,11(2) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$				
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]		
10,98	1	0	1	8,0503	0,79	52,33	6	0	1	1,7469	0,80		
14,24	0	0	2	6,2144	0,83	52,86	0	2	2	1,7306	0,33		
16,53	1	0	2	5,3588	0,64	53,62	1	2	2	1,7079	0,39		
16,75	2	0	0	5,2883	1,87	53,70	2	2	0	1,7056	0,27		
18,21	2	0	1	4,8668	0,13	53,82	2	1	6	1,7020	4,95		
22,04	2	0	2	4,0291	5,23	53,98	6	0	2	1,6974	0,45		
25,73	0	1	1	3,4596	10,65	54,24	2	2	1	1,6898	0,28		
26,24	3	0	1	3,3934	1,28	54,40	2	0	7	1,6851	0,58		
27,09	1	1	1	3,2885	9,67	54,91	5	1	3	1,6708	4,88		
27,31	2	0	3	3,2634	0,75	55,85	2	2	2	1,6449	1,23		
28,69	0	0	4	3,1096	46,60	56,30	1	2	3	1,6328	2,34		
29,08	3	0	2	3,0683	100,00	56,31	4	0	6	1,6324	0,59		
29,86	1	1	2	2,9901	71,20	56,65	6	0	3	1,6236	0,38		
29,92	1	0	4	2,9835	4,64	56,80	4	1	5	1,6196	3,14		
29,98	2	1	0	2,9777	33,15	57,07	5	0	5	1,6126	0,94		
30,85	2	1	1	2,8959	14,66	57,49	3	1	6	1,6017	0,77		
32,91	0	1	3	2,7195	0,51	57,79	0	1	7	1,5942	0,21		
33,32	3	0	3	2,6869	2,78	57,89	3	2	1	1,5915	0,16		
33,33	2	1	2	2,6859	0,44	58,05	3	0	7	1,5876	0,45		
33,39	2	0	4	2,6812	0,15	58,17	6	1	0	1,5847	0,31		
34,01	1	1	3	2,6340	23,24	58,50	1	1	7	1,5764	3,26		
34,63	4	0	1	2,5880	1,40	58,58	5	1	4	1,5745	0,78		
36,34	3	1	1	2,4705	12,23	58,68	6	1	1	1,5720	0,79		
36,89	4	0	2	2,4349	3,66	59,21	0	2	4	1,5592	11,22		
37,09	1	0	5	2,4221	0,58	59,37	0	0	8	1,5554	4,77		
37,14	2	1	3	2,4189	5,28	59,44	3	2	2	1,5539	26,01		
38,50	3	1	2	2,3362	1,12	59,92	1	2	4	1,5425	1,52		
38,56	3	0	4	2,3331	0,59	60,07	1	0	8	1,5389	3,28		
39,17	1	1	4	2,2982	5,94	60,21	6	1	2	1,5357	2,67		
40,01	2	0	5	2,2518	0,65	60,25	6	0	4	1,5348	10,68		
40,40	4	0	3	2,2307	1,35	60,61	2	1	7	1,5265	0,67		
41,90	3	1	3	2,1541	7,34	61,74	7	0	1	1,5014	0,59		
41,97	2	1	4	2,1512	32,59	61,95	3	2	3	1,4966	0,24		
42,34	4	1	0	2,1328	21,41	62,00	2	2	4	1,4957	0,78		
42,99	4	1	1	2,1022	7,10	62,15	2	0	8	1,4924	0,35		
43,32	5	0	1	2,0870	0,32	62,40	4	1	6	1,4870	2,80		
43,61	0	0	6	2,0736	0,49	62,65	5	0	6	1,4816	0,47		
44,20	0	1	5	2,0475	4,71	62,71	6	1	3	1,4804	0,75		
44,49	1	0	6	2,0350	0,63	62,78	4	2	1	1,4789	0,44		
44,52	3	0	5	2,0335	0,32	63,11	5	1	5	1,4720	0,43		
44,89	4	1	2	2,0176	1,85	63,22	7	0	2	1,4696	0,48		
45,21	5	0	2	2,0042	0,95	64,04	3	1	7	1,4529	2,32		
46,32	3	1	4	1,9585	1,30	64,25	4	2	2	1,4485	1,12		
47,03	2	0	6	1,9308	8,83	64,39	1	2	5	1,4458	0,40		
47,58	2	1	5	1,9097	7,35	64,71	6	0	5	1,4394	0,35		
47,92	4	1	3	1,8968	0,68	65,53	3	0	8	1,4234	0,37		
50,49	5	1	1	1,8061	2,02	65,95	1	1	8	1,4153	2,08		

Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
50,62	0	2	0	1,8017	18,97	66,12	6	1	4	1,4121	0,46
51,04	3	0	6	1,7879	16,33	67,93	2	1	8	1,3789	3,03
51,53	1	1	6	1,7720	14,40	68,37	1	0	9	1,3710	0,71
51,77	6	0	0	1,7643	12,27	68,40	5	1	6	1,3704	2,29
51,94	4	1	4	1,7592	17,41	68,67	4	1	7	1,3657	0,54
51,96	1	2	1	1,7583	0,54	68,91	5	0	7	1,3615	0,71
52,13	1	0	7	1,7530	1,36	68,95	7	1	2	1,3609	6,16
52,18	5	1	2	1,7516	13,02	68,98	0	2	6	1,3602	0,30
52,22	5	0	4	1,7503	1,76						

Tabelle A 17: Gitterparameter und Reflexliste von BaSm₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Barium Samarium Oxid						BaSm ₂ O ₄						GoF = 1,31		
Pnma						Z = 4	a = 10,518(3) Å			b = 3,560(3) Å			c = 12,332(9) Å	
						V = 461,84(5) Å ³	$\alpha = 90^\circ$			$\beta = 90^\circ$			$\gamma = 90^\circ$	
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]			
11,06	1	0	1	7,9953	1,09	52,64	5	0	4	1,7374	2,54			
14,36	0	0	2	6,1619	1,52	52,64	1	2	1	1,7374	6,08			
16,66	1	0	2	5,3163	1,43	52,64	1	0	7	1,7373	4,89			
16,86	2	0	0	5,2559	3,13	53,55	0	2	2	1,7100	0,45			
18,33	2	0	1	4,8349	0,32	54,31	1	2	2	1,6879	0,83			
22,21	2	0	2	3,9996	6,22	54,37	6	0	2	1,6860	3,88			
23,22	1	0	3	3,8272	0,30	54,38	2	2	0	1,6859	0,74			
26,04	0	1	1	3,4193	12,28	54,38	2	1	6	1,6859	1,27			
26,42	3	0	1	3,3712	0,73	54,92	2	2	1	1,6704	0,62			
27,41	1	1	1	3,2517	9,72	54,92	2	0	7	1,6703	0,36			
28,95	0	0	4	3,0822	49,33	55,40	5	1	3	1,6572	4,03			
29,29	3	0	2	3,0468	100,00	56,55	2	2	2	1,6262	1,60			
30,19	1	1	2	2,9578	43,23	56,81	4	0	6	1,6192	2,43			
30,19	1	0	4	2,9577	45,08	57,08	6	0	3	1,6123	0,43			
30,30	2	1	0	2,9473	29,51	57,35	4	1	5	1,6054	3,14			
31,18	2	1	1	2,8665	10,06	57,54	5	0	5	1,6004	0,21			
33,27	0	1	3	2,6905	0,32	58,07	3	1	6	1,5870	0,79			
33,58	3	0	3	2,6669	1,04	58,40	0	1	7	1,5788	0,18			
33,68	2	1	2	2,6591	1,25	58,66	6	1	0	1,5725	1,03			
33,68	2	0	4	2,6591	1,37	59,12	5	1	4	1,5614	2,00			
34,08	4	0	0	2,6288	0,38	59,12	1	1	7	1,5614	2,65			
34,38	1	1	3	2,6066	26,37	59,18	6	1	1	1,5599	0,38			
34,87	4	0	1	2,5710	0,66	59,19	2	2	3	1,5598	1,06			
36,69	3	1	1	2,4478	13,21	59,96	0	2	4	1,5414	10,99			
37,15	4	0	2	2,4182	3,72	59,97	0	0	8	1,5414	6,65			
37,43	1	0	5	2,4008	0,48	60,16	3	2	2	1,5370	26,73			
37,52	2	1	3	2,3952	5,08	60,67	1	2	4	1,5251	3,59			
38,87	3	1	2	2,3148	0,52	60,67	1	0	8	1,5251	2,61			
38,88	3	0	4	2,3147	0,73	60,73	6	1	2	1,5237	5,57			
39,58	1	1	4	2,2750	7,04	60,73	6	0	4	1,5237	5,49			
40,37	2	0	5	2,2326	0,66	61,25	2	1	7	1,5122	0,38			
40,71	4	0	3	2,2147	0,70	62,20	7	0	1	1,4914	0,67			
42,31	3	1	3	2,1344	11,52	62,70	3	2	3	1,4805	0,24			
42,39	2	1	4	2,1304	32,58	62,77	2	2	4	1,4792	0,15			
42,72	4	1	0	2,1147	21,40	62,77	2	0	8	1,4792	0,61			
43,38	4	1	1	2,0843	7,58	63,02	4	2	0	1,4739	1,75			
44,03	0	0	6	2,0550	0,51	63,02	4	1	6	1,4739	1,04			
44,67	0	1	5	2,0271	4,90	63,20	5	0	6	1,4700	0,31			
44,90	3	0	5	2,0170	0,28	63,27	6	1	3	1,4687	0,47			
44,91	1	0	6	2,0169	0,23	63,52	4	0	7	1,4635	0,37			
45,30	4	1	2	2,0004	0,94	63,70	7	0	2	1,4597	0,49			

Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
45,30	4	0	4	2,0003	0,99	64,70	3	1	7	1,4396	3,04
45,53	5	0	2	1,9906	0,88	65,01	4	2	2	1,4336	1,54
46,77	3	1	4	1,9406	0,32	65,25	6	0	5	1,4287	0,54
47,46	2	0	6	1,9141	8,86	66,17	3	2	4	1,4111	0,71
48,06	2	1	5	1,8915	6,27	66,66	1	1	8	1,4019	2,37
48,36	4	1	3	1,8805	0,80	66,72	6	1	4	1,4008	0,93
48,59	5	0	3	1,8724	0,30	67,21	2	2	5	1,3918	0,56
50,71	4	0	5	1,7987	0,33	68,11	7	1	1	1,3756	0,59
50,93	5	1	1	1,7916	2,38	68,65	2	1	8	1,3660	3,13
51,29	0	2	0	1,7798	20,06	69,07	5	1	6	1,3587	0,16
51,50	3	0	6	1,7729	16,53	69,07	1	0	9	1,3587	2,96
52,07	3	1	5	1,7549	8,55	69,37	4	1	7	1,3536	0,10
52,07	1	1	6	1,7549	8,97	69,55	7	1	2	1,3506	0,91
52,14	6	0	0	1,7528	10,55	69,55	7	0	4	1,3506	0,89
52,43	4	1	4	1,7439	20,82	69,55	5	2	1	1,3506	2,38
52,64	5	1	2	1,7374	2,70	69,55	5	0	7	1,3506	1,71

Tabelle A 18: Gitterparameter und Reflexliste von BaEu₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Barium Europium Oxid						BaEu ₂ O ₄					GoF = 1,33	
Pnma		Z = 4		a = 10,505(1) Å		b = 3,537(6) Å		c = 12,295(7) Å				
		V = 456,94(5) Å ³		$\alpha = 90^\circ$		$\beta = 90^\circ$		$\gamma = 90^\circ$				
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	
11,09	1	0	1	7,9695	0,88	52,61	4	1	4	1,7382	17,54	
14,42	0	0	2	6,1375	1,06	52,75	5	0	4	1,7339	0,61	
16,72	1	0	2	5,2984	1,41	52,79	6	0	1	1,7327	2,66	
16,89	2	0	0	5,2451	2,34	52,80	5	1	2	1,7325	11,14	
18,38	2	0	1	4,8240	0,67	52,82	1	0	7	1,7318	1,06	
22,27	2	0	2	3,9892	7,06	53,91	0	2	2	1,6992	0,15	
23,30	1	0	3	3,8144	0,33	54,47	6	0	2	1,6833	0,31	
26,22	0	1	1	3,3967	11,86	54,60	2	1	6	1,6795	5,15	
26,47	3	0	1	3,3648	0,40	54,73	2	2	0	1,6757	0,23	
27,58	1	1	1	3,2318	9,85	55,11	2	0	7	1,6652	0,13	
29,05	0	0	4	3,0715	51,11	55,57	5	1	3	1,6524	3,57	
29,35	3	0	2	3,0403	100,00	56,91	2	2	2	1,6167	1,55	
30,29	1	0	4	2,9480	13,60	56,97	4	0	6	1,6151	2,03	
30,37	1	1	2	2,9412	70,85	57,19	6	0	3	1,6095	0,47	
30,46	2	1	0	2,9320	25,61	57,55	4	1	5	1,6002	2,68	
31,34	2	1	1	2,8520	9,83	57,68	5	0	5	1,5969	0,16	
33,66	3	0	3	2,6605	0,41	58,30	3	1	6	1,5814	0,81	
33,78	2	0	4	2,6512	0,30	58,78	3	0	7	1,5696	0,33	
33,85	2	1	2	2,6463	1,59	58,82	6	1	0	1,5687	0,42	
34,14	4	0	0	2,6245	0,74	58,95	3	2	1	1,5654	0,27	
34,56	1	1	3	2,5933	26,23	59,31	5	1	4	1,5569	0,71	
34,93	4	0	1	2,5667	0,76	59,34	6	1	1	1,5561	0,45	
36,84	3	1	1	2,4377	13,00	59,37	1	1	7	1,5554	4,64	
37,22	4	0	2	2,4137	3,89	59,55	2	2	3	1,5511	0,17	
37,56	1	0	5	2,3930	0,23	60,18	0	0	8	1,5365	2,68	
37,70	2	1	3	2,3844	4,80	60,34	0	2	4	1,5326	12,49	
38,98	3	0	4	2,3088	0,12	60,52	3	2	2	1,5287	25,58	
39,04	3	1	2	2,3055	1,31	60,86	6	0	4	1,5209	6,97	
39,77	1	1	4	2,2645	6,20	60,89	1	0	8	1,5203	8,12	
40,49	2	0	5	2,2259	0,25	61,05	1	2	4	1,5166	1,49	
40,80	4	0	3	2,2101	0,85	61,50	2	1	7	1,5067	0,35	
42,48	3	1	3	2,1261	10,95	62,30	7	0	1	1,4892	0,51	
42,58	2	1	4	2,1214	30,32	62,98	2	0	8	1,4747	0,44	

Pos. [$^{\circ}2\theta$]	h	k	l	d-Wert [\AA]	rel. Int. [%]	Pos. [$^{\circ}2\theta$]	h	k	l	d-Wert [\AA]	rel. Int. [%]
42,87	4	1	0	2,1076	20,57	63,07	3	2	3	1,4729	0,37
43,53	4	1	1	2,0773	8,52	63,24	4	1	6	1,4692	2,70
43,69	5	0	1	2,0700	0,10	63,36	4	2	0	1,4667	1,12
44,18	0	0	6	2,0483	0,68	63,44	6	1	3	1,4650	0,21
44,87	0	1	5	2,0182	5,13	63,81	7	0	2	1,4575	0,69
45,06	1	0	6	2,0104	0,32	63,87	4	2	1	1,4563	0,14
45,41	4	0	4	1,9958	0,47	63,91	5	1	5	1,4554	0,12
45,46	4	1	2	1,9937	1,48	64,95	3	1	7	1,4347	2,75
45,61	5	0	2	1,9872	0,80	65,36	4	2	2	1,4266	1,32
45,74	1	1	5	1,9820	0,36	65,58	1	2	5	1,4223	0,42
46,96	3	1	4	1,9334	0,64	66,39	3	0	8	1,4070	0,39
47,61	2	0	6	1,9083	9,51	66,55	3	2	4	1,4040	0,14
48,27	2	1	5	1,8839	6,17	66,91	6	1	4	1,3972	1,26
48,53	4	1	3	1,8743	0,97	66,94	1	1	8	1,3968	1,75
48,68	5	0	3	1,8689	0,43	67,60	2	2	5	1,3847	0,18
50,85	4	0	5	1,7943	0,40	67,81	4	2	3	1,3809	0,62
51,08	5	1	1	1,7865	2,33	68,28	7	1	1	1,3726	1,11
51,66	0	2	0	1,7681	2,92	68,93	2	1	8	1,3611	1,73
51,66	3	0	6	1,7680	29,07	69,30	5	1	6	1,3548	0,52
52,22	6	0	0	1,7502	11,12	69,32	1	0	9	1,3544	0,23
52,28	3	1	5	1,7485	1,61	69,72	7	1	2	1,3476	3,07
52,30	1	1	6	1,7478	13,12	69,74	5	0	7	1,3473	0,38

Tabelle A 19: Gitterparameter und Reflexliste von BaGd₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Barium Gadolinium Oxid				BaGd ₂ O ₄			GoF = 1,19				
Pnma				Z = 4	a = 10,488(9) Å	b = 3,515(4) Å	c = 12,265(3) Å				
				V = 452,25(2) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °				
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,44	0	0	2	6,1303	0,33	52,29	6	0	0	1,7480	11,84
16,74	1	0	2	5,2924	0,24	52,47	1	1	6	1,7424	13,96
16,90	2	0	0	5,2427	2,43	52,76	4	1	4	1,7335	18,12
22,29	2	0	2	3,9848	6,75	52,84	5	0	4	1,7312	1,70
26,36	0	1	1	3,3786	11,02	52,94	5	1	2	1,7282	13,72
27,72	1	1	1	3,2159	8,78	54,78	2	1	6	1,6745	4,87
29,10	0	0	4	3,0658	47,74	55,06	2	2	0	1,6664	0,14
29,39	3	0	2	3,0368	100,00	55,72	5	1	3	1,6483	3,10
30,35	1	0	4	2,9426	6,06	57,09	4	0	6	1,6121	2,26
30,51	1	1	2	2,9281	68,32	57,24	2	2	2	1,6081	0,81
30,60	2	1	0	2,9196	29,79	57,72	4	1	5	1,5960	2,65
31,47	2	1	1	2,8402	8,34	58,48	3	1	6	1,5770	0,52
33,71	3	0	3	2,6568	0,37	58,96	6	1	0	1,5652	0,56
33,84	2	0	4	2,6467	0,32	59,47	5	1	4	1,5531	0,36
33,98	2	1	2	2,6360	1,50	59,49	6	1	1	1,5526	1,59
34,17	4	0	0	2,6218	0,45	59,56	1	1	7	1,5508	3,21
34,70	1	1	3	2,5830	24,38	60,33	0	0	8	1,5330	2,35
34,97	4	0	1	2,5639	0,51	60,69	0	2	4	1,5248	10,41
36,97	3	1	1	2,4295	10,76	60,85	3	2	2	1,5212	20,88
37,27	4	0	2	2,4107	3,14	60,96	6	0	4	1,5186	9,50
37,63	1	0	5	2,3883	0,43	61,04	1	0	8	1,5169	2,88
37,84	2	1	3	2,3759	3,95	61,05	6	1	2	1,5165	0,25
39,17	3	1	2	2,2980	0,95	61,39	1	2	4	1,5089	1,44
39,92	1	1	4	2,2564	5,83	63,13	2	0	8	1,4715	0,30
42,62	3	1	3	2,1195	9,34	63,43	4	1	6	1,4653	2,76
42,73	2	1	4	2,1144	31,67	63,48	2	2	4	1,4642	0,11
43,00	4	1	0	2,1016	20,41	63,50	5	0	6	1,4639	0,29
43,66	4	1	1	2,0714	7,23	63,60	6	1	3	1,4617	0,21
44,28	0	0	6	2,0440	0,10	63,91	7	0	2	1,4555	0,34
45,03	0	1	5	2,0115	4,20	65,15	3	1	7	1,4307	2,35
45,16	1	0	6	2,0062	0,22	65,69	4	2	2	1,4202	0,77
45,48	4	0	4	1,9927	0,19	66,55	3	0	8	1,4040	0,26
45,59	4	1	2	1,9881	1,28	67,09	6	1	4	1,3940	0,42
45,68	5	0	2	1,9846	0,56	67,16	1	1	8	1,3928	2,10
47,72	2	0	6	1,9044	8,33	68,44	7	1	1	1,3697	0,59
48,43	2	1	5	1,8781	5,62	69,15	2	1	8	1,3573	2,72
48,68	4	1	3	1,8691	0,73	69,50	5	1	6	1,3514	3,06
51,22	5	1	1	1,7821	1,91	69,81	7	0	4	1,3462	0,43
51,77	3	0	6	1,7645	16,31	69,89	7	1	2	1,3448	5,49
51,99	0	2	0	1,7575	15,80						

Tabelle A 20: Gitterparameter und Reflexliste von BaDy₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Barium Dysprosium Oxid				BaDy ₂ O ₄			GoF = 1,12				
Pnma				Z = 4	a = 10,419(6) Å	b = 3,472(0) Å	c = 12,144(5) Å				
				V = 439,34(4) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °				
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
11,19	1	0	1	7,8992	1,02	53,29	4	1	4	1,7176	6,98
14,59	0	0	2	6,0672	1,35	53,42	5	1	2	1,7137	10,74
16,90	1	0	2	5,2426	0,94	53,51	1	0	7	1,7110	0,11
17,02	2	0	0	5,2061	2,81	54,05	1	2	1	1,6952	0,55
22,48	2	0	2	3,9518	7,53	54,98	0	2	2	1,6688	0,80
23,57	1	0	3	3,7715	0,63	55,39	2	1	6	1,6574	4,62
26,69	3	0	1	3,3378	4,44	55,74	1	2	2	1,6478	0,24
26,70	0	1	1	3,3367	3,69	55,78	2	2	0	1,6466	0,61
27,90	2	0	3	3,1952	0,93	56,24	5	1	3	1,6343	2,86
28,06	1	1	1	3,1777	7,22	56,34	2	2	1	1,6317	0,91
29,41	0	0	4	3,0349	54,81	57,64	4	0	6	1,5980	2,88
29,62	3	0	2	3,0136	100,00	57,73	6	0	3	1,5956	0,47
30,66	1	0	4	2,9138	7,74	57,99	2	2	2	1,5892	1,55
30,87	1	1	2	2,8942	53,74	58,31	5	0	5	1,5813	1,76
30,94	2	1	0	2,8880	14,28	58,31	4	1	5	1,5812	1,08
31,82	2	1	1	2,8097	6,23	58,49	1	2	3	1,5768	0,16
33,99	3	0	3	2,6351	0,72	59,11	3	1	6	1,5616	1,52
34,17	2	0	4	2,6223	1,06	59,48	6	1	0	1,5529	1,34
34,36	2	1	2	2,6080	1,71	59,52	3	0	7	1,5518	0,34
34,41	4	0	0	2,6040	0,70	60,01	6	1	1	1,5403	1,82
35,11	1	1	3	2,5541	17,89	60,03	3	2	1	1,5400	0,46
37,34	3	1	1	2,4060	8,74	60,25	1	1	7	1,5347	3,00
37,55	4	0	2	2,3932	3,62	60,67	2	2	3	1,5253	0,54
38,02	1	0	5	2,3648	0,81	61,00	0	0	8	1,5178	3,51
38,25	2	1	3	2,3509	2,94	61,47	6	0	4	1,5072	14,73
39,40	3	0	4	2,2852	0,67	61,49	0	2	4	1,5068	3,50
39,57	3	1	2	2,2757	0,97	61,60	6	1	2	1,5044	13,92
40,38	1	1	4	2,2318	5,06	61,61	3	2	2	1,5041	2,12
40,98	2	0	5	2,2008	0,24	61,71	1	0	8	1,5019	3,32
41,19	4	0	3	2,1899	0,44	62,20	1	2	4	1,4912	1,73
43,06	3	1	3	2,0989	7,80	62,39	2	1	7	1,4871	0,87
43,20	2	1	4	2,0924	22,86	62,86	7	0	1	1,4772	1,11
43,41	4	1	0	2,0831	14,99	63,82	2	0	8	1,4572	1,49
44,07	5	0	1	2,0534	3,90	64,10	5	0	6	1,4517	2,62
44,07	4	1	1	2,0531	2,08	64,10	4	1	6	1,4516	1,28
44,75	0	0	6	2,0236	0,50	64,19	6	1	3	1,4498	0,45
45,55	3	0	5	1,9900	2,24	64,20	3	2	3	1,4496	0,15
45,55	0	1	5	1,9897	2,19	64,40	7	0	2	1,4455	0,82
45,88	4	0	4	1,9765	0,21	64,46	4	2	0	1,4443	0,24
46,02	5	0	2	1,9706	1,29	64,49	4	0	7	1,4437	0,35
46,03	4	1	2	1,9704	0,96	64,73	5	1	5	1,4390	0,58
46,42	1	1	5	1,9544	0,38	64,97	4	2	1	1,4342	0,71
47,60	3	1	4	1,9088	1,69	65,88	3	1	7	1,4167	2,77
48,21	2	0	6	1,8862	9,38	66,10	6	0	5	1,4124	0,86
48,97	2	1	5	1,8588	4,40	66,49	4	2	2	1,4051	1,27
49,14	5	0	3	1,8524	0,72	66,80	1	2	5	1,3993	0,25
49,15	4	1	3	1,8522	0,43	66,93	7	0	3	1,3968	0,32
51,41	4	0	5	1,7761	0,34	67,26	3	0	8	1,3908	0,67
51,68	5	1	1	1,7674	1,78	67,72	6	1	4	1,3825	0,41
52,28	3	0	6	1,7484	16,07	67,73	3	2	4	1,3823	0,94
52,68	6	0	0	1,7362	19,96	67,95	1	1	8	1,3785	2,29
52,70	0	2	0	1,7356	1,59	68,83	2	2	5	1,3629	0,55

Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
53,00	3	1	5	1,7264	0,77	68,98	4	2	3	1,3603	0,71
53,07	1	1	6	1,7241	9,86	69,04	7	1	1	1,3593	0,51
53,25	6	0	1	1,7187	4,45	69,96	2	1	8	1,3436	2,82
53,29	5	0	4	1,7178	5,17						

Tabelle A 21: Gitterparameter und Reflexliste von BaY₂O₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Barium Yttrium Oxid						BaY ₂ O ₄					GoF = 1,19		
Pnma						Z = 4	a = 10,394(8) Å	b = 3,450(6) Å	c = 12,116(0) Å				
						V = 434,57(5) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$				
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]		
11,21	1	0	1	7,8851	1,06	53,42	5	0	4	1,7139	4,02		
14,62	0	0	2	6,0556	1,56	53,47	4	1	4	1,7122	8,51		
16,93	1	0	2	5,2322	9,21	53,61	5	1	2	1,7083	7,11		
17,05	2	0	0	5,1956	0,81	53,64	1	0	7	1,7072	1,00		
18,57	2	0	1	4,7750	0,30	54,40	1	2	1	1,6853	0,64		
22,53	2	0	2	3,9436	10,05	55,10	6	0	2	1,6655	0,47		
23,62	1	0	3	3,7636	0,81	55,33	0	2	2	1,6592	0,34		
26,74	3	0	1	3,3307	2,61	55,58	2	1	6	1,6523	3,59		
26,85	0	1	1	3,3179	12,63	55,95	2	0	7	1,6421	0,51		
27,96	2	0	3	3,1884	0,95	56,09	1	2	2	1,6384	0,59		
28,21	1	1	1	3,1608	12,52	56,13	2	2	0	1,6373	0,42		
29,47	0	0	4	3,0284	50,89	56,43	5	1	3	1,6292	3,36		
29,68	3	0	2	3,0071	100,00	56,69	2	2	1	1,6225	0,13		
30,73	1	0	4	2,9075	7,97	57,78	4	0	6	1,5944	3,07		
31,02	1	1	2	2,8804	36,61	58,33	2	2	2	1,5806	0,87		
31,09	2	1	0	2,8742	12,38	58,45	5	0	5	1,5777	0,58		
31,98	2	1	1	2,7966	10,64	58,51	4	1	5	1,5764	2,50		
34,07	3	0	3	2,6293	1,05	58,84	1	2	3	1,5683	0,67		
34,24	2	0	4	2,6166	1,27	59,31	3	1	6	1,5568	0,56		
34,49	4	0	0	2,5983	2,38	59,67	3	0	7	1,5483	0,26		
34,51	2	1	2	2,5967	2,04	59,68	6	1	0	1,5482	0,79		
35,26	1	1	3	2,5433	31,52	60,21	6	1	1	1,5357	1,99		
37,50	3	1	1	2,3963	15,22	60,38	3	2	1	1,5319	0,44		
37,64	4	0	2	2,3879	4,21	60,45	1	1	7	1,5302	3,69		
38,11	1	0	5	2,3596	0,70	61,02	2	2	3	1,5173	0,16		
38,41	2	1	3	2,3417	4,31	61,15	0	0	8	1,5144	1,88		
39,49	3	0	4	2,2802	0,35	61,63	6	0	4	1,5037	9,00		
39,73	3	1	2	2,2670	1,09	61,80	6	1	2	1,4999	1,94		
40,54	1	1	4	2,2234	3,96	61,84	0	2	4	1,4991	1,92		
41,07	2	0	5	2,1960	0,51	61,86	1	0	8	1,4986	7,03		
41,28	4	0	3	2,1851	0,96	61,96	3	2	2	1,4964	13,30		
43,23	3	1	3	2,0913	12,98	62,55	1	2	4	1,4837	0,94		
43,37	2	1	4	2,0849	16,68	62,60	2	1	7	1,4827	0,34		
43,57	4	1	0	2,0756	11,00	63,02	7	0	1	1,4738	0,55		
44,17	5	0	1	2,0488	0,87	63,98	2	0	8	1,4539	0,15		
44,24	4	1	1	2,0458	9,78	64,26	5	0	6	1,4484	0,94		
44,85	0	0	6	2,0191	0,37	64,31	4	1	6	1,4474	1,18		
45,65	3	0	5	1,9855	0,86	64,56	3	2	3	1,4424	1,31		
45,72	0	1	5	1,9828	4,56	64,57	7	0	2	1,4422	0,12		
45,98	4	0	4	1,9721	1,68	64,82	4	2	0	1,4373	0,98		
46,13	5	0	2	1,9662	0,50	64,94	5	1	5	1,4348	0,12		
46,20	4	1	2	1,9635	1,22	65,33	4	2	1	1,4273	0,20		
46,59	1	1	5	1,9477	0,86	66,09	3	1	7	1,4126	3,23		
47,77	3	1	4	1,9023	0,71	66,27	6	0	5	1,4092	0,35		
48,32	2	0	6	1,8821	11,10	66,85	4	2	2	1,3984	1,12		
49,14	2	1	5	1,8526	6,88	67,11	7	0	3	1,3937	0,19		

Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
49,32	4	1	3	1,8461	1,02	67,44	3	0	8	1,3876	0,36
51,53	4	0	5	1,7721	0,61	67,94	6	1	4	1,3785	0,53
51,86	5	1	1	1,7616	2,81	68,10	3	2	4	1,3758	0,21
52,41	3	0	6	1,7445	12,74	68,17	1	1	8	1,3745	1,42
52,80	6	0	0	1,7323	10,38	69,19	2	2	5	1,3566	0,46
53,04	0	2	0	1,7251	10,10	69,27	7	1	1	1,3554	0,78
53,26	1	1	6	1,7187	7,22	69,34	4	2	3	1,3541	0,34

Tabelle A 22: Gitterparameter und Reflexliste von BaSc₂O₄ (rel. Int. > 1,0 %)

Barium Scandium Oxid						BaSc ₂ O ₄					GoF = 1,50	
C2/c						Z = 12	a = 9,834(6) Å	b = 5,815(0) Å	c = 20,571(8) Å			
						V = 1176,46(6) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 89,90(6)^\circ$	$\gamma = 90^\circ$			
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	
17,24	0	0	4	5,1385	9,89	49,72	-5	1	2	1,8324	1,50	
19,72	1	1	2	4,4989	15,15	49,72	1	3	3	1,8322	8,11	
19,73	-1	1	2	4,4960	4,41	50,35	4	2	3	1,8108	6,83	
20,00	2	0	2	4,4359	3,50	50,77	-5	1	3	1,7968	3,87	
20,03	-2	0	2	4,4303	10,39	50,78	0	2	9	1,7965	5,38	
21,97	1	1	3	4,0418	35,40	51,12	3	1	9	1,7853	2,06	
21,99	-1	1	3	4,0387	3,29	51,18	1	3	4	1,7834	2,10	
24,81	1	1	4	3,5864	38,70	51,20	-3	1	9	1,7828	2,36	
24,83	-1	1	4	3,5834	8,57	51,44	-4	0	8	1,7751	1,10	
25,03	2	0	4	3,5550	4,72	52,17	1	1	11	1,7519	6,93	
25,07	-2	0	4	3,5492	34,16	52,21	-5	1	4	1,7505	4,08	
25,98	0	0	6	3,4267	4,53	53,03	-1	3	5	1,7256	14,64	
28,05	1	1	5	3,1781	4,38	53,60	4	2	5	1,7083	1,76	
28,08	-1	1	5	3,1755	47,78	53,66	-4	2	5	1,7067	14,18	
30,74	0	2	0	2,9061	4,56	53,96	5	1	5	1,6978	6,88	
31,05	0	2	1	2,8776	97,31	54,30	2	2	9	1,6881	2,35	
31,31	3	1	0	2,8543	95,91	54,35	-2	2	9	1,6867	1,89	
31,61	3	1	1	2,8278	36,53	54,94	3	1	10	1,6699	7,98	
31,63	-3	1	1	2,8267	38,51	55,01	3	3	0	1,6681	10,20	
31,63	-1	1	6	2,8263	100,00	55,02	-3	1	10	1,6676	7,85	
31,78	2	0	6	2,8133	87,04	55,20	3	3	1	1,6627	14,03	
31,83	-2	0	6	2,8090	1,25	55,21	-3	3	1	1,6625	13,76	
32,52	3	1	2	2,7514	6,76	55,21	-1	3	6	1,6624	6,65	
32,54	-3	1	2	2,7494	6,41	56,08	6	0	0	1,6387	18,05	
33,46	0	2	3	2,6757	5,76	56,11	5	1	6	1,6378	16,71	
34,01	-3	1	3	2,6338	1,06	56,71	1	1	12	1,6219	11,85	
34,88	0	0	8	2,5704	16,29	56,88	-2	0	12	1,6176	9,66	
35,39	1	1	7	2,5342	2,66	57,70	1	3	7	1,5965	1,23	
35,42	-1	1	7	2,5324	33,47	57,72	-1	3	7	1,5960	12,04	
35,45	0	2	4	2,5300	1,62	58,25	4	2	7	1,5826	1,90	
35,93	3	1	4	2,4971	5,68	58,32	-4	2	7	1,5809	15,78	
35,98	-3	1	4	2,4941	6,06	58,41	4	0	10	1,5786	4,34	
36,14	2	2	1	2,4837	2,59	58,59	5	1	7	1,5743	6,44	
36,14	-2	2	1	2,4832	7,12	58,66	0	2	11	1,5725	3,89	
37,58	4	0	2	2,3912	14,77	58,68	-5	1	7	1,5721	1,21	
37,61	-4	0	2	2,3895	1,34	58,96	3	1	11	1,5652	2,22	
38,28	-2	2	3	2,3495	43,82	59,05	-3	1	11	1,5631	2,38	
38,38	-3	1	5	2,3435	1,41	61,37	5	1	8	1,5096	1,26	
39,36	1	1	8	2,2872	2,92	61,40	1	1	13	1,5089	4,97	
39,39	-1	1	8	2,2857	5,58	61,93	-2	2	11	1,4972	14,37	
39,50	2	0	8	2,2794	4,01	64,01	0	4	0	1,4535	11,83	
39,56	-2	0	8	2,2764	1,83	64,19	0	4	1	1,4498	1,97	
40,06	-2	2	4	2,2489	1,39	65,31	6	2	0	1,4275	1,08	

Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
40,63	4	0	4	2,2188	15,62	65,48	6	2	1	1,4243	14,56
40,68	-4	0	4	2,2160	6,88	65,50	-6	2	1	1,4240	12,70
41,09	3	1	6	2,1950	1,58	66,23	1	1	14	1,4100	1,67
41,15	-3	1	6	2,1920	1,55	66,39	4	0	12	1,4070	7,45
42,23	2	2	5	2,1383	61,49	66,39	-2	0	14	1,4070	1,33
42,26	-2	2	5	2,1367	5,60	67,33	0	2	13	1,3896	3,67
44,00	0	0	10	2,0565	11,64	67,60	3	1	13	1,3847	1,23
44,79	2	2	6	2,0216	2,72	67,69	-3	1	13	1,3830	1,24
45,41	-4	0	6	1,9959	44,73	67,88	-5	1	10	1,3797	1,41
47,68	2	2	7	1,9056	46,02	69,41	-5	3	3	1,3529	2,70
47,73	-2	2	7	1,9041	7,71	69,71	3	3	9	1,3479	1,86
47,76	1	1	10	1,9027	3,54	69,77	-3	3	9	1,3469	1,88
47,79	-1	1	10	1,9016	1,15	69,87	-2	4	4	1,3451	2,15
47,94	-2	0	10	1,8961	3,20						

Tabelle A 23: Gitterparameter und Reflexliste von CaLaAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Calcium Lanthan Aluminat			CaLaAlO ₄				GoF = 1,23				
I4/mmm	Z = 2		a = 3,715(1) Å		b = 3,715(1) Å		c = 12,338(3) Å				
	V = 170,29(3) Å ³		$\alpha = 90^\circ$		$\beta = 90^\circ$		$\gamma = 90^\circ$				
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,35	0	0	2	6,1685	3,32	49,00	2	0	0	1,8575	34,96
25,01	1	0	1	3,5571	36,83	55,79	2	1	1	1,6466	6,03
28,92	0	0	4	3,0844	18,39	56,81	1	1	6	1,6192	9,96
32,45	1	0	3	2,7568	100,00	57,86	1	0	7	1,5924	8,68
34,10	1	1	0	2,6269	69,91	57,90	2	0	4	1,5913	8,96
37,17	1	1	2	2,4169	17,58	59,93	0	0	8	1,5423	6,34
44,00	0	0	6	2,0563	12,28	60,01	2	1	3	1,5405	16,30
44,02	1	0	5	2,0555	12,21	67,95	2	0	6	1,3784	6,71
45,31	1	1	4	1,9999	44,11	67,96	2	1	5	1,3782	6,75

Tabelle A 24: Gitterparameter und Reflexliste von CaNdAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Calcium Neodym Aluminat			CaNdAlO ₄				GoF = 1,08				
I4/mmm	Z = 2		a = 3,681(3) Å		b = 3,681(3) Å		c = 12,154(6) Å				
	V = 164,71(8) Å ³		$\alpha = 90^\circ$		$\beta = 90^\circ$		$\gamma = 90^\circ$				
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,56	0	0	2	6,0770	1,56	51,86	2	0	2	1,7616	0,44
25,26	1	0	1	3,5231	41,02	56,35	2	1	1	1,6314	7,23
29,37	0	0	4	3,0386	20,58	57,61	1	1	6	1,5987	10,91
32,85	1	0	3	2,7245	100,00	58,59	2	0	4	1,5743	10,13
34,43	1	1	0	2,6030	80,47	58,75	1	0	7	1,5704	9,92
37,56	1	1	2	2,3928	11,24	60,67	2	1	3	1,5252	27,45
44,63	1	0	5	2,0285	15,11	60,93	0	0	8	1,5193	2,56
44,70	0	0	6	2,0257	13,35	68,82	2	1	5	1,3631	6,32
45,87	1	1	4	1,9769	49,23	68,87	2	0	6	1,3623	8,13
49,48	2	0	0	1,8406	39,64						

Tabelle A 25: Gitterparameter und Reflexliste von CaSmAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Calcium Samarium Aluminat			CaSmAlO ₄			GoF = 0,99					
I4/mmm			Z = 2	a = 3,670(6) Å	b = 3,670(6) Å	c = 12,061(5) Å					
			V = 162,50(7) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °					
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,65	0	0	2	6,0429	0,61	52,02	2	0	2	1,7566	0,30
25,31	1	0	1	3,5156	43,83	56,51	2	1	1	1,6272	7,28
29,57	0	0	4	3,0183	20,87	57,96	1	1	6	1,5900	10,46
32,99	1	0	3	2,7131	100,00	58,83	2	0	4	1,5684	8,97
34,50	1	1	0	2,5976	78,42	59,16	1	0	7	1,5604	10,32
37,67	1	1	2	2,3858	11,27	60,88	2	1	3	1,5203	25,57
44,90	1	0	5	2,0171	13,88	61,42	0	0	8	1,5083	2,15
45,03	0	0	6	2,0114	12,59	69,14	2	1	5	1,3575	4,79
46,08	1	1	4	1,9682	46,75	69,24	2	0	6	1,3558	9,14
49,61	2	0	0	1,8362	37,39						

Tabelle A 26: Gitterparameter und Reflexliste von CaEuAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Calcium Europium Aluminat			CaEuAlO ₄			GoF = 0,95					
I4/mmm			Z = 2	a = 3,663(7) Å	b = 3,663(7) Å	c = 12,025(1) Å					
			V = 161,40(4) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °					
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,73	0	0	2	6,0096	2,66	52,16	2	0	2	1,7521	0,67
25,40	1	0	1	3,5036	40,10	56,66	2	1	1	1,6233	6,69
29,70	0	0	4	3,0056	20,76	58,15	1	1	6	1,5850	10,70
33,11	1	0	3	2,7037	100,00	59,01	2	0	4	1,5641	8,44
34,60	1	1	0	2,5901	81,63	59,38	1	0	7	1,5552	11,18
37,79	1	1	2	2,3787	11,25	61,06	2	1	3	1,5165	26,73
45,06	1	0	5	2,0102	13,46	61,66	0	0	8	1,5030	2,96
45,21	0	0	6	2,0039	14,25	69,35	2	1	5	1,3540	5,06
46,23	1	1	4	1,9622	47,12	69,46	2	0	6	1,3520	9,71
49,74	2	0	0	1,8316	38,79						

Tabelle A 27: Gitterparameter und Reflexliste von CaGdAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Calcium Gadolinium Aluminat			CaGdAlO ₄			GoF = 0,97					
I4/mmm			Z = 2	a = 3,658(3) Å	b = 3,658(3) Å	c = 12,002(0) Å					
			V = 160,62(6) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °					
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,78	0	0	2	5,9888	2,44	52,27	2	0	2	1,7488	0,77
25,46	1	0	1	3,4953	40,44	56,77	2	1	1	1,6204	7,41
29,78	0	0	4	2,9976	22,42	58,29	1	1	6	1,5818	10,96
33,19	1	0	3	2,6974	100,00	59,13	2	0	4	1,5612	9,60
34,68	1	1	0	2,5847	79,73	59,52	1	0	7	1,5519	12,16
37,87	1	1	2	2,3738	11,15	61,18	2	1	3	1,5137	28,86
45,17	1	0	5	2,0058	14,37	61,81	0	0	8	1,4997	2,91
45,33	0	0	6	1,9992	15,49	69,50	2	1	5	1,3515	7,86
46,33	1	1	4	1,9581	49,37	69,62	2	0	6	1,3495	10,71
49,84	2	0	0	1,8282	41,98						

Tabelle A 28: Gitterparameter und Reflexliste von CaDyAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Calcium Dysprosium Aluminat			CaDyAlO ₄			GoF = 1,23					
I4/mmm	Z = 2	a = 3,647(8) Å	b = 3,647(8) Å	c = 11,909(5) Å							
	V = 158,47(2) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °							
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,86	0	0	2	5,9556	1,42	49,96	2	0	0	1,8240	40,13
25,52	1	0	1	3,4881	40,40	56,92	2	1	1	1,6163	7,42
29,99	0	0	4	2,9776	19,86	58,64	1	1	6	1,5731	11,73
33,33	1	0	3	2,6862	100,00	59,37	2	0	4	1,5553	8,84
34,75	1	1	0	2,5795	82,44	59,94	1	0	7	1,5419	11,36
37,98	1	1	2	2,3670	11,86	61,39	2	1	3	1,5090	28,81
45,44	1	0	5	1,9945	15,32	62,32	0	0	8	1,4887	3,63
45,67	0	0	6	1,9850	13,74	69,82	2	1	5	1,3460	4,99
46,54	1	1	4	1,9496	48,72	70,00	2	0	6	1,3430	9,82

Tabelle A 29: Gitterparameter und Reflexliste von CaYAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Calcium Yttrium Aluminat			CaYAlO ₄			GoF = 1,68					
I4/mmm	Z = 2	a = 3,643(2) Å	b = 3,643(2) Å	c = 11,895(6) Å							
	V = 157,89(2) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °							
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,92	0	0	2	5,9348	5,41	50,06	2	0	0	1,8205	50,26
25,58	1	0	1	3,4791	25,01	52,53	2	0	2	1,7408	0,38
30,06	0	0	4	2,9707	14,81	57,04	2	1	1	1,6134	5,06
33,41	1	0	3	2,6802	100,00	58,75	1	1	6	1,5704	13,54
34,83	1	1	0	2,5738	88,61	59,49	2	0	4	1,5526	7,10
38,07	1	1	2	2,3620	12,38	60,06	1	0	7	1,5393	9,67
45,53	1	0	5	1,9906	17,83	61,51	2	1	3	1,5063	31,11
45,76	0	0	6	1,9813	19,60	62,43	0	0	8	1,4862	3,72
46,64	1	1	4	1,9459	50,29	69,95	2	1	5	1,3437	7,01

Tabelle A 30: Gitterparameter und Reflexliste von CaYbAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Calcium Ytterbium Aluminat			CaYbAlO ₄			GoF = 2,17					
I4/mmm	Z = 2	a = 3,643(0) Å	b = 3,643(0) Å	c = 11,755(2) Å							
	V = 156,00(4) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °							
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
15,06	0	0	2	5,8796	0,48	50,03	2	0	0	1,8216	30,77
25,57	1	0	1	3,4804	36,20	52,55	2	0	2	1,7400	0,13
30,39	0	0	4	2,9393	26,61	57,02	2	1	1	1,6139	6,57
33,56	1	0	3	2,6684	100,00	59,20	1	1	6	1,5595	10,85
34,79	1	1	0	2,5763	60,25	59,67	2	0	4	1,5483	7,83
38,11	1	1	2	2,3596	9,03	60,67	1	0	7	1,5252	12,63
45,90	1	0	5	1,9756	12,69	61,60	2	1	3	1,5044	25,04
46,30	0	0	6	1,9594	16,46	63,23	0	0	8	1,4695	3,25
46,86	1	1	4	1,9373	44,35						

Tabelle A 31: Gitterparameter und Reflexliste von SrLaAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Strontium Lanthan Aluminat			SrLaAlO ₄			GoF = 1,24					
I4/mmm			Z = 2	a = 3,755(2) Å	b = 3,755(2) Å	c = 12,642(9) Å					
			V = 178,28(3) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °					
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,01	0	0	2	6,3177	0,35	50,69	2	0	2	1,7996	0,48
24,72	1	0	1	3,5986	45,76	55,13	2	1	1	1,6645	8,40
28,22	0	0	4	3,1598	23,68	55,65	1	1	6	1,6504	9,21
31,90	1	0	3	2,8030	100,00	56,50	1	0	7	1,6275	10,70
33,74	1	1	0	2,6547	70,35	57,01	2	0	4	1,6141	11,13
36,69	1	1	2	2,4476	8,15	58,35	0	0	8	1,5802	2,96
42,89	0	0	6	2,1068	12,09	59,18	2	1	3	1,5599	24,37
43,10	1	0	5	2,0970	10,20	66,67	2	0	6	1,4017	7,84
44,54	1	1	4	2,0328	45,58	66,83	2	1	5	1,3988	3,81
48,45	2	0	0	1,8773	32,32	69,12	1	1	8	1,3579	3,37

Tabelle A 32: Gitterparameter und Reflexliste von SrNdAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Strontium Neodym Aluminat			SrNdAlO ₄			GoF = 1,08					
I4/mmm			Z = 2	a = 3,722(2) Å	b = 3,722(2) Å	c = 12,490(9) Å					
			V = 173,05(8) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °					
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,20	0	0	2	6,2323	0,55	51,20	2	0	2	1,7827	0,32
24,97	1	0	1	3,5630	47,83	55,69	2	1	1	1,6493	8,50
28,59	0	0	4	3,1196	25,24	56,32	1	1	6	1,6321	9,76
32,26	1	0	3	2,7725	100,00	57,23	1	0	7	1,6084	12,04
34,06	1	1	0	2,6298	72,05	57,64	2	0	4	1,5980	10,32
37,06	1	1	2	2,4236	8,89	59,15	0	0	8	1,5607	2,86
43,46	0	0	6	2,0805	11,98	59,81	2	1	3	1,5451	26,17
43,63	1	0	5	2,0730	11,19	67,47	2	0	6	1,3870	7,97
45,04	1	1	4	2,0113	46,02	67,59	2	1	5	1,3848	3,25
48,93	2	0	0	1,8601	32,50						

Tabelle A 33: Gitterparameter und Reflexliste von SrSmAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Strontium Samarium Aluminat			SrSmAlO ₄			GoF = 0,96					
I4/mmm			Z = 2	a = 3,707(3) Å	b = 3,707(3) Å	c = 12,421(7) Å					
			V = 170,72(9) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °					
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,27	0	0	2	6,2031	0,38	51,42	2	0	2	1,7757	0,13
25,06	1	0	1	3,5501	48,10	55,92	2	1	1	1,6430	8,56
28,74	0	0	4	3,1036	26,63	56,62	1	1	6	1,6243	10,61
32,41	1	0	3	2,7606	100,00	57,55	1	0	7	1,6002	12,93
34,19	1	1	0	2,6202	72,07	57,90	2	0	4	1,5913	10,64
37,22	1	1	2	2,4141	8,42	59,50	0	0	8	1,5523	3,32
43,70	0	0	6	2,0695	13,40	60,08	2	1	3	1,5388	27,38
43,85	1	0	5	2,0631	11,71	67,82	2	0	6	1,3807	8,48
45,25	1	1	4	2,0025	47,93	67,93	2	1	5	1,3788	3,93
49,12	2	0	0	1,8531	33,09						

Tabelle A 34: Gitterparameter und Reflexliste von SrEuAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Strontium Europium Aluminat			SrEuAlO ₄			GoF = 1,05					
I4/mmm			Z = 2	a = 3,701(5) Å	b = 3,701(5) Å	c = 12,399(6) Å					
			V = 169,89(1) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °					
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,27	0	0	2	6,2012	0,28	51,49	2	0	2	1,7735	0,26
25,08	1	0	1	3,5473	48,46	56,00	2	1	1	1,6409	8,17
28,77	0	0	4	3,1002	24,19	56,71	1	1	6	1,6220	9,27
32,44	1	0	3	2,7577	100,00	57,64	1	0	7	1,5979	11,65
34,23	1	1	0	2,6176	74,47	57,99	2	0	4	1,5892	9,28
37,26	1	1	2	2,4115	9,67	59,60	0	0	8	1,5500	2,47
43,77	0	0	6	2,0667	12,28	60,16	2	1	3	1,5368	25,06
43,91	1	0	5	2,0604	10,30	67,93	2	0	6	1,3788	7,93
45,31	1	1	4	2,0000	45,19	68,04	2	1	5	1,3769	3,46
49,19	2	0	0	1,8509	32,38						

Tabelle A 35: Gitterparameter und Reflexliste von SrGdAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Strontium Gadolinium Aluminat			SrGdAlO ₄			GoF = 1,47					
I4/mmm			Z = 2	a = 3,696(1) Å	b = 3,696(1) Å	c = 12,366(9) Å					
			V = 168,94(5) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °					
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,34	0	0	2	6,1715	0,57	51,60	2	0	2	1,7698	0,78
25,15	1	0	1	3,5375	47,78	56,11	2	1	1	1,6377	9,18
28,88	0	0	4	3,0889	25,47	56,87	1	1	6	1,6178	11,26
32,54	1	0	3	2,7497	100,00	57,82	1	0	7	1,5934	14,03
34,31	1	1	0	2,6115	70,82	58,13	2	0	4	1,5857	11,28
37,35	1	1	2	2,4057	10,56	59,80	0	0	8	1,5453	4,70
43,92	0	0	6	2,0600	13,76	60,30	2	1	3	1,5336	28,63
44,04	1	0	5	2,0544	12,27	68,11	2	0	6	1,3755	8,55
45,43	1	1	4	1,9949	48,93	68,20	2	1	5	1,3739	5,23
49,29	2	0	0	1,8471	34,07						

Tabelle A 36: Gitterparameter und Reflexliste von SrDyAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Strontium Dysprosium Aluminat			SrDyAlO ₄			GoF = 1,86					
I4/mmm			Z = 2	a = 3,685(6) Å	b = 3,685(6) Å	c = 12,301(4) Å					
			V = 167,09(6) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °					
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
14,39	0	0	2	6,1493	0,20	49,42	2	0	0	1,8427	37,07
25,21	1	0	1	3,5301	46,95	56,27	2	1	1	1,6336	10,43
29,01	0	0	4	3,0750	23,14	57,12	1	1	6	1,6113	11,94
32,65	1	0	3	2,7408	100,00	58,11	1	0	7	1,5862	15,39
34,39	1	1	0	2,6059	71,92	58,33	2	0	4	1,5807	12,04
37,45	1	1	2	2,3994	8,28	60,13	0	0	8	1,5376	3,81
44,14	0	0	6	2,0501	13,39	60,49	2	1	3	1,5293	32,98
44,23	1	0	5	2,0461	10,69	68,40	2	0	6	1,3705	11,52
45,59	1	1	4	1,9881	49,96	68,46	2	1	5	1,3693	4,85

Tabelle A 37: Gitterparameter und Reflexliste von BaLaAlO₄ (rel. Int. > 0,1 %)

Barium Lanthan Aluminat					BaLaAlO ₄					GoF = 1,22	
P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁					Z = 4	a = 5,828(8) Å	b = 7,288(1) Å	c = 9,881(9) Å			
					V = 419,78(8) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °			
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
15,11	0	1	1	5,8586	1,05	53,47	1	4	1	1,7122	10,95
17,67	1	0	1	5,0155	19,83	53,58	0	4	2	1,7090	4,77
17,96	0	0	2	4,9362	1,15	54,28	3	2	1	1,6888	13,25
19,50	1	1	0	4,5480	0,22	54,81	2	2	4	1,6735	5,69
21,49	1	1	1	4,1311	34,70	54,83	3	0	3	1,6731	7,40
21,73	0	1	2	4,0865	15,68	55,13	1	2	5	1,6645	2,06
23,60	1	0	2	3,7663	2,25	55,30	1	3	4	1,6600	25,97
24,42	0	2	0	3,6415	1,27	55,79	0	0	6	1,6466	1,62
26,06	0	2	1	3,4167	7,90	56,03	1	4	2	1,6400	3,01
26,62	1	1	2	3,3457	83,56	56,20	2	0	5	1,6353	0,13
28,89	1	2	0	3,0881	30,04	56,38	3	1	3	1,6306	0,73
29,76	0	1	3	2,9999	21,73	56,66	2	3	3	1,6232	3,44
30,30	1	2	1	2,9474	100,00	56,81	3	2	2	1,6193	1,23
30,47	0	2	2	2,9311	22,42	57,73	2	1	5	1,5956	16,75
30,67	2	0	0	2,9128	71,28	57,80	0	4	3	1,5940	3,03
31,18	1	0	3	2,8662	89,70	58,17	1	0	6	1,5845	0,21
32,01	2	0	1	2,7939	1,96	59,67	1	1	6	1,5484	5,65
33,09	2	1	0	2,7047	1,17	59,83	2	4	0	1,5446	0,45
34,22	1	2	2	2,6185	8,18	60,13	1	4	3	1,5375	0,60
34,35	2	1	1	2,6087	0,46	60,34	0	3	5	1,5328	0,45
35,76	2	0	2	2,5091	0,11	60,60	3	0	4	1,5269	0,27
36,35	0	0	4	2,4694	0,96	60,63	2	4	1	1,5261	2,45
36,77	0	2	3	2,4425	22,55	60,88	3	2	3	1,5205	0,25
37,89	2	1	2	2,3724	25,92	61,03	3	3	0	1,5170	0,16
38,13	0	3	1	2,3581	29,84	61,78	0	2	6	1,5005	2,36
38,46	0	1	4	2,3387	12,39	61,83	3	3	1	1,4994	0,88
39,58	2	2	0	2,2751	5,35	62,06	3	1	4	1,4944	1,71
39,99	1	2	3	2,2527	0,37	62,17	2	2	5	1,4920	1,53
40,66	2	2	1	2,2171	8,23	62,32	2	3	4	1,4887	0,75
41,27	1	3	1	2,1859	2,05	62,62	1	3	5	1,4824	0,80
41,40	0	3	2	2,1793	2,18	63,00	2	4	2	1,4742	4,77
41,57	1	1	4	2,1705	12,21	63,39	0	4	4	1,4660	0,11
43,25	2	1	3	2,0902	17,64	63,84	4	0	0	1,4569	7,25
43,77	2	2	2	2,0665	31,53	64,03	1	2	6	1,4531	3,24
44,28	0	2	4	2,0441	4,09	64,17	3	3	2	1,4502	0,22
46,42	0	3	3	1,9545	6,13	64,59	0	5	1	1,4417	0,26
47,07	1	2	4	1,9289	2,31	65,00	2	0	6	1,4336	2,28
47,65	0	1	5	1,9069	13,05	65,26	4	1	0	1,4286	0,66
47,68	3	0	1	1,9058	2,65	65,61	1	4	4	1,4218	0,77
48,46	3	1	0	1,8768	1,10	66,02	4	1	1	1,4139	0,19
48,60	2	2	3	1,8719	14,47	66,32	3	2	4	1,4082	1,02
48,62	1	0	5	1,8711	4,94	66,41	2	1	6	1,4066	0,57
49,39	3	1	1	1,8438	4,11	66,79	1	5	1	1,3995	3,60
49,70	2	3	1	1,8331	16,59	66,85	2	4	3	1,3985	3,42
49,96	2	1	4	1,8240	2,91	66,88	0	5	2	1,3978	0,43
50,04	0	4	0	1,8215	1,17	66,90	4	0	2	1,3974	1,06
50,31	1	1	5	1,8123	3,10	67,55	0	1	7	1,3857	0,54
50,45	3	0	2	1,8076	1,17	67,57	3	0	5	1,3853	0,51
50,94	0	4	1	1,7913	0,85	68,29	4	1	2	1,3724	0,50
52,09	3	1	2	1,7545	12,04	68,32	1	0	7	1,3718	2,88
52,38	2	3	2	1,7452	1,52	68,95	3	1	5	1,3609	0,67
52,60	1	4	0	1,7385	2,27	69,04	1	5	2	1,3592	1,79

Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
52,66	0	2	5	1,7368	2,61	69,70	1	1	7	1,3481	0,88
53,41	3	2	0	1,7140	5,66						

Tabelle A 38: Gitterparameter und Reflexliste von Ca₃La₂(BO₃)₄ (rel. Int. > 2,0 %)

Calcium Lanthan Borat			Ca ₃ La ₂ (BO ₃) ₄			GoF = 1,55					
Pnma			Z = 4	a = 7,259(0) Å	b = 16,064(2) Å	c = 8,675(7) Å					
			V = 1011,66(5) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$					
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
11,01	0	2	0	8,0296	2,44	38,82	2	5	1	2,3180	2,27
19,39	1	2	1	4,5748	3,97	39,02	3	1	1	2,3064	6,83
19,47	0	3	1	4,5559	9,63	39,36	2	4	2	2,2876	3,24
20,46	0	0	2	4,3372	4,62	39,53	0	6	2	2,2782	5,55
22,12	0	4	0	4,0154	12,07	39,83	2	0	3	2,2616	8,63
23,03	1	3	1	3,8588	5,60	41,61	0	0	4	2,1688	2,02
23,29	0	2	2	3,8163	4,35	41,90	2	6	0	2,1544	12,54
23,88	1	0	2	3,7231	21,68	42,00	0	5	3	2,1493	5,36
24,51	2	0	0	3,6290	2,30	42,26	3	3	1	2,1369	8,99
24,52	1	1	2	3,6270	9,74	43,23	2	6	1	2,0909	5,89
25,14	2	1	0	3,5398	3,69	43,52	1	0	4	2,0780	3,41
26,94	2	2	0	3,3071	9,59	43,90	1	1	4	2,0608	23,31
27,19	2	1	1	3,2775	19,22	44,93	3	4	1	2,0157	3,62
28,87	2	2	1	3,0902	6,13	46,45	1	7	2	1,9535	5,07
29,19	1	3	2	3,0568	70,43	46,86	1	3	4	1,9372	17,63
29,63	0	5	1	3,0125	20,44	47,06	2	6	2	1,9295	14,08
29,72	2	3	0	3,0040	11,14	47,61	0	4	4	1,9083	8,56
30,31	0	4	2	2,9467	24,20	47,93	1	6	3	1,8963	13,25
31,41	0	1	3	2,8459	12,01	48,03	2	7	1	1,8928	14,71
31,49	2	3	1	2,8387	100,00	49,05	3	0	3	1,8556	7,02
32,13	2	0	2	2,7834	19,04	49,34	1	4	4	1,8456	4,77
32,14	1	5	1	2,7824	8,73	49,40	3	1	3	1,8434	3,76
32,63	2	1	2	2,7425	8,46	50,43	3	2	3	1,8080	5,38
32,78	1	4	2	2,7303	39,12	51,40	4	0	1	1,7762	6,03
33,25	2	4	0	2,6925	5,26	51,68	1	8	2	1,7673	7,60
33,33	1	0	3	2,6863	13,91	51,74	3	5	2	1,7654	4,86
33,45	0	6	0	2,6771	21,32	51,96	2	3	4	1,7585	3,02
33,80	1	1	3	2,6495	27,64	51,98	3	6	1	1,7578	3,70
34,06	2	2	2	2,6299	15,44	52,12	3	3	3	1,7533	4,58
34,86	2	4	1	2,5715	10,22	52,29	0	9	1	1,7482	5,25
35,20	1	2	3	2,5476	2,29	53,15	2	8	1	1,7220	2,18
35,25	0	3	3	2,5443	4,41	54,38	4	3	1	1,6859	6,05
36,35	2	3	2	2,4696	12,36	54,42	3	4	3	1,6845	5,70
36,93	1	5	2	2,4323	3,33	56,07	4	2	2	1,6388	2,05
37,24	1	6	1	2,4126	2,09	56,62	4	4	1	1,6244	3,43
37,35	2	5	0	2,4055	17,02	59,36	1	4	5	1,5557	2,58
37,42	1	3	3	2,4011	2,78	62,51	4	5	2	1,4846	2,05
38,60	3	0	1	2,3305	32,82						

Tabelle A 39: Gitterparameter und Reflexliste von $\text{Ca}_3\text{Nd}_2(\text{BO}_3)_4$ (rel. Int. > 2,0 %)

Calcium Neodym Borat			$\text{Ca}_3\text{Nd}_2(\text{BO}_3)_4$			GoF = 1,33					
Pnma			Z = 4	a = 7,238(3) Å	b = 15,721(4) Å	c = 8,660(7) Å					
			V = 985,54(6) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$					
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
16,90	1	1	1	5,2406	2,90	46,14	0	8	0	1,9656	3,15
19,54	1	2	1	4,5389	14,13	47,07	1	3	4	1,9292	16,26
19,77	0	3	1	4,4864	16,14	47,24	1	7	2	1,9226	5,25
20,48	0	0	2	4,3329	7,73	47,67	2	6	2	1,9062	16,28
22,59	0	4	0	3,9325	12,18	47,92	0	4	4	1,8969	11,25
23,31	1	3	1	3,8136	14,24	48,53	1	6	3	1,8745	29,87
23,42	0	2	2	3,7949	12,21	48,67	3	5	1	1,8695	2,59
23,91	1	0	2	3,7180	25,72	48,82	2	7	1	1,8640	11,01
24,58	1	1	2	3,6182	14,02	48,99	3	4	2	1,8579	2,15
27,09	2	2	0	3,2889	15,71	49,16	3	0	3	1,8517	14,50
27,27	2	1	1	3,2679	20,00	49,34	2	1	4	1,8456	5,59
27,77	1	4	1	3,2097	5,06	49,53	3	1	3	1,8390	3,31
29,02	2	2	1	3,0748	4,83	49,64	1	4	4	1,8349	9,99
29,43	1	3	2	3,0325	90,52	50,60	3	2	3	1,8024	8,62
29,97	2	3	0	2,9792	13,21	51,54	4	0	1	1,7717	8,14
30,20	0	5	1	2,9567	21,06	51,79	4	2	0	1,7638	2,33
30,68	0	4	2	2,9115	30,90	51,89	4	1	1	1,7605	2,37
31,47	0	1	3	2,8405	4,07	52,18	2	3	4	1,7516	5,43
31,74	2	3	1	2,8172	100,00	52,19	3	5	2	1,7511	5,33
32,20	2	0	2	2,7780	10,89	52,34	2	7	2	1,7466	5,45
32,69	1	5	1	2,7372	12,29	52,36	3	3	3	1,7460	3,15
32,71	2	1	2	2,7356	14,44	52,58	3	6	1	1,7391	8,05
33,14	1	4	2	2,7012	28,48	52,63	1	8	2	1,7376	10,05
33,38	1	0	3	2,6824	16,49	52,82	1	5	4	1,7318	3,74
33,62	2	4	0	2,6633	4,99	52,97	2	8	0	1,7273	10,22
33,87	1	1	3	2,6442	28,58	53,14	1	7	3	1,7221	8,07
34,18	0	6	0	2,6211	24,48	53,46	0	9	1	1,7127	11,38
34,21	2	2	2	2,6193	7,42	53,52	4	3	0	1,7108	2,56
35,23	2	4	1	2,5457	7,31	54,09	2	8	1	1,6940	2,81
35,46	0	3	3	2,5294	3,26	54,58	2	4	4	1,6801	4,42
36,58	2	3	2	2,4545	2,45	54,64	4	3	1	1,6784	2,62
37,42	1	5	2	2,4011	2,67	54,75	1	1	5	1,6753	4,57
37,86	2	5	0	2,3743	17,30	54,75	3	4	3	1,6751	15,08
38,70	3	0	1	2,3249	28,68	54,94	4	0	2	1,6700	2,60
39,14	3	1	1	2,2999	5,77	55,75	1	2	5	1,6475	2,06
39,70	2	4	2	2,2686	4,62	55,93	3	6	2	1,6426	2,04
39,90	2	0	3	2,2575	6,35	56,97	4	4	1	1,6152	4,46
40,43	3	2	1	2,2295	5,56	58,82	4	5	0	1,5687	3,79
42,15	1	6	2	2,1420	2,75	59,39	2	1	5	1,5550	5,83
42,46	0	5	3	2,1271	5,20	59,68	2	9	1	1,5481	2,16
42,50	3	3	1	2,1252	3,09	60,00	3	3	4	1,5405	4,09
42,55	2	6	0	2,1229	13,45	60,72	1	7	4	1,5241	3,15
43,30	0	2	4	2,0880	2,11	61,91	2	3	5	1,4975	3,19
43,87	2	6	1	2,0619	2,38	63,50	1	9	3	1,4639	2,26
43,98	1	1	4	2,0571	19,52	67,68	4	1	4	1,3833	3,11
44,35	1	5	3	2,0408	5,34	69,87	3	9	2	1,3451	3,29
45,16	1	2	4	2,0062	2,48						

Tabelle A 40: Gitterparameter und Reflexliste von $\text{Ca}_3\text{Sm}_2(\text{BO}_3)_4$ (rel. Int. > 2,0 %)

Calcium Samarium Borat						$\text{Ca}_3\text{Sm}_2(\text{BO}_3)_4$				GoF = 1,35	
Pnma						Z = 4	a = 7,224(7) Å	b = 15,592(5) Å	c = 8,650(8) Å		
						V = 974,52(5) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$		
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
11,69	0	1	1	7,5654	5,10	47,57	1	7	2	1,9099	4,43
16,96	1	1	1	5,2250	10,96	47,94	2	6	2	1,8961	7,81
19,63	1	2	1	4,5191	23,62	47,94	2	7	0	1,8961	6,82
19,91	0	3	1	4,4555	16,66	48,07	0	4	4	1,8912	11,18
20,52	0	0	2	4,3257	5,72	48,79	1	6	3	1,8651	26,11
22,79	0	4	0	3,8983	6,84	49,05	2	0	4	1,8556	3,17
23,44	1	3	1	3,7924	26,22	49,15	2	7	1	1,8521	4,36
23,50	0	2	2	3,7825	21,15	49,17	3	4	2	1,8516	4,81
23,96	1	0	2	3,7113	34,90	49,26	3	0	3	1,8485	8,64
24,64	1	1	2	3,6105	12,53	49,42	2	1	4	1,8426	5,95
27,18	2	2	0	3,2778	20,23	49,53	1	8	1	1,8388	4,41
27,34	2	1	1	3,2599	20,99	49,62	3	1	3	1,8356	4,13
27,95	1	4	1	3,1891	7,41	49,80	1	4	4	1,8295	9,73
29,11	2	2	1	3,0651	5,25	50,52	2	2	4	1,8052	3,12
29,55	1	3	2	3,0204	100,00	50,72	3	2	3	1,7986	14,10
30,10	2	3	0	2,9664	15,55	51,38	0	8	2	1,7770	2,61
30,44	0	5	1	2,9338	26,82	51,66	4	0	1	1,7681	5,27
30,85	0	4	2	2,8958	31,15	52,42	3	5	2	1,7442	9,75
31,87	2	3	1	2,8060	89,78	52,67	2	7	2	1,7365	4,78
32,26	2	0	2	2,7727	11,92	52,86	3	6	1	1,7307	17,09
32,78	2	1	2	2,7299	12,48	53,03	1	8	2	1,7256	8,36
32,92	1	5	1	2,7182	23,09	53,22	0	1	5	1,7196	3,79
33,31	1	4	2	2,6879	24,33	53,37	2	8	0	1,7153	14,51
33,43	1	0	3	2,6783	15,42	53,46	1	7	3	1,7126	4,35
33,80	2	4	0	2,6497	7,67	53,80	2	6	3	1,7026	3,09
33,93	1	1	3	2,6396	31,30	53,93	0	9	1	1,6988	16,88
34,30	2	2	2	2,6124	5,25	54,49	1	0	5	1,6826	3,90
34,48	0	6	0	2,5988	32,34	54,74	2	4	4	1,6755	2,59
35,40	2	4	1	2,5335	7,76	54,83	1	1	5	1,6729	8,54
35,57	0	3	3	2,5216	4,46	54,93	3	4	3	1,6702	12,79
37,64	1	5	2	2,3876	2,67	55,85	1	2	5	1,6447	2,34
38,09	2	5	0	2,3606	16,58	56,07	4	4	0	1,6388	2,37
38,78	3	0	1	2,3201	37,11	57,16	4	4	1	1,6102	3,28
39,23	3	1	1	2,2948	5,24	58,77	1	9	2	1,5699	4,54
39,87	2	4	2	2,2595	8,61	59,05	4	5	0	1,5630	3,18
39,97	2	0	3	2,2537	4,96	59,49	2	1	5	1,5527	5,80
40,53	3	2	1	2,2237	5,97	60,14	2	9	1	1,5373	7,33
42,43	1	6	2	2,1288	2,72	61,03	1	7	4	1,5171	2,40
42,64	3	3	1	2,1186	7,35	62,05	2	3	5	1,4945	2,14
42,67	0	5	3	2,1172	3,03	62,15	3	8	1	1,4924	2,44
42,83	2	6	0	2,1096	9,51	63,95	1	9	3	1,4547	5,28
43,38	0	2	4	2,0841	2,36	64,59	0	0	6	1,4418	2,29
44,05	1	1	4	2,0539	21,00	65,10	2	10	0	1,4316	2,44
44,56	1	5	3	2,0318	2,96	66,66	5	2	1	1,4020	2,87
46,53	3	3	2	1,9504	2,46	68,17	5	3	1	1,3745	2,22
46,56	0	8	0	1,9491	3,53	69,45	0	4	6	1,3523	2,88
47,19	1	3	4	1,9246	14,30						

Tabelle A 41: Gitterparameter und Reflexliste von $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ (rel. Int. > 2,0 %)

Calcium Europium Borat					$\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$					GoF = 1,24				
Pnma					Z = 4	a = 7,207(7) Å	b = 15,544(5) Å	c = 8,630(3) Å						
					V = 966,93(8) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$						
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]			
17,00	1	1	1	5,2119	6,18	42,79	0	5	3	2,1115	13,06			
19,68	1	2	1	4,5070	11,80	42,96	2	6	0	2,1036	9,02			
19,97	0	3	1	4,4424	5,03	43,50	0	2	4	2,0790	4,91			
20,57	0	0	2	4,3151	2,38	43,76	1	0	4	2,0670	2,33			
22,87	0	4	0	3,8861	3,42	43,90	1	7	1	2,0608	3,07			
23,51	1	3	1	3,7818	17,17	44,17	1	1	4	2,0489	25,71			
23,56	0	2	2	3,7727	3,88	44,28	2	6	1	2,0438	6,07			
24,02	1	0	2	3,7023	15,06	44,68	3	2	2	2,0265	4,91			
24,68	2	0	0	3,6039	2,92	45,37	1	2	4	1,9975	4,00			
24,70	1	1	2	3,6016	2,29	45,58	3	4	1	1,9886	2,44			
27,25	2	2	0	3,2695	8,91	46,71	0	8	0	1,9431	10,89			
27,40	2	1	1	3,2520	12,31	47,31	1	3	4	1,9198	100,00			
28,04	1	4	1	3,1800	4,67	47,72	1	7	2	1,9044	4,99			
29,19	2	2	1	3,0574	4,03	48,08	2	6	2	1,8909	12,37			
29,63	1	3	2	3,0124	61,81	48,09	2	7	0	1,8906	3,27			
30,18	2	3	0	2,9586	9,73	48,20	0	4	4	1,8863	10,99			
30,54	0	5	1	2,9249	13,93	48,93	1	6	3	1,8599	31,18			
30,94	0	4	2	2,8877	20,93	49,18	2	0	4	1,8512	2,21			
31,95	2	3	1	2,7987	75,26	49,30	3	4	2	1,8469	7,84			
32,34	2	0	2	2,7661	8,06	49,38	3	0	3	1,8440	6,37			
32,86	2	1	2	2,7233	9,77	49,55	2	1	4	1,8382	4,89			
33,02	1	5	1	2,7103	18,05	49,69	1	8	1	1,8333	6,78			
33,40	1	4	2	2,6806	19,33	49,75	3	1	3	1,8312	2,70			
33,51	1	0	3	2,6718	18,96	49,94	1	4	4	1,8249	8,64			
33,90	2	4	0	2,6425	6,08	50,85	3	2	3	1,7942	10,68			
34,02	1	1	3	2,6332	34,18	51,79	4	0	1	1,7639	4,86			
34,39	2	2	2	2,6060	4,73	52,56	3	5	2	1,7397	8,43			
34,59	0	6	0	2,5908	34,94	52,83	2	7	2	1,7317	3,27			
35,50	2	4	1	2,5267	4,85	53,01	3	6	1	1,7261	9,97			
35,67	0	3	3	2,5151	4,17	53,17	1	5	4	1,7213	3,73			
37,75	1	5	2	2,3808	2,91	53,19	1	8	2	1,7205	6,06			
38,20	2	5	0	2,3540	22,74	53,54	2	8	0	1,7103	10,69			
38,88	3	0	1	2,3146	45,61	53,62	1	7	3	1,7078	2,66			
39,32	3	1	1	2,2893	8,46	53,95	2	6	3	1,6981	2,74			
39,65	2	5	1	2,2711	2,37	54,11	0	9	1	1,6936	6,83			
39,98	2	4	2	2,2535	13,47	54,89	2	4	4	1,6712	2,53			
40,07	2	0	3	2,2483	9,68	54,94	4	3	1	1,6698	4,14			
40,51	2	1	3	2,2251	2,96	55,08	3	4	3	1,6660	16,91			
40,58	0	6	2	2,2212	2,53	56,12	0	3	5	1,6376	14,59			
40,64	3	2	1	2,2183	12,27	57,32	4	4	1	1,6062	2,33			
40,96	1	4	3	2,2017	2,04	59,22	4	5	0	1,5590	3,09			
41,79	2	2	3	2,1598	4,54	59,64	2	1	5	1,5490	2,22			
42,56	1	6	2	2,1227	4,80	60,31	3	3	4	1,5334	4,15			
42,75	3	3	1	2,1133	11,13									

Tabelle A 42: Gitterparameter und Reflexliste von $\text{Ca}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$ (rel. Int. > 2,0 %)

Calcium Gadolinium Borat						$\text{Ca}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$				GoF = 1,20	
Pnma						Z = 4	a = 7,194(1) Å	b = 15,542(0) Å	c = 8,613(4) Å		
						V = 963,07(0) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$		
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
11,74	0	1	1	7,5338	2,06	42,59	1	6	2	2,1211	3,25
16,04	1	0	1	5,5215	2,27	42,83	3	3	1	2,1099	3,98
17,03	1	1	1	5,2029	11,75	42,84	0	5	3	2,1091	3,78
19,71	1	2	1	4,5010	18,98	42,99	2	6	0	2,1020	9,68
19,98	0	3	1	4,4395	13,32	43,58	0	2	4	2,0752	2,45
20,61	0	0	2	4,3067	3,21	43,85	1	0	4	2,0629	2,39
22,87	0	4	0	3,8855	4,78	44,26	1	1	4	2,0450	7,56
23,53	1	3	1	3,7780	31,77	44,32	2	6	1	2,0421	13,14
23,60	0	2	2	3,7669	7,75	44,77	3	2	2	2,0229	2,31
24,06	1	0	2	3,6952	26,25	45,45	1	2	4	1,9939	3,18
24,75	1	1	2	3,5950	8,97	46,73	3	3	2	1,9423	5,03
26,69	1	2	2	3,3371	5,51	47,40	1	3	4	1,9166	25,76
26,84	2	0	1	3,3193	9,74	47,75	1	7	2	1,9032	3,61
27,30	2	2	0	3,2643	20,67	48,12	2	7	0	1,8894	4,38
27,45	2	1	1	3,2461	14,66	48,13	2	6	2	1,8890	4,75
28,06	1	4	1	3,1776	10,08	48,28	0	4	4	1,8834	13,66
29,23	2	2	1	3,0525	5,48	48,99	1	6	3	1,8580	12,62
29,67	1	3	2	3,0083	91,05	49,09	3	5	1	1,8542	9,84
30,22	2	3	0	2,9547	16,08	49,38	3	4	2	1,8441	9,15
30,55	0	5	1	2,9238	26,00	49,48	3	0	3	1,8405	3,63
30,97	0	4	2	2,8849	36,78	49,65	2	1	4	1,8347	3,81
31,67	0	1	3	2,8234	3,63	49,71	1	8	1	1,8326	4,84
32,00	2	3	1	2,7948	100,00	50,02	1	4	4	1,8220	4,93
32,40	2	0	2	2,7608	13,48	50,10	2	5	3	1,8194	7,11
32,92	2	1	2	2,7182	9,45	50,95	3	2	3	1,7910	7,05
33,04	1	5	1	2,7087	27,90	51,08	4	1	0	1,7866	3,19
33,44	1	4	2	2,6776	20,55	51,57	0	8	2	1,7709	2,81
33,58	1	0	3	2,6666	31,16	51,89	4	0	1	1,7606	4,65
33,93	2	4	0	2,6396	6,20	52,03	0	7	3	1,7564	3,28
34,09	1	1	3	2,6282	36,45	52,16	4	2	0	1,7522	2,46
34,45	2	2	2	2,6015	5,52	52,64	3	5	2	1,7373	4,46
34,60	0	6	0	2,5903	25,48	52,74	3	3	3	1,7343	5,02
35,54	2	4	1	2,5238	7,67	53,07	3	6	1	1,7241	7,67
35,73	0	3	3	2,5113	6,37	53,23	1	8	2	1,7196	5,57
36,86	2	3	2	2,4364	2,53	53,57	2	8	0	1,7094	5,38
37,79	1	5	2	2,3787	5,39	53,67	1	7	3	1,7063	6,97
38,24	2	5	0	2,3519	17,50	54,12	0	9	1	1,6932	6,42
38,35	1	6	1	2,3451	6,32	55,18	3	4	3	1,6633	12,46
38,96	3	0	1	2,3102	36,11	55,31	4	0	2	1,6596	3,77
39,40	3	1	1	2,2851	6,68	56,12	1	2	5	1,6377	2,81
40,03	2	4	2	2,2505	7,02	56,23	0	3	5	1,6347	4,92
40,15	2	0	3	2,2440	9,71	59,77	2	1	5	1,5460	2,56
40,61	0	6	2	2,2198	2,10	60,43	3	3	4	1,5307	2,98
40,71	3	2	1	2,2144	10,01	64,20	1	9	3	1,4495	3,15
41,87	2	2	3	2,1559	2,77						

Tabelle A 43: Gitterparameter und Reflexliste von $\text{Ca}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$ (rel. Int. > 2,0 %)

Calcium Dysprosium Borat						$\text{Ca}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$				GoF = 1,08	
Pnma						Z = 4	a = 7,166(5) Å	b = 15,481(1) Å	c = 8,576(5) Å		
						V = 951,53(0) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$		
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
11,42	0	2	0	7,7406	2,84	42,16	0	7	1	2,1415	2,06
17,10	1	1	1	5,1821	10,34	42,77	1	6	2	2,1126	3,39
19,79	1	2	1	4,4831	14,17	43,00	3	3	1	2,1017	4,89
20,07	0	3	1	4,4217	6,41	43,03	0	5	3	2,1004	4,66
20,70	0	0	2	4,2883	2,04	43,17	2	6	0	2,0938	5,91
22,96	0	4	0	3,8703	2,99	43,78	0	2	4	2,0663	4,06
23,62	1	3	1	3,7631	25,28	44,05	1	0	4	2,0542	2,42
23,70	0	2	2	3,7511	14,28	44,45	1	1	4	2,0363	10,98
24,17	1	0	2	3,6798	24,45	44,51	2	6	1	2,0341	7,25
24,83	2	0	0	3,5833	4,31	44,95	3	2	2	2,0149	3,08
24,85	1	1	2	3,5801	3,13	45,66	1	2	4	1,9854	3,35
26,80	1	2	2	3,3234	2,16	46,91	0	8	0	1,9351	4,68
27,41	2	2	0	3,2518	17,68	47,61	1	3	4	1,9085	10,69
27,56	2	1	1	3,2334	16,48	47,95	1	7	2	1,8956	3,08
28,17	1	4	1	3,1650	11,23	48,32	2	7	0	1,8820	2,49
29,35	2	2	1	3,0405	4,25	48,33	2	6	2	1,8815	7,96
29,80	1	3	2	2,9961	87,35	48,50	0	4	4	1,8756	8,34
30,34	2	3	0	2,9433	14,46	49,20	1	6	3	1,8505	16,23
30,67	0	5	1	2,9123	21,92	49,55	2	7	1	1,8383	4,13
31,10	0	4	2	2,8731	40,10	49,70	3	0	3	1,8331	5,27
32,13	2	3	1	2,7839	100,00	49,92	1	8	1	1,8254	5,96
32,54	2	0	2	2,7497	11,75	50,24	1	4	4	1,8144	7,69
33,06	2	1	2	2,7073	11,97	51,17	3	2	3	1,7838	7,07
33,18	1	5	1	2,6980	31,24	51,29	4	1	0	1,7798	2,50
33,58	1	4	2	2,6668	22,04	51,79	0	8	2	1,7639	2,21
33,73	1	0	3	2,6554	20,89	52,11	4	0	1	1,7538	3,80
34,07	2	4	0	2,6294	8,16	52,25	0	7	3	1,7493	2,38
34,23	1	1	3	2,6171	39,34	52,86	3	5	2	1,7305	2,49
34,59	2	2	2	2,5911	5,78	52,97	3	3	3	1,7274	4,94
34,74	0	6	0	2,5802	26,03	53,30	3	6	1	1,7174	9,32
35,69	2	4	1	2,5139	3,99	53,49	1	5	4	1,7117	5,70
35,72	1	2	3	2,5117	3,43	53,80	2	8	0	1,7027	6,17
35,88	0	3	3	2,5007	5,08	53,91	1	7	3	1,6994	5,82
37,95	1	5	2	2,3691	3,05	54,35	0	9	1	1,6865	6,56
38,39	2	5	0	2,3428	19,51	54,93	2	8	1	1,6701	2,82
39,11	3	0	1	2,3013	34,43	55,35	1	1	5	1,6586	2,34
39,56	3	1	1	2,2762	5,13	55,42	3	4	3	1,6567	11,99
40,20	2	4	2	2,2416	9,11	55,97	1	9	1	1,6417	3,96
40,33	2	0	3	2,2347	6,91	56,38	1	2	5	1,6308	2,96
40,76	2	1	3	2,2118	2,30	56,68	3	6	2	1,6226	2,14
40,88	3	2	1	2,2058	9,06	60,05	2	1	5	1,5395	2,93
42,05	2	2	3	2,1471	2,90						

Tabelle A 44: Gitterparameter und Reflexliste von $\text{Ca}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$ (rel. Int. > 2,0 %)

Calcium Yttrium Borat					$\text{Ca}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$					GoF = 1,53	
Pnma					Z = 4	a = 7,164(2) Å	b = 15,446(1) Å	c = 8,548(7) Å			
					V = 945,99(2) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$			
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
11,45	0	2	0	7,7231	2,11	40,91	3	2	1	2,2043	8,81
17,12	1	1	1	5,1738	7,33	42,14	2	2	3	2,1425	2,80
19,82	1	2	1	4,4752	7,20	42,87	1	6	2	2,1077	3,59
20,12	0	3	1	4,4105	3,05	43,04	3	3	1	2,1000	7,29
23,67	1	3	1	3,7559	14,50	43,16	0	5	3	2,0946	4,55
23,77	0	2	2	3,7398	7,37	43,24	2	6	0	2,0905	6,30
24,23	1	0	2	3,6707	17,60	43,92	0	2	4	2,0598	2,91
24,91	1	1	2	3,5712	3,89	44,58	2	6	1	2,0307	18,46
27,42	2	2	0	3,2496	10,60	45,06	1	5	3	2,0104	2,78
27,59	2	1	1	3,2307	10,50	45,80	1	2	4	1,9796	2,93
28,23	1	4	1	3,1587	7,90	46,99	3	3	2	1,9324	2,33
29,38	2	2	1	3,0375	3,41	47,03	0	8	0	1,9308	2,18
29,87	1	3	2	2,9889	76,14	47,76	1	3	4	1,9030	9,69
30,37	2	3	0	2,9405	7,87	48,07	1	7	2	1,8912	2,44
30,75	0	5	1	2,9053	18,46	48,41	2	7	0	1,8787	6,42
31,19	0	4	2	2,8654	36,27	48,43	2	6	2	1,8779	6,57
31,91	0	1	3	2,8023	3,46	48,65	0	4	4	1,8699	7,07
32,17	2	3	1	2,7806	100,00	49,33	1	6	3	1,8458	17,56
32,59	2	0	2	2,7455	9,59	49,66	3	4	2	1,8345	7,55
33,11	2	1	2	2,7031	9,13	49,78	3	0	3	1,8303	2,91
33,25	1	5	1	2,6924	27,71	50,00	2	1	4	1,8225	2,55
33,66	1	4	2	2,6605	28,21	50,04	1	8	1	1,8214	4,07
33,83	1	0	3	2,6478	17,38	50,15	3	1	3	1,8176	2,16
34,11	2	4	0	2,6262	7,40	50,40	1	4	4	1,8093	6,49
34,33	1	1	3	2,6097	42,27	51,25	3	2	3	1,7810	7,35
34,65	2	2	2	2,5869	8,00	52,13	4	0	1	1,7530	3,32
34,82	0	6	0	2,5744	26,70	52,94	3	5	2	1,7281	5,92
35,74	2	4	1	2,5104	9,65	53,21	2	7	2	1,7199	2,04
35,99	0	3	3	2,4932	4,13	53,37	3	6	1	1,7152	7,15
37,08	2	3	2	2,4226	2,87	53,59	1	8	2	1,7088	2,58
38,04	1	5	2	2,3636	4,06	53,90	2	8	0	1,6996	7,50
38,45	2	5	0	2,3394	23,79	53,91	0	1	5	1,6994	2,49
38,60	1	6	1	2,3309	3,34	54,49	0	9	1	1,6827	3,63
39,13	3	0	1	2,3000	39,34	55,38	2	4	4	1,6576	2,39
39,58	3	1	1	2,2749	7,61	55,52	3	4	3	1,6539	8,99
40,27	2	4	2	2,2376	12,98	56,60	4	4	0	1,6248	3,11
40,42	2	0	3	2,2300	7,68	60,23	2	1	5	1,5354	2,32
40,85	2	1	3	2,2071	3,89	60,77	2	9	1	1,5230	3,35

Tabelle A 45: Gitterparameter und Reflexliste von $\text{Ca}_3\text{Yb}_2(\text{BO}_3)_4$ (rel. Int. > 2,0 %)

Calcium Ytterbium Borat						$\text{Ca}_3\text{Yb}_2(\text{BO}_3)_4$				GoF = 1,99	
Pnma						Z = 4	a = 7,132(1) Å	b = 15,399(8) Å	c = 8,508(6) Å		
						V = 934,52(1) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$		
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
11,49	0	2	0	7,6956	3,74	43,34	0	5	3	2,0861	2,87
17,21	1	1	1	5,1491	14,78	43,41	2	6	0	2,0829	7,81
19,91	1	2	1	4,4556	14,98	44,14	0	2	4	2,0501	4,70
20,19	0	3	1	4,3939	5,52	44,28	2	5	2	2,0439	3,19
23,09	0	4	0	3,8489	2,01	44,82	1	1	4	2,0205	26,10
23,77	1	3	1	3,7408	32,24	46,03	1	2	4	1,9703	3,70
23,88	0	2	2	3,7227	15,06	47,18	0	8	0	1,9247	5,31
24,35	1	0	2	3,6527	26,97	47,21	3	3	2	1,9238	4,54
25,04	1	1	2	3,5541	5,56	47,99	1	3	4	1,8943	12,83
27,00	1	2	2	3,3001	2,45	48,25	1	7	2	1,8845	4,96
27,55	2	2	0	3,2351	28,69	48,63	2	6	2	1,8707	18,74
27,72	2	1	1	3,2156	18,82	48,88	0	4	4	1,8616	11,31
28,34	1	4	1	3,1468	15,82	49,54	1	6	3	1,8385	21,80
29,52	2	2	1	3,0239	4,64	49,83	2	7	1	1,8284	11,26
30,00	1	3	2	2,9760	84,48	50,03	3	0	3	1,8217	6,71
30,50	2	3	0	2,9281	16,39	50,21	1	8	1	1,8155	8,73
30,86	0	5	1	2,8955	20,00	50,26	2	1	4	1,8139	3,02
31,32	0	4	2	2,8540	36,57	50,40	3	1	3	1,8091	7,05
32,07	0	1	3	2,7887	3,84	50,64	1	4	4	1,8013	9,58
32,31	2	3	1	2,7687	100,00	50,66	2	5	3	1,8006	5,43
32,75	2	0	2	2,7324	16,56	51,20	4	0	0	1,7828	2,34
33,28	2	1	2	2,6904	18,62	51,51	3	2	3	1,7728	12,69
33,37	1	5	1	2,6828	31,85	52,11	0	8	2	1,7536	2,28
33,80	1	4	2	2,6497	24,78	52,39	4	0	1	1,7449	6,13
34,00	1	0	3	2,6350	23,85	53,18	3	5	2	1,7209	9,77
34,25	2	4	0	2,6157	9,64	53,32	3	3	3	1,7168	2,05
34,51	1	1	3	2,5972	58,99	53,43	2	7	2	1,7135	3,74
34,81	2	2	2	2,5750	5,76	53,60	3	6	1	1,7084	10,08
34,94	0	6	0	2,5662	31,47	53,79	1	8	2	1,7029	6,15
35,89	2	4	1	2,5002	6,66	54,10	2	8	0	1,6938	8,77
36,16	0	3	3	2,4821	5,77	54,28	1	7	3	1,6887	5,78
38,60	2	5	0	2,3305	27,29	54,63	2	6	3	1,6788	2,59
38,73	1	6	1	2,3229	2,33	54,68	0	9	1	1,6773	3,76
39,32	3	0	1	2,2893	47,25	55,58	4	3	1	1,6521	4,34
39,78	3	1	1	2,2644	5,21	55,78	3	4	3	1,6467	9,82
40,45	2	4	2	2,2282	12,78	55,82	1	1	5	1,6456	5,00
40,62	2	0	3	2,2194	8,95	56,22	4	1	2	1,6350	2,28
41,06	2	1	3	2,1967	3,20	56,87	4	4	0	1,6178	4,57
41,10	3	2	1	2,1944	13,23	57,98	4	4	1	1,5893	3,01
42,35	2	2	3	2,1326	2,92	60,54	2	1	5	1,5281	2,88
43,04	1	6	2	2,0999	3,67	61,14	3	3	4	1,5145	5,17
43,24	3	3	1	2,0908	11,09						

Tabelle A 46: Gitterparameter und Reflexliste von Sr₃La₂(BO₃)₄ (rel. Int. > 2,0 %)

Strontium Lanthan Borat						Sr ₃ La ₂ (BO ₃) ₄				GoF = 1,53	
Pnma						Z = 4	a = 7,414(5) Å	b = 16,516(9) Å	c = 8,904(3) Å		
						V = 1090,46(1) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °		
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
16,45	1	1	1	5,3844	2,84	46,77	1	8	1	1,9409	8,64
18,91	1	2	1	4,6884	20,31	47,62	2	0	4	1,9082	2,47
21,51	0	4	0	4,1281	9,52	47,86	3	0	3	1,8990	10,53
22,44	1	3	1	3,9582	30,51	47,92	2	5	3	1,8967	10,24
22,68	0	2	2	3,9179	15,06	47,99	1	4	4	1,8942	12,58
23,29	1	0	2	3,8160	46,37	48,20	3	1	3	1,8866	6,83
23,91	1	1	2	3,7180	16,14	48,57	0	8	2	1,8728	3,31
25,70	1	2	2	3,4640	2,44	49,12	4	0	0	1,8534	2,06
26,34	2	2	0	3,3814	21,58	49,19	3	2	3	1,8507	10,96
26,58	2	1	1	3,3506	19,00	50,17	2	7	2	1,8170	17,97
28,21	2	2	1	3,1611	14,25	50,24	4	0	1	1,8145	18,74
28,44	1	3	2	3,1362	50,50	50,42	4	2	0	1,8084	19,28
28,81	0	5	1	3,0965	24,14	50,43	3	5	2	1,8082	2,38
29,02	2	3	0	3,0745	23,59	50,56	4	1	1	1,8037	14,47
29,49	0	4	2	3,0270	27,93	50,58	2	3	4	1,8030	2,45
30,58	0	1	3	2,9208	12,21	50,65	3	6	1	1,8009	17,42
30,74	2	3	1	2,9061	100,00	50,76	0	9	1	1,7972	8,42
31,28	1	5	1	2,8573	32,08	50,82	3	3	3	1,7952	4,51
31,38	2	0	2	2,8484	6,64	50,91	1	7	3	1,7921	11,00
31,86	2	1	2	2,8069	15,45	51,53	4	2	1	1,7723	2,77
31,91	1	4	2	2,8024	25,66	51,58	0	1	5	1,7704	3,11
32,44	2	4	0	2,7581	8,05	51,67	2	8	1	1,7677	6,79
32,47	1	0	3	2,7550	10,01	52,81	2	4	4	1,7322	5,79
32,51	0	6	0	2,7523	15,66	52,85	0	6	4	1,7308	2,95
32,93	1	1	3	2,7175	30,56	53,03	3	4	3	1,7253	22,48
33,25	2	2	2	2,6927	2,44	53,10	4	3	1	1,7233	10,50
34,00	2	4	1	2,6346	11,17	53,82	4	1	2	1,7020	2,89
34,30	0	3	3	2,6122	4,50	53,90	3	6	2	1,6996	3,03
35,45	2	3	2	2,5298	2,59	54,07	1	2	5	1,6946	2,72
36,40	2	5	0	2,4659	17,62	55,25	4	4	1	1,6612	8,61
37,75	3	0	1	2,3811	41,34	55,52	3	0	4	1,6539	3,46
38,16	3	1	1	2,3568	6,02	56,25	4	3	2	1,6340	2,80
38,36	2	4	2	2,3446	8,81	56,92	4	5	0	1,6164	7,73
38,84	2	0	3	2,3167	9,25	57,65	2	1	5	1,5976	6,50
39,35	3	2	1	2,2879	6,67	57,69	1	4	5	1,5967	2,31
40,37	1	6	2	2,2324	5,32	58,20	3	3	4	1,5840	3,96
40,50	0	0	4	2,2258	2,70	58,29	1	7	4	1,5818	2,35
40,80	2	6	0	2,2098	8,41	59,19	3	8	1	1,5599	2,35
40,85	0	5	3	2,2075	5,62	59,99	2	3	5	1,5410	5,10
41,28	3	3	1	2,1855	11,97	60,58	1	9	3	1,5273	5,15
42,01	0	2	4	2,1491	3,24	61,98	2	4	5	1,4960	2,70
42,10	2	6	1	2,1448	2,16	62,58	1	8	4	1,4831	2,19
42,15	3	1	2	2,1423	2,27	62,70	0	11	1	1,4805	3,14
42,37	1	0	4	2,1318	2,49	63,41	1	6	5	1,4656	2,13
42,70	1	5	3	2,1157	5,78	64,09	1	11	1	1,4519	2,90
42,73	1	1	4	2,1142	20,13	66,04	5	3	1	1,4136	2,87
43,25	3	2	2	2,0902	2,73	66,69	2	8	4	1,4013	3,68
43,82	1	2	4	2,0641	5,00	66,83	3	9	2	1,3987	6,23
43,86	3	4	1	2,0627	2,86	66,91	1	11	2	1,3972	3,14
45,14	1	7	2	2,0068	3,86	67,26	1	9	4	1,3908	3,05
45,54	2	7	0	1,9903	2,28	68,29	1	4	6	1,3724	2,65
45,60	1	3	4	1,9879	16,15	68,70	4	6	3	1,3651	2,91

Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
45,80	2	6	2	1,9794	18,75	68,83	4	8	1	1,3629	3,41
46,30	0	4	4	1,9592	17,32	69,06	2	2	6	1,3589	2,61
46,60	1	6	3	1,9473	27,53	69,17	3	10	1	1,3571	2,95
46,73	2	7	1	1,9424	7,70						

Tabelle A 47: Gitterparameter und Reflexliste von Sr₃Nd₂(BO₃)₄ (rel. Int. > 2,0 %)

Strontium Neodym Borat						Sr ₃ Nd ₂ (BO ₃) ₄					GoF = 1,21		
Pnma						Z = 4	a = 7,421(0) Å	b = 16,211(1) Å	c = 8,839(6) Å				
						V = 1063,42(8) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$				
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]		
10,91	0	2	0	8,1055	3,22	47,60	1	8	1	1,9087	8,93		
16,51	1	1	1	5,3636	7,47	47,98	3	0	3	1,8946	13,00		
19,06	1	2	1	4,6536	18,47	48,22	2	1	4	1,8858	6,15		
19,24	0	3	1	4,6105	2,92	48,33	3	1	3	1,8818	7,83		
20,07	0	0	2	4,4198	3,35	48,46	1	4	4	1,8771	16,14		
21,91	0	4	0	4,0528	8,81	49,06	4	0	0	1,8553	2,74		
22,69	1	3	1	3,9162	38,22	49,36	3	2	3	1,8448	12,35		
22,90	0	2	2	3,8804	19,44	49,44	0	8	2	1,8420	2,82		
23,41	1	0	2	3,7973	47,22	50,06	0	7	3	1,8208	2,87		
24,05	1	1	2	3,6973	13,40	50,21	4	0	1	1,8157	11,77		
25,89	1	2	2	3,4387	2,94	50,42	4	2	0	1,8085	2,02		
26,02	2	0	1	3,4213	3,35	50,54	4	1	1	1,8044	3,37		
26,40	2	2	0	3,3738	24,31	50,77	3	5	2	1,7968	17,63		
26,61	2	1	1	3,3476	21,05	50,82	2	7	2	1,7953	6,96		
27,00	1	4	1	3,2998	4,46	51,05	1	8	2	1,7878	14,15		
28,29	2	2	1	3,1520	18,67	51,07	3	6	1	1,7868	17,11		
28,71	1	3	2	3,1069	91,62	51,33	2	8	0	1,7785	16,58		
29,17	2	3	0	3,0588	24,87	51,54	4	2	1	1,7718	2,10		
29,32	0	5	1	3,0439	31,78	51,65	1	7	3	1,7683	10,24		
29,89	0	4	2	2,9871	39,35	51,75	0	9	1	1,7650	12,92		
30,82	0	1	3	2,8990	7,07	51,99	0	1	5	1,7575	3,38		
30,91	2	3	1	2,8906	100,00	52,08	4	3	0	1,7547	3,13		
31,45	2	0	2	2,8418	11,69	52,44	2	8	1	1,7435	6,12		
31,75	1	5	1	2,8162	34,97	53,17	4	3	1	1,7211	7,84		
31,95	2	1	2	2,7992	12,80	53,22	1	0	5	1,7198	2,69		
32,28	1	4	2	2,7710	29,98	53,31	1	9	1	1,7171	6,87		
32,67	1	0	3	2,7386	11,16	53,34	3	4	3	1,7163	20,88		
32,70	2	4	0	2,7367	4,75	53,54	1	1	5	1,7102	3,23		
33,13	0	6	0	2,7018	35,52	53,85	4	1	2	1,7012	4,25		
33,15	1	1	3	2,7003	30,35	54,34	4	4	0	1,6869	3,39		
33,38	2	2	2	2,6818	2,49	54,50	1	2	5	1,6823	2,45		
34,27	2	4	1	2,6143	11,56	55,05	1	6	4	1,6669	2,01		
34,65	0	3	3	2,5869	6,30	55,40	4	4	1	1,6570	6,43		
36,76	1	3	3	2,4428	6,45	56,04	3	1	4	1,6396	5,34		
36,78	2	5	0	2,4415	10,24	56,23	2	7	3	1,6346	2,53		
37,73	3	0	1	2,3822	46,01	56,37	4	3	2	1,6309	2,12		
38,15	3	1	1	2,3569	3,05	56,44	1	8	3	1,6289	3,16		
38,67	2	4	2	2,3268	8,27	57,16	4	5	0	1,6103	7,16		
39,00	2	0	3	2,3075	6,17	58,02	2	1	5	1,5883	8,52		
39,39	3	2	1	2,2855	8,35	58,23	1	4	5	1,5832	2,18		
40,62	2	2	3	2,2193	2,19	58,52	4	4	2	1,5760	5,35		
40,96	1	6	2	2,2015	3,05	59,07	4	1	3	1,5627	3,12		
41,30	2	6	0	2,1842	7,39	59,22	1	10	1	1,5589	2,19		
41,37	0	5	3	2,1806	4,26	59,88	3	8	1	1,5435	2,95		
41,39	3	3	1	2,1798	7,13	60,43	2	3	5	1,5307	2,69		
42,36	0	2	4	2,1321	2,23	61,48	4	6	1	1,5070	2,62		

Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
42,57	2	3	3	2,1221	2,08	61,58	1	9	3	1,5049	5,46
43,04	1	1	4	2,1001	19,88	62,47	2	10	0	1,4855	3,35
43,21	1	5	3	2,0921	5,68	63,05	0	0	6	1,4733	3,19
44,16	1	2	4	2,0492	4,50	64,00	0	11	1	1,4537	2,02
44,68	0	8	0	2,0264	5,99	65,36	1	11	1	1,4266	3,35
45,86	1	7	2	1,9772	6,14	65,94	4	1	4	1,4155	2,60
45,99	1	3	4	1,9719	13,69	66,48	0	7	5	1,4053	3,14
46,17	2	7	0	1,9646	2,25	67,60	0	4	6	1,3846	2,02
46,33	2	6	2	1,9581	18,35	67,69	3	9	2	1,3830	5,05
46,78	0	4	4	1,9402	17,63	68,91	5	3	2	1,3616	7,61
47,22	1	6	3	1,9233	32,78	69,15	4	6	3	1,3574	2,41
47,36	2	7	1	1,9178	19,13						

Tabelle A 48: Gitterparameter und Reflexliste von Sr₃Sm₂(BO₃)₄ (rel. Int. > 2,0 %)

Strontium Samarium Borat			Sr ₃ Sm ₂ (BO ₃) ₄			GoF = 0,96					
Pnma			Z = 4	a = 7,419(4) Å	b = 16,137(8) Å	c = 8,788(1) Å					
			V = 1052,23(0) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °					
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
10,96	0	2	0	8,0689	2,55	44,41	1	2	4	2,0383	4,17
16,56	1	1	1	5,3487	7,98	44,90	0	8	0	2,0172	5,13
19,12	1	2	1	4,6387	18,55	46,25	1	3	4	1,9616	13,15
20,19	0	0	2	4,3941	3,85	46,51	2	6	2	1,9511	18,64
22,01	0	4	0	4,0345	10,68	47,06	0	4	4	1,9295	14,11
22,77	1	3	1	3,9022	40,99	47,46	1	6	3	1,9141	25,30
23,03	0	2	2	3,8590	23,01	47,54	2	7	1	1,9112	12,94
23,51	1	0	2	3,7808	46,49	47,82	1	8	1	1,9005	6,40
23,97	2	0	0	3,7097	2,22	48,11	3	0	3	1,8897	10,40
24,16	1	1	2	3,6811	15,48	48,44	2	1	4	1,8775	8,34
26,01	1	2	2	3,4236	3,66	48,46	3	1	3	1,8769	2,37
26,05	2	0	1	3,4177	2,13	48,72	1	4	4	1,8674	14,75
26,42	2	2	0	3,3706	20,67	49,50	3	2	3	1,8399	11,74
26,64	2	1	1	3,3435	26,43	49,69	0	8	2	1,8333	3,16
27,11	1	4	1	3,2871	5,06	50,23	4	0	1	1,8149	6,37
28,34	2	2	1	3,1470	12,67	50,33	0	7	3	1,8117	5,37
28,84	1	3	2	3,0932	100,00	50,91	3	5	2	1,7924	9,70
29,22	2	3	0	3,0539	20,51	51,02	2	7	2	1,7886	4,98
29,46	0	5	1	3,0297	31,50	51,18	2	3	4	1,7835	3,13
30,05	0	4	2	2,9718	41,66	51,19	3	3	3	1,7829	3,26
30,98	2	3	1	2,8847	92,86	51,20	3	6	1	1,7827	3,27
31,00	0	1	3	2,8823	13,12	51,29	1	8	2	1,7798	15,07
31,54	2	0	2	2,8346	10,46	51,53	2	8	0	1,7722	11,64
31,88	1	5	1	2,8049	34,91	51,58	4	2	1	1,7706	2,12
32,03	2	1	2	2,7919	13,17	51,91	1	7	3	1,7599	8,22
32,43	1	4	2	2,7587	31,05	52,01	0	9	1	1,7569	10,92
32,84	1	0	3	2,7247	15,77	52,12	4	3	0	1,7535	2,54
33,28	0	6	0	2,6896	13,46	52,32	0	1	5	1,7473	3,24
33,32	1	1	3	2,6867	55,16	52,64	2	8	1	1,7372	4,18
33,48	2	2	2	2,6744	4,44	53,49	2	4	4	1,7118	9,51
34,36	2	4	1	2,6078	10,99	53,50	3	4	3	1,7113	11,94
34,85	0	3	3	2,5726	9,06	53,56	1	9	1	1,7096	3,99
36,88	2	5	0	2,4350	17,25	53,59	4	0	2	1,7088	3,89
36,96	1	6	1	2,4300	2,03	53,91	4	1	2	1,6993	2,36
37,76	3	0	1	2,3807	39,36	54,40	4	4	0	1,6853	2,25
38,18	3	1	1	2,3552	2,49	55,47	4	4	1	1,6551	4,85
38,79	2	4	2	2,3194	7,65	56,25	3	1	4	1,6341	2,67
39,15	2	0	3	2,2990	5,17	57,24	4	5	0	1,6082	4,90
39,43	3	2	1	2,2834	7,45	58,33	2	1	5	1,5807	5,17
40,78	2	2	3	2,2110	2,35	58,73	3	3	4	1,5709	3,66
41,15	1	6	2	2,1916	2,46	60,10	4	2	3	1,5384	3,10
41,44	3	3	1	2,1770	13,06	61,90	1	9	3	1,4978	3,54
41,60	0	5	3	2,1692	5,47	68,04	0	4	6	1,3768	2,14
43,28	1	1	4	2,0889	17,46	68,99	5	3	2	1,3602	3,00
43,43	1	5	3	2,0820	8,06	69,14	2	1	6	1,3575	2,76

Tabelle A 49: Gitterparameter und Reflexliste von Sr₃Eu₂(BO₃)₄ (rel. Int. > 2,0 %)

Strontium Europium Borat					Sr ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄					GoF = 0,94	
Pnma					Z = 4	a = 7,412(8) Å	b = 16,093(8) Å	c = 8,766(2) Å			
					V = 1045,81(4) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °			
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
10,99	0	2	0	8,0469	2,92	43,54	1	5	3	2,0769	5,00
16,59	1	1	1	5,3397	7,93	44,52	1	2	4	2,0334	3,71
19,16	1	2	1	4,6297	16,29	45,03	0	8	0	2,0117	5,67
19,38	0	3	1	4,5758	2,71	46,36	1	3	4	1,9568	13,41
20,24	0	0	2	4,3831	3,47	46,61	2	6	2	1,9469	19,52
22,08	0	4	0	4,0235	9,03	47,19	0	4	4	1,9246	14,51
22,82	1	3	1	3,8937	34,88	47,59	1	6	3	1,9093	21,55
23,09	0	2	2	3,8491	19,29	47,65	2	7	1	1,9070	16,48
23,56	1	0	2	3,7729	40,69	47,95	1	8	1	1,8956	5,35
23,99	2	0	0	3,7064	2,32	48,19	3	0	3	1,8868	11,06
24,21	1	1	2	3,6733	11,87	48,54	3	1	3	1,8740	2,66
26,06	1	2	2	3,4161	2,59	48,55	2	1	4	1,8736	8,12
26,08	2	0	1	3,4138	2,88	48,85	1	4	4	1,8628	15,18
26,45	2	2	0	3,3665	19,32	49,12	4	0	0	1,8532	2,61
26,67	2	1	1	3,3395	27,06	49,58	3	2	3	1,8370	10,99
27,17	1	4	1	3,2794	6,26	50,28	4	0	1	1,8131	9,12
28,38	2	2	1	3,1427	12,54	50,47	0	7	3	1,8069	4,58
28,91	1	3	2	3,0861	91,91	51,00	3	5	2	1,7893	10,70
29,26	2	3	0	3,0494	18,92	51,15	2	7	2	1,7845	5,38
29,54	0	5	1	3,0215	29,54	51,29	3	3	3	1,7799	3,43
30,13	0	4	2	2,9640	43,08	51,30	2	3	4	1,7796	4,51
31,03	2	3	1	2,8801	100,00	51,30	3	6	1	1,7795	4,32
31,59	2	0	2	2,8302	10,19	51,44	1	8	2	1,7752	17,37
31,96	1	5	1	2,7980	35,10	51,63	4	2	1	1,7688	2,19
32,08	2	1	2	2,7874	11,57	51,66	2	8	0	1,7681	11,71
32,51	1	4	2	2,7522	31,78	52,05	1	7	3	1,7555	9,50
32,92	1	0	3	2,7185	15,60	52,16	0	9	1	1,7521	12,80
33,38	0	6	0	2,6823	13,47	52,46	0	1	5	1,7429	4,39
33,40	1	1	3	2,6805	55,11	52,78	2	8	1	1,7332	5,32
33,54	2	2	2	2,6699	4,94	53,29	4	3	1	1,7177	2,98
34,43	2	4	1	2,6031	9,71	53,61	3	4	3	1,7083	13,69
34,94	0	3	3	2,5661	5,93	53,61	2	4	4	1,7080	8,59
36,96	2	5	0	2,4303	17,72	53,65	4	0	2	1,7069	10,11
37,80	3	0	1	2,3783	39,41	53,71	1	9	1	1,7051	2,89
38,22	3	1	1	2,3527	2,81	53,98	4	1	2	1,6974	3,71
38,87	2	4	2	2,3149	7,92	54,47	4	4	0	1,6832	2,30
39,23	2	0	3	2,2947	4,96	55,55	4	4	1	1,6530	6,84
39,35	0	6	2	2,2879	2,31	56,94	1	9	2	1,6159	3,19
39,48	3	2	1	2,2807	6,27	57,32	4	5	0	1,6060	5,67
39,64	2	1	3	2,2717	2,85	58,47	2	1	5	1,5772	7,54
40,86	2	2	3	2,2067	2,27	58,85	3	3	4	1,5680	2,94
41,26	1	6	2	2,1861	2,58	59,55	1	7	4	1,5512	2,69
41,50	3	3	1	2,1742	11,35	60,19	4	2	3	1,5362	3,77
41,52	2	6	0	2,1730	2,94	62,08	1	9	3	1,4940	4,94
41,71	0	5	3	2,1635	4,52	62,98	2	4	5	1,4746	2,66
41,94	3	0	2	2,1525	2,04	63,77	2	7	4	1,4584	2,04
42,73	0	2	4	2,1145	2,33	64,68	4	6	2	1,4401	2,28
43,39	1	1	4	2,0839	16,89	68,24	0	4	6	1,3733	2,26
43,49	3	2	2	2,0794	3,88	69,08	5	3	2	1,3586	5,80

Tabelle A 50: Gitterparameter und Reflexliste von $\text{Sr}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$ (rel. Int. > 2,0 %)

Strontium Gadolinium Borat						$\text{Sr}_3\text{Gd}_2(\text{BO}_3)_4$				GoF = 0,92	
Pnma						Z = 4	a = 7,414(7) Å	b = 16,070(7) Å	c = 8,747(9) Å		
						V = 1042,39(9) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$		
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
11,00	0	2	0	8,0354	3,27	45,10	0	8	0	2,0088	6,83
16,60	1	1	1	5,3354	9,38	46,27	1	7	2	1,9605	3,86
19,17	1	2	1	4,6253	18,86	46,45	1	3	4	1,9532	7,12
19,41	0	3	1	4,5684	4,43	46,49	2	7	0	1,9519	3,61
20,29	0	0	2	4,3740	5,07	46,67	2	6	2	1,9447	15,70
22,11	0	4	0	4,0177	10,15	47,28	0	4	4	1,9208	22,81
22,85	1	3	1	3,8894	35,77	47,67	1	6	3	1,9063	10,30
23,13	0	2	2	3,8417	19,84	47,70	2	7	1	1,9050	18,94
23,60	1	0	2	3,7673	43,99	47,92	3	4	2	1,8969	4,12
23,98	2	0	0	3,7074	2,17	48,02	1	8	1	1,8930	2,50
24,25	1	1	2	3,6679	13,21	48,23	3	0	3	1,8854	8,81
26,08	2	0	1	3,4135	2,20	48,58	3	1	3	1,8726	3,59
26,46	2	2	0	3,3663	19,20	48,63	2	1	4	1,8709	6,63
26,68	2	1	1	3,3390	24,74	48,95	1	4	4	1,8595	10,59
27,20	1	4	1	3,2755	5,38	49,11	4	0	0	1,8537	5,10
28,39	2	2	1	3,1417	43,59	49,63	3	2	3	1,8356	8,70
28,95	1	3	2	3,0816	85,52	49,67	2	2	4	1,8339	3,14
29,27	2	3	0	3,0485	18,95	49,92	0	8	2	1,8255	3,06
29,59	0	5	1	3,0170	25,60	50,27	4	0	1	1,8134	8,72
30,18	0	4	2	2,9589	39,79	50,56	0	7	3	1,8038	3,44
31,04	2	3	1	2,8787	100,00	51,04	3	5	2	1,7881	9,67
31,61	2	0	2	2,8281	9,90	51,21	2	7	2	1,7824	5,01
32,00	1	5	1	2,7945	30,73	51,33	3	3	3	1,7785	3,11
32,11	2	1	2	2,7853	12,82	51,33	3	6	1	1,7785	3,45
32,56	1	4	2	2,7481	28,28	51,38	2	3	4	1,7770	3,63
32,85	2	4	0	2,7246	2,29	51,52	1	8	2	1,7726	8,72
32,98	1	0	3	2,7137	11,61	51,63	4	2	1	1,7689	2,54
33,43	0	6	0	2,6785	14,01	51,71	2	8	0	1,7662	9,66
33,46	1	1	3	2,6758	46,17	52,02	1	5	4	1,7566	2,05
33,57	2	2	2	2,6677	7,25	52,14	1	7	3	1,7527	3,52
34,45	2	4	1	2,6014	10,32	52,17	4	3	0	1,7518	4,16
35,01	0	3	3	2,5611	7,29	52,24	0	9	1	1,7496	9,73
35,88	2	3	2	2,5010	3,11	52,51	2	6	3	1,7414	2,29
36,73	1	5	2	2,4452	2,10	52,58	0	1	5	1,7393	2,33
36,99	2	5	0	2,4285	15,98	52,84	2	8	1	1,7313	4,67
37,79	3	0	1	2,3785	35,43	53,29	4	3	1	1,7177	3,06
38,22	3	1	1	2,3528	3,53	53,66	3	4	3	1,7068	6,72
38,91	2	4	2	2,3126	7,73	53,66	4	0	2	1,7067	9,60
39,28	2	0	3	2,2920	6,39	53,70	2	4	4	1,7055	4,11
39,48	3	2	1	2,2807	5,35	53,79	1	0	5	1,7028	2,11
39,69	2	1	3	2,2690	3,08	53,79	1	9	1	1,7028	2,27
40,91	2	2	3	2,2041	3,41	54,47	4	4	0	1,6832	2,43
41,51	3	3	1	2,1738	7,89	55,56	4	4	1	1,6529	4,61
41,56	2	6	0	2,1711	5,84	56,11	3	0	4	1,6378	3,40
41,79	0	5	3	2,1596	3,48	56,11	2	8	2	1,6377	4,01
41,95	3	0	2	2,1518	2,73	57,33	4	5	0	1,6058	4,16
42,82	0	2	4	2,1102	3,28	58,58	2	1	5	1,5746	5,36
43,47	1	1	4	2,0800	10,42	58,92	3	3	4	1,5663	2,15
43,50	3	2	2	2,0786	6,03	59,77	1	10	1	1,5459	2,46
43,62	1	5	3	2,0735	5,99	60,22	4	2	3	1,5355	2,24
44,22	3	4	1	2,0467	2,16	62,18	1	9	3	1,4917	3,73
44,61	1	2	4	2,0296	4,96	69,09	5	3	2	1,3585	5,32

Tabelle A 51: Gitterparameter und Reflexliste von $\text{Sr}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$ (rel. Int. > 2,0 %)

Strontium Dysprosium Borat						$\text{Sr}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$				GoF = 1,05	
Pnma						Z = 4	a = 7,399(3) Å	b = 15,966(8) Å	c = 8,709(0) Å		
						V = 1028,90(8) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$		
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
11,07	0	2	0	7,9834	3,08	41,78	2	6	0	2,1603	4,00
16,66	1	1	1	5,3170	8,27	42,03	0	5	3	2,1481	3,51
19,26	1	2	1	4,6058	16,05	43,03	0	2	4	2,1005	2,51
19,53	0	3	1	4,5414	2,77	43,64	3	2	2	2,0725	6,09
20,38	0	0	2	4,3545	3,78	43,67	1	1	4	2,0711	8,83
22,25	0	4	0	3,9917	9,11	43,85	1	5	3	2,0629	2,34
22,96	1	3	1	3,8705	37,30	44,82	1	2	4	2,0207	2,86
23,25	0	2	2	3,8228	20,41	45,41	0	8	0	1,9959	4,29
23,69	1	0	2	3,7529	41,52	46,56	1	7	2	1,9492	4,77
24,03	2	0	0	3,6996	2,59	46,68	1	3	4	1,9443	5,58
24,34	1	1	2	3,6533	12,20	46,75	2	7	0	1,9416	3,03
26,22	1	2	2	3,3963	2,59	46,91	2	6	2	1,9353	10,64
26,53	2	2	0	3,3567	18,22	47,53	0	4	4	1,9114	9,69
26,75	2	1	1	3,3302	29,31	47,94	1	6	3	1,8962	21,71
27,35	1	4	1	3,2580	6,11	47,97	2	7	1	1,8951	2,09
28,47	2	2	1	3,1321	22,06	48,34	1	8	1	1,8815	5,64
29,09	1	3	2	3,0671	81,60	48,39	3	0	3	1,8796	5,41
29,38	2	3	0	3,0378	18,27	48,74	3	1	3	1,8667	4,90
29,78	0	5	1	2,9982	26,53	48,83	2	1	4	1,8636	2,34
30,35	0	4	2	2,9425	39,57	49,19	1	4	4	1,8507	7,80
31,16	2	3	1	2,8683	100,00	49,22	4	0	0	1,8498	2,40
31,71	2	0	2	2,8194	11,02	49,80	3	2	3	1,8296	8,20
32,19	1	5	1	2,7787	33,06	50,39	4	0	1	1,8095	5,52
32,21	2	1	2	2,7765	10,57	51,25	3	5	2	1,7812	7,26
32,73	1	4	2	2,7342	28,98	51,49	2	7	2	1,7733	4,59
32,98	2	4	0	2,7134	2,02	51,56	3	6	1	1,7711	5,34
33,12	1	0	3	2,7025	13,66	51,84	1	8	2	1,7622	7,77
33,61	1	1	3	2,6646	43,95	52,02	2	8	0	1,7566	7,22
33,65	0	6	0	2,6611	21,03	52,45	1	7	3	1,7431	8,21
33,69	2	2	2	2,6585	2,95	52,61	0	9	1	1,7384	4,45
34,60	2	4	1	2,5906	10,29	53,15	2	8	1	1,7219	2,48
35,19	0	3	3	2,5486	6,35	53,44	4	3	1	1,7132	2,38
37,16	2	5	0	2,4174	15,85	53,80	4	0	2	1,7026	2,67
37,88	3	0	1	2,3731	33,04	53,87	3	4	3	1,7005	15,15
38,31	3	1	1	2,3473	2,79	55,73	4	4	1	1,6480	3,67
39,08	2	4	2	2,3029	6,24	57,41	1	9	2	1,6039	2,62
39,42	2	0	3	2,2838	6,03	58,84	2	1	5	1,5683	2,16
39,59	3	2	1	2,2747	4,10	69,29	5	3	2	1,3550	2,07
41,64	3	3	1	2,1674	7,54						

Tabelle A 52: Gitterparameter und Reflexliste von $\text{Sr}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$ (rel. Int. > 2,0 %)

Strontium Yttrium Borat						$\text{Sr}_3\text{Y}_2(\text{BO}_3)_4$				GoF = 2,23	
Pnma						Z = 4	a = 7,387(1) Å	b = 15,960(7) Å	c = 8,671(4) Å		
						V = 1022,37(8) Å ³	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$		
Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2 θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
16,70	1	1	1	5,3037	4,14	33,74	1	1	3	2,6543	25,88
19,29	1	2	1	4,5967	11,43	34,64	2	4	1	2,5871	9,97
19,56	0	3	1	4,5347	3,54	35,31	0	3	3	2,5398	3,97
20,47	0	0	2	4,3357	4,68	37,20	2	5	0	2,4152	12,27
22,26	0	4	0	3,9902	10,26	37,96	3	0	1	2,3687	27,27
22,99	1	3	1	3,8647	27,14	38,39	3	1	1	2,3431	2,65
23,33	0	2	2	3,8097	15,07	39,16	2	4	2	2,2984	4,46
23,78	1	0	2	3,7392	38,27	39,56	2	0	3	2,2763	4,99
24,08	2	0	0	3,6936	3,42	39,66	3	2	1	2,2708	3,23
24,43	1	1	2	3,6406	11,31	41,63	1	6	2	2,1676	2,10
26,20	2	0	1	3,3981	2,43	41,71	3	3	1	2,1639	5,51
26,57	2	2	0	3,3519	13,58	41,81	2	6	0	2,1586	3,19
26,80	2	1	1	3,3236	24,68	42,14	0	5	3	2,1426	2,62
27,39	1	4	1	3,2542	4,73	43,74	3	2	2	2,0680	4,30
28,53	2	2	1	3,1265	9,18	43,86	1	1	4	2,0627	9,78
29,17	1	3	2	3,0592	82,39	45,42	0	8	0	1,9951	3,52
29,42	2	3	0	3,0341	15,79	46,62	1	7	2	1,9467	3,49
29,80	0	5	1	2,9956	23,91	46,78	2	7	0	1,9402	4,26
30,42	0	4	2	2,9360	34,73	46,86	1	3	4	1,9373	5,94
31,21	2	3	1	2,8638	100,00	46,99	2	6	2	1,9323	7,25
31,43	0	1	3	2,8442	2,19	47,71	0	4	4	1,9049	7,80
31,80	2	0	2	2,8116	10,90	48,01	2	7	1	1,8934	19,02
32,22	1	5	1	2,7760	29,54	48,37	1	8	1	1,8803	4,89
32,30	2	1	2	2,7690	6,67	48,53	3	0	3	1,8744	5,25
32,80	1	4	2	2,7284	33,07	48,88	3	1	3	1,8616	5,53
33,26	1	0	3	2,6917	12,18	49,30	4	0	0	1,8468	8,06
33,66	0	6	0	2,6601	32,39	49,94	3	2	3	1,8248	5,81

Tabelle A 53: Gitterparameter und Reflexliste von Sr₃Yb₂(BO₃)₄ (rel. Int. > 2,0 %)

Strontium Ytterbium Borat						Sr ₃ Yb ₂ (BO ₃) ₄				GoF = 1,27	
Pnma						Z = 4	a = 7,381(6) Å	b = 15,893(2) Å	c = 8,660(3) Å		
						V = 1015,99(7) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °		
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
11,13	0	2	0	7,9466	4,39	48,19	1	6	3	1,8869	12,53
16,72	1	1	1	5,2966	9,17	48,28	3	4	2	1,8836	2,00
19,33	1	2	1	4,5873	16,78	48,57	1	8	1	1,8730	2,88
19,63	0	3	1	4,5192	2,65	48,58	3	0	3	1,8726	10,05
20,49	0	0	2	4,3301	3,23	48,94	3	1	3	1,8597	7,00
22,36	0	4	0	3,9733	10,52	49,08	2	1	4	1,8547	5,17
23,06	1	3	1	3,8543	45,35	49,23	2	5	3	1,8494	2,01
23,38	0	2	2	3,8023	23,81	49,47	1	4	4	1,8411	12,57
23,80	1	0	2	3,7349	38,10	50,00	3	2	3	1,8227	11,37
24,09	2	0	0	3,6908	3,10	50,53	4	0	1	1,8049	8,47
24,46	1	1	2	3,6359	11,22	51,45	3	5	2	1,7748	7,85
26,61	2	2	0	3,3474	18,01	51,74	3	3	3	1,7656	8,90
26,83	2	1	1	3,3204	31,53	51,75	3	6	1	1,7649	7,97
27,47	1	4	1	3,2439	6,41	52,10	1	8	2	1,7540	10,11
28,57	2	2	1	3,1223	3,09	52,25	2	8	0	1,7493	12,32
29,23	1	3	2	3,0526	76,20	52,47	4	3	0	1,7427	2,94
29,47	2	3	0	3,0283	18,34	52,73	1	7	3	1,7346	10,26
29,92	0	5	1	2,9840	22,45	52,87	0	9	1	1,7303	8,99
30,51	0	4	2	2,9276	43,03	53,15	0	1	5	1,7219	3,91
31,27	2	3	1	2,8586	100,00	53,39	2	8	1	1,7147	2,93
31,83	2	0	2	2,8089	12,33	53,60	4	3	1	1,7085	3,88
32,33	1	5	1	2,7665	35,69	54,10	3	4	3	1,6939	24,56
32,34	2	1	2	2,7660	11,98	54,23	2	4	4	1,6901	4,95
32,89	1	4	2	2,7214	30,02	54,30	4	1	2	1,6881	4,22
33,10	2	4	0	2,7042	2,01	54,81	4	4	0	1,6737	3,26
33,30	1	0	3	2,6885	13,85	55,68	1	2	5	1,6495	2,36
33,79	1	1	3	2,6508	50,32	55,91	4	4	1	1,6433	5,58
33,81	0	6	0	2,6489	21,62	57,72	4	5	0	1,5959	5,84
34,73	2	4	1	2,5812	8,67	59,13	4	4	2	1,5611	3,47
35,38	0	3	3	2,5349	6,78	59,16	2	1	5	1,5604	3,00
37,30	2	5	0	2,4085	17,64	59,43	3	3	4	1,5539	3,03
37,99	3	0	1	2,3669	38,26	60,34	1	7	4	1,5327	3,13
39,25	2	4	2	2,2936	6,15	60,49	1	10	1	1,5293	2,08
39,60	2	0	3	2,2738	4,98	60,82	3	8	1	1,5217	3,23
39,70	3	2	1	2,2684	6,70	61,64	2	3	5	1,5035	2,35
40,02	2	1	3	2,2509	2,25	62,19	4	6	1	1,4915	2,30
41,77	3	3	1	2,1610	10,37	62,28	1	5	5	1,4896	2,15
41,95	2	6	0	2,1520	3,68	62,92	1	9	3	1,4760	5,69
43,29	2	6	1	2,0885	3,08	63,76	2	4	5	1,4585	2,80
43,92	1	1	4	2,0600	16,61	64,51	0	0	6	1,4434	3,12
45,63	0	8	0	1,9867	5,25	64,56	2	7	4	1,4423	2,32
46,79	1	7	2	1,9401	3,72	65,90	3	0	5	1,4163	2,18
46,94	1	3	4	1,9341	13,19	66,82	4	1	4	1,3990	3,84
47,12	2	6	2	1,9271	16,32	68,89	3	9	2	1,3619	2,50
47,80	0	4	4	1,9011	12,56	69,14	4	3	4	1,3576	2,24
48,18	2	7	1	1,8874	17,85	69,52	5	3	2	1,3511	7,30

Tabelle A 54: Gitterparameter und Reflexliste von Ba₃La₂(BO₃)₄ (rel. Int. > 2,0 %)

Barium Lanthan Borat			Ba ₃ La ₂ (BO ₃) ₄			GoF = 1,24					
Pnma			Z = 4	a = 7,740(3) Å	b = 17,026(6) Å	c = 9,051(5) Å					
			V = 1192,90(1) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °					
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
18,32	1	2	1	4,8392	12,99	43,81	1	7	2	2,0648	3,82
18,44	0	3	1	4,8080	2,43	44,32	2	6	2	2,0422	14,39
19,60	0	0	2	4,5254	4,70	44,64	1	3	4	2,0284	14,57
20,85	0	4	0	4,2563	12,52	45,12	2	7	1	2,0080	8,37
21,74	1	3	1	4,0842	29,62	45,18	3	5	1	2,0053	2,11
22,23	0	2	2	3,9959	13,03	45,28	1	8	1	2,0013	3,80
22,74	1	0	2	3,9067	39,49	45,35	0	4	4	1,9980	17,16
23,34	1	1	2	3,8077	16,71	45,38	1	6	3	1,9971	14,13
23,56	2	1	0	3,7736	2,98	46,26	3	0	3	1,9608	12,12
25,00	2	0	1	3,5583	2,34	46,52	2	5	3	1,9504	2,47
25,06	1	2	2	3,5506	2,03	46,59	3	1	3	1,9480	4,99
25,26	2	2	0	3,5230	21,59	46,77	2	1	4	1,9407	4,70
25,55	2	1	1	3,4830	21,97	46,92	4	0	0	1,9350	7,37
27,14	2	2	1	3,2830	2,59	46,93	1	4	4	1,9346	5,42
27,70	1	3	2	3,2180	77,65	47,15	0	8	2	1,9259	2,62
27,88	2	3	0	3,1973	24,17	47,55	3	2	3	1,9108	9,30
27,97	0	5	1	3,1870	21,70	48,04	4	0	1	1,8923	10,88
28,77	0	4	2	3,1005	28,04	48,36	4	1	1	1,8807	2,68
29,61	2	3	1	3,0148	100,00	48,53	2	7	2	1,8744	2,82
30,30	1	5	1	2,9470	31,69	48,59	3	5	2	1,8722	17,43
30,37	2	0	2	2,9412	11,60	48,68	1	8	2	1,8689	6,08
30,83	2	1	2	2,8983	9,15	48,71	3	6	1	1,8679	13,56
31,05	1	4	2	2,8782	30,29	48,79	2	8	0	1,8649	12,68
31,50	0	6	0	2,8376	16,49	49,12	3	3	3	1,8533	6,07
31,81	1	0	3	2,8110	8,60	49,16	0	9	1	1,8518	4,50
32,17	2	2	2	2,7800	2,03	49,52	1	7	3	1,8393	7,78
32,25	1	1	3	2,7735	35,69	49,75	1	5	4	1,8311	3,76
32,78	2	4	1	2,7300	11,93	49,89	2	8	1	1,8265	5,42
33,55	1	2	3	2,6693	2,39	50,82	4	3	1	1,7951	5,27
33,61	0	3	3	2,6640	4,43	51,26	3	4	3	1,7810	23,36
35,07	2	5	0	2,5564	12,22	51,43	2	4	4	1,7754	4,63
35,08	1	6	1	2,5558	5,88	51,61	4	1	2	1,7696	2,49
36,17	3	0	1	2,4812	41,45	52,91	4	4	1	1,7291	6,94
37,13	2	4	2	2,4197	5,53	53,97	4	3	2	1,6977	3,41
37,73	3	2	1	2,3820	5,18	54,50	4	5	0	1,6824	6,09
37,78	2	0	3	2,3794	6,90	56,32	2	1	5	1,6322	6,41
39,21	1	6	2	2,2959	2,67	56,42	3	3	4	1,6296	4,73
39,34	2	6	0	2,2884	7,69	56,78	1	7	4	1,6200	2,11
39,61	3	3	1	2,2734	8,26	56,96	3	8	1	1,6154	2,17
39,89	0	5	3	2,2582	3,35	58,55	2	3	5	1,5753	2,53
41,25	0	2	4	2,1869	2,17	58,79	1	9	3	1,5695	4,37
41,63	3	2	2	2,1675	3,16	60,45	2	4	5	1,5301	2,09
41,90	1	1	4	2,1544	17,03	61,92	1	6	5	1,4973	3,31
42,44	0	8	0	2,1282	3,53	64,39	3	9	2	1,4457	4,19
42,94	1	2	4	2,1045	3,00	65,80	5	3	2	1,4182	5,24

Tabelle A 55: Gitterparameter und Reflexliste von Ba₃Nd₂(BO₃)₄ (rel. Int. > 2,0 %)

Barium Neodym Borat				Ba₃Nd₂(BO₃)₄				GoF = 1,02			
Pnma				Z = 4	a = 7,738(4) Å	b = 16,807(5) Å	c = 8,979(9) Å				
				V = 1167,95(2) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °				
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
16,00	1	1	1	5,5350	4,09	42,29	3	4	1	2,1352	2,83
18,44	1	2	1	4,8078	17,13	43,02	0	8	0	2,1009	4,01
18,65	0	3	1	4,7532	3,68	44,32	1	7	2	2,0423	4,44
19,76	0	0	2	4,4899	6,27	44,71	2	6	2	2,0251	13,01
21,13	0	4	0	4,2018	17,14	45,02	1	3	4	2,0122	11,85
21,93	1	3	1	4,0502	42,46	45,56	2	7	1	1,9895	8,98
22,43	0	2	2	3,9601	19,82	45,79	0	4	4	1,9801	5,93
22,88	1	0	2	3,8835	45,39	45,84	1	8	1	1,9778	21,19
23,49	1	1	2	3,7838	18,11	45,93	3	4	2	1,9743	2,37
25,04	2	0	1	3,5533	4,29	46,43	3	0	3	1,9540	10,28
25,24	1	2	2	3,5253	2,28	46,77	3	1	3	1,9409	3,43
25,32	2	2	0	3,5145	18,33	46,93	4	0	0	1,9346	2,92
25,60	2	1	1	3,4765	28,02	47,07	2	1	4	1,9289	5,29
26,07	1	4	1	3,4151	2,45	47,26	4	1	0	1,9219	4,15
27,93	1	3	2	3,1917	86,03	47,35	1	4	4	1,9183	11,59
28,00	2	3	0	3,1837	20,12	47,76	0	8	2	1,9029	7,41
28,33	0	5	1	3,1481	42,75	48,07	4	0	1	1,8912	5,40
29,08	0	4	2	3,0679	35,37	48,87	3	5	2	1,8621	9,41
29,75	2	3	1	3,0007	100,00	49,00	2	7	2	1,8574	7,10
30,47	2	0	2	2,9310	12,69	49,03	3	6	1	1,8565	4,00
30,63	1	5	1	2,9161	32,04	49,27	1	8	2	1,8479	12,27
30,95	2	1	2	2,8874	10,37	49,32	2	8	0	1,8463	3,53
31,34	1	4	2	2,8520	30,88	49,35	3	3	3	1,8450	2,76
31,92	0	6	0	2,8012	21,09	49,83	4	3	0	1,8286	7,92
32,03	1	0	3	2,7917	10,72	50,07	1	7	3	1,8204	7,74
32,49	1	1	3	2,7540	39,51	50,43	2	6	3	1,8082	3,52
32,99	2	4	1	2,7132	12,22	50,92	4	3	1	1,7919	4,98
33,93	0	3	3	2,6401	7,14	51,54	3	4	3	1,7718	17,85
35,34	2	5	0	2,5376	12,50	51,69	4	1	2	1,7668	2,19
36,20	3	0	1	2,4792	34,06	51,83	2	4	4	1,7627	3,39
37,38	2	4	2	2,4039	4,22	53,06	4	4	1	1,7246	3,62
37,80	3	2	1	2,3779	2,96	54,70	4	5	0	1,6767	4,11
37,98	2	0	3	2,3675	5,03	56,16	4	4	2	1,6364	2,98
39,69	2	6	0	2,2690	9,73	56,75	3	3	4	1,6210	6,81
39,73	3	3	1	2,2671	3,07	57,46	3	6	3	1,6026	4,28
40,31	0	5	3	2,2355	2,21	59,52	1	5	5	1,5519	3,90
42,04	1	5	3	2,1476	2,12	65,00	5	4	1	1,4337	2,03
42,22	1	1	4	2,1385	12,69	65,93	5	3	2	1,4157	2,75

Tabelle A 56: Gitterparameter und Reflexliste von Ba₃Sm₂(BO₃)₄ (rel. Int. > 2,0 %)

Barium Samarium Borat			Ba ₃ Sm ₂ (BO ₃) ₄			GoF = 0,93					
Pnma			Z = 4	a = 7,733(4) Å	b = 16,719(4) Å	c = 8,952(7) Å					
			V = 1157,56(4) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °					
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
16,03	1	1	1	5,5235	3,76	39,84	2	6	0	2,2607	7,93
18,49	1	2	1	4,7941	14,84	42,35	1	1	4	2,1324	11,53
18,74	0	3	1	4,7312	3,34	42,38	3	4	1	2,1310	2,61
19,82	0	0	2	4,4763	6,37	43,26	0	8	0	2,0899	4,35
21,24	0	4	0	4,1798	17,17	43,43	1	2	4	2,0822	2,25
22,01	1	3	1	4,0358	42,19	44,53	1	7	2	2,0331	2,94
22,51	0	2	2	3,9461	20,92	44,88	2	6	2	2,0179	12,76
22,94	1	0	2	3,8741	39,75	45,17	1	3	4	2,0059	11,90
22,98	2	0	0	3,8666	2,85	45,75	2	7	1	1,9816	8,45
23,55	1	1	2	3,7741	17,03	45,96	0	4	4	1,9731	10,62
23,60	2	1	0	3,7672	2,14	46,08	1	8	1	1,9682	17,22
25,07	2	0	1	3,5497	3,76	46,52	3	0	3	1,9508	10,11
25,32	1	2	2	3,5150	3,15	46,85	3	1	3	1,9376	3,24
25,36	2	2	0	3,5094	15,50	47,06	2	5	3	1,9295	3,12
25,63	2	1	1	3,4723	30,22	47,20	2	1	4	1,9242	4,72
26,18	1	4	1	3,4013	3,06	47,52	1	4	4	1,9118	8,21
28,03	1	3	2	3,1810	74,49	47,84	3	2	3	1,8997	7,39
28,06	2	3	0	3,1769	25,47	48,11	4	0	1	1,8898	3,84
28,47	0	5	1	3,1325	48,73	48,18	2	2	4	1,8871	2,70
29,21	0	4	2	3,0550	34,62	49,00	3	5	2	1,8575	8,87
29,82	2	3	1	2,9940	100,00	49,17	3	6	1	1,8514	6,23
30,53	2	0	2	2,9261	11,89	49,20	2	7	2	1,8503	4,10
30,77	1	5	1	2,9033	31,34	49,52	1	8	2	1,8393	5,04
31,00	2	1	2	2,8823	9,72	49,54	2	8	0	1,8385	12,91
31,46	1	4	2	2,8413	27,41	50,11	0	9	1	1,8189	7,11
31,49	2	4	0	2,8384	4,87	50,29	1	7	3	1,8128	8,84
32,10	0	6	0	2,7865	15,24	50,65	2	8	1	1,8010	2,29
32,12	1	0	3	2,7841	16,80	50,99	4	3	1	1,7897	3,76
32,58	1	1	3	2,7463	39,41	51,67	3	4	3	1,7677	16,62
33,08	2	4	1	2,7057	10,95	51,75	4	1	2	1,7650	4,73
34,05	0	3	3	2,6308	6,91	53,15	4	4	1	1,7220	3,85
35,46	2	5	0	2,5292	13,46	54,80	4	5	0	1,6737	4,48
36,23	3	0	1	2,4771	32,46	56,89	3	3	4	1,6173	4,01
37,49	2	4	2	2,3971	3,30	59,80	1	9	3	1,5453	3,31
37,85	3	2	1	2,3750	2,84	63,20	5	3	1	1,4701	2,74
38,06	2	0	3	2,3624	3,70	65,27	3	9	2	1,4283	2,92
39,79	3	3	1	2,2636	4,02	66,02	5	3	2	1,4140	4,24

Tabelle A 57: Gitterparameter und Reflexliste von Ba₃Eu₂(BO₃)₄ (rel. Int. > 2,0 %)

Barium Europium Borat			Ba ₃ Eu ₂ (BO ₃) ₄			GoF = 0,91					
Pnma			Z = 4	a = 7,727(8) Å	b = 16,668(0) Å	c = 8,947(5) Å					
			V = 1152,50(0) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °					
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
16,05	1	1	1	5,5184	2,83	44,97	2	6	2	2,0140	13,06
18,52	1	2	1	4,7871	14,91	45,21	1	3	4	2,0040	12,84
18,79	0	3	1	4,7199	4,29	45,86	2	7	1	1,9770	8,78
19,83	0	0	2	4,4736	6,75	46,01	0	4	4	1,9708	10,36
21,31	0	4	0	4,1669	18,48	46,09	3	4	2	1,9677	3,63
22,05	1	3	1	4,0280	41,09	46,14	1	6	3	1,9659	6,20
22,54	0	2	2	3,9416	19,95	46,22	1	8	1	1,9627	9,54
22,95	1	0	2	3,8717	43,18	46,55	3	0	3	1,9495	10,12
23,57	1	1	2	3,7713	16,56	46,88	3	1	3	1,9363	3,63
25,08	2	0	1	3,5472	4,92	47,13	2	5	3	1,9267	4,43
25,39	2	2	0	3,5054	16,59	47,58	1	4	4	1,9097	7,76
25,66	2	1	1	3,4695	30,67	47,88	3	2	3	1,8982	8,70
26,24	1	4	1	3,3936	3,07	48,14	0	8	2	1,8887	2,16
28,07	1	3	2	3,1765	79,70	48,15	4	0	1	1,8884	3,08
28,11	2	3	0	3,1722	20,09	48,22	2	2	4	1,8857	3,08
28,55	0	5	1	3,1238	25,90	48,47	4	1	1	1,8764	2,19
29,27	0	4	2	3,0491	32,34	49,08	3	5	2	1,8548	8,64
29,86	2	3	1	2,9898	100,00	49,27	3	6	1	1,8481	6,98
30,55	2	0	2	2,9242	12,27	49,31	2	7	2	1,8464	3,51
30,85	1	5	1	2,8961	30,03	49,65	1	8	2	1,8347	4,63
31,02	2	1	2	2,8802	9,29	49,67	2	8	0	1,8339	12,81
31,52	1	4	2	2,8363	25,34	50,27	0	9	1	1,8135	7,20
31,55	2	4	0	2,8333	6,89	50,40	1	7	3	1,8091	8,63
32,14	1	0	3	2,7824	12,53	50,78	2	8	1	1,7965	3,27
32,20	0	6	0	2,7780	19,52	51,04	4	3	1	1,7880	4,70
32,60	1	1	3	2,7444	40,07	51,31	0	1	5	1,7793	2,39
33,14	2	4	1	2,7011	11,47	51,73	3	4	3	1,7658	16,15
34,09	0	3	3	2,6278	7,10	51,79	4	1	2	1,7637	3,42
35,54	2	5	0	2,5240	13,18	52,05	2	4	4	1,7557	3,11
36,26	3	0	1	2,4754	30,25	53,21	4	4	1	1,7200	4,78
37,55	2	4	2	2,3936	2,16	54,88	4	5	0	1,6715	3,05
37,89	3	2	1	2,3729	2,73	56,94	3	3	4	1,6159	4,32
38,08	2	0	3	2,3609	4,09	57,80	2	2	5	1,5938	2,86
39,84	3	3	1	2,2611	4,84	59,11	4	6	1	1,5617	2,59
39,94	2	6	0	2,2555	6,70	59,95	1	9	3	1,5417	3,64
42,38	1	1	4	2,1310	11,81	62,03	4	6	2	1,4949	2,43
42,44	3	4	1	2,1282	2,14	65,43	3	9	2	1,4253	2,84
43,40	0	8	0	2,0835	4,25	66,08	5	3	2	1,4128	3,83
44,64	1	7	2	2,0282	4,27						

Tabelle A 58: Gitterparameter und Reflexliste von Ba₃Gd₂(BO₃)₄ (rel. Int. > 2,0 %)

Barium Gadolinium Borat				Ba ₃ Gd ₂ (BO ₃) ₄			GoF = 0,97				
Pnma				Z = 4	a = 7,721(0) Å	b = 16,618(3) Å	c = 8,942(6) Å				
				V = 1147,42(9) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °				
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
16,06	1	1	1	5,5132	2,97	43,53	0	8	0	2,0773	3,67
18,55	1	2	1	4,7802	14,85	44,75	1	7	2	2,0235	3,59
18,83	0	3	1	4,7091	4,17	45,06	2	6	2	2,0102	10,64
19,84	0	0	2	4,4713	6,89	45,25	1	3	4	2,0023	13,20
21,37	0	4	0	4,1546	16,79	45,97	2	7	1	1,9725	6,54
22,09	1	3	1	4,0204	40,24	46,07	0	4	4	1,9687	10,58
22,56	0	2	2	3,9374	19,43	46,22	1	6	3	1,9624	12,08
22,97	1	0	2	3,8693	40,26	46,35	1	8	1	1,9573	6,11
23,59	1	1	2	3,7685	16,23	46,58	3	0	3	1,9481	9,71
25,10	2	0	1	3,5443	4,17	46,92	3	1	3	1,9348	2,68
25,37	1	2	2	3,5076	3,35	47,04	4	0	0	1,9303	2,50
25,42	2	2	0	3,5011	14,78	47,20	2	5	3	1,9239	3,91
25,68	2	1	1	3,4664	31,66	47,63	1	4	4	1,9077	7,99
26,30	1	4	1	3,3861	3,79	47,93	3	2	3	1,8966	7,79
27,33	2	2	1	3,2601	2,41	48,19	4	0	1	1,8868	3,91
28,11	1	3	2	3,1721	75,41	48,27	0	8	2	1,8839	2,85
28,15	2	3	0	3,1672	22,36	48,52	4	1	1	1,8748	2,01
28,63	0	5	1	3,1154	27,09	49,15	3	5	2	1,8521	8,13
29,32	0	4	2	3,0435	33,69	49,36	3	6	1	1,8448	7,95
29,90	2	3	1	2,9855	100,00	49,42	2	7	2	1,8426	3,10
30,57	2	0	2	2,9221	12,71	49,81	2	8	0	1,8293	11,48
30,93	1	5	1	2,8891	30,09	49,89	2	3	4	1,8265	6,29
31,05	2	1	2	2,8779	10,09	50,42	0	9	1	1,8083	3,07
31,57	1	4	2	2,8315	26,81	50,51	1	7	3	1,8056	12,56
31,61	2	4	0	2,8280	7,09	50,91	2	8	1	1,7922	3,04
32,16	1	0	3	2,7808	9,37	51,10	4	3	1	1,7860	4,75
32,30	0	6	0	2,7697	22,67	51,79	3	4	3	1,7638	9,23
32,62	1	1	3	2,7427	39,68	51,84	4	1	2	1,7622	12,23
33,20	2	4	1	2,6964	12,94	52,11	2	4	4	1,7538	2,22
34,13	0	3	3	2,6249	6,96	52,21	4	4	0	1,7505	2,64
35,62	2	5	0	2,5188	13,08	53,28	4	4	1	1,7179	5,17
36,29	3	0	1	2,4733	31,76	54,97	4	5	0	1,6692	3,10
37,60	2	4	2	2,3901	2,38	56,99	3	3	4	1,6145	3,26
37,93	3	2	1	2,3705	2,61	57,07	4	1	3	1,6126	2,60
38,11	2	0	3	2,3594	3,08	57,94	4	2	3	1,5903	2,67
39,89	3	3	1	2,2584	3,87	59,29	2	3	5	1,5574	2,60
40,00	1	6	2	2,2522	2,41	60,10	1	9	3	1,5383	2,48
40,03	2	6	0	2,2504	4,30	62,24	0	0	6	1,4904	3,17
42,41	1	1	4	2,1297	11,64	63,98	5	1	2	1,4540	2,18
42,50	3	4	1	2,1252	3,10	66,15	5	3	2	1,4114	3,49

Tabelle A 59: Gitterparameter und Reflexliste von Ba₃Dy₂(BO₃)₄ (rel. Int. > 2,0 %)

Barium Dysprosium Borat				Ba₃Dy₂(BO₃)₄			GoF = 1,02				
Pnma				Z = 4	a = 7,699(1) Å	b = 16,515(7) Å	c = 8,960(9) Å				
				V = 1139,42(9) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °				
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
16,09	1	1	1	5,5034	3,36	45,24	2	6	2	2,0026	13,95
18,60	1	2	1	4,7663	13,22	45,88	3	5	1	1,9764	3,42
18,91	0	3	1	4,6891	4,07	46,06	0	4	4	1,9688	11,86
19,81	0	0	2	4,4790	4,99	46,22	2	7	1	1,9625	12,49
21,51	0	4	0	4,1277	19,38	46,29	3	4	2	1,9598	3,77
22,18	1	3	1	4,0046	44,34	46,35	1	6	3	1,9574	14,74
22,57	0	2	2	3,9370	21,23	46,63	3	0	3	1,9463	8,65
22,95	1	0	2	3,8714	35,88	46,63	1	8	1	1,9462	7,41
23,58	1	1	2	3,7692	15,92	46,97	3	1	3	1,9329	5,72
25,16	2	0	1	3,5361	4,57	47,19	4	0	0	1,9245	5,21
25,52	2	2	0	3,4882	17,98	47,23	2	1	4	1,9228	4,24
25,74	2	1	1	3,4577	33,63	47,64	1	4	4	1,9074	7,51
26,42	1	4	1	3,3705	2,77	47,99	3	2	3	1,8944	9,82
28,16	1	3	2	3,1666	72,74	48,24	2	2	4	1,8849	2,41
28,27	2	3	0	3,1541	22,67	48,33	4	0	1	1,8816	7,09
28,79	0	5	1	3,0986	23,02	48,53	4	2	0	1,8743	2,32
29,40	0	4	2	3,0356	35,91	48,67	4	1	1	1,8695	2,58
30,01	2	3	1	2,9751	100,00	49,32	3	5	2	1,8463	9,17
30,60	2	0	2	2,9192	15,33	49,58	3	6	1	1,8370	8,82
31,09	2	1	2	2,8747	24,28	49,64	3	3	3	1,8350	5,41
31,09	1	5	1	2,8745	16,52	50,03	1	8	2	1,8215	10,07
31,66	1	4	2	2,8240	33,08	50,10	2	8	0	1,8191	8,91
31,76	2	4	0	2,8151	3,00	50,18	4	3	0	1,8167	3,96
32,12	1	0	3	2,7842	11,34	50,61	1	5	4	1,8023	2,72
32,51	2	2	2	2,7523	13,64	50,68	1	7	3	1,7999	9,60
32,51	0	6	0	2,7521	7,64	50,75	0	9	1	1,7976	7,85
32,59	1	1	3	2,7455	42,14	51,20	2	8	1	1,7828	4,32
33,34	2	4	1	2,6856	10,38	51,27	4	3	1	1,7805	7,03
34,13	0	3	3	2,6250	6,60	51,65	4	0	2	1,7683	3,82
35,80	2	5	0	2,5064	12,89	51,89	3	4	3	1,7605	22,48
36,12	1	3	3	2,4845	2,72	51,97	4	1	2	1,7582	3,55
36,39	3	0	1	2,4667	34,34	52,14	2	4	4	1,7528	3,36
37,71	2	4	2	2,3836	2,64	52,41	4	4	0	1,7443	2,36
38,04	3	2	1	2,3635	3,47	53,47	4	4	1	1,7122	6,02
38,11	2	0	3	2,3595	3,49	55,19	4	5	0	1,6628	3,37
40,02	3	3	1	2,2511	5,82	55,36	1	9	2	1,6581	2,12
40,17	1	6	2	2,2432	2,15	56,22	4	5	1	1,6349	2,98
40,25	2	6	0	2,2387	3,27	57,04	3	3	4	1,6134	3,42
41,75	0	2	4	2,1618	2,17	57,98	1	7	4	1,5894	2,04
42,35	1	1	4	2,1327	12,25	60,37	1	9	3	1,5321	3,69
42,43	1	5	3	2,1288	3,00	62,10	0	0	6	1,4934	2,02
42,66	3	4	1	2,1176	2,12	63,98	4	1	4	1,4541	3,81
43,82	3	3	2	2,0641	3,99	66,35	4	8	0	1,4077	2,75
44,96	1	7	2	2,0146	6,83	66,35	5	3	2	1,4077	2,67
45,23	1	3	4	2,0033	14,82						

Tabelle A 60: Gitterparameter und Reflexliste von Ba₃Y₂(BO₃)₄ (rel. Int. > 2,0 %)

Barium Yttrium Borat				Ba₃Y₂(BO₃)₄				GoF = 1,05			
Pnma				Z = 4	a = 7,693(7) Å	b = 16,469(8) Å	c = 8,969(7) Å				
				V = 1136,58(1) Å ³	α = 90 °	β = 90 °	γ = 90 °				
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
18,61	1	2	1	4,7634	9,41	46,32	2	7	1	1,9587	7,96
18,94	0	3	1	4,6823	5,88	46,33	3	4	2	1,9583	3,82
19,78	0	0	2	4,4847	7,60	46,39	1	6	3	1,9556	14,95
21,57	0	4	0	4,1173	17,09	46,62	3	0	3	1,9466	10,52
22,21	1	3	1	3,9998	33,77	46,75	1	8	1	1,9416	3,41
22,56	0	2	2	3,9385	16,01	46,97	3	1	3	1,9331	5,04
22,94	1	0	2	3,8745	29,52	47,20	2	1	4	1,9240	3,52
23,57	1	1	2	3,7715	15,73	47,22	4	0	0	1,9234	7,31
25,17	2	0	1	3,5354	4,00	47,63	1	4	4	1,9078	5,38
25,54	2	2	0	3,4852	16,17	47,99	3	2	3	1,8944	8,15
25,75	2	1	1	3,4566	35,41	48,36	4	0	1	1,8807	6,44
28,17	1	3	2	3,1655	73,06	48,69	4	1	1	1,8685	4,18
28,31	2	3	0	3,1504	20,40	49,37	3	5	2	1,8445	7,02
28,85	0	5	1	3,0920	15,28	49,65	3	3	3	1,8347	3,70
29,43	0	4	2	3,0330	27,43	49,66	3	6	1	1,8343	6,89
30,04	2	3	1	2,9723	100,00	50,14	1	8	2	1,8180	7,45
30,59	2	0	2	2,9198	16,19	50,22	4	3	0	1,8152	4,94
31,08	2	1	2	2,8750	10,41	50,22	2	8	0	1,8151	5,79
31,15	1	5	1	2,8690	17,51	50,74	1	7	3	1,7978	7,94
31,69	1	4	2	2,8217	30,95	50,89	0	9	1	1,7930	7,26
32,09	1	0	3	2,7868	11,40	51,18	0	1	5	1,7834	2,00
32,56	1	1	3	2,7477	42,35	51,31	4	3	1	1,7792	4,15
32,60	0	6	0	2,7449	5,22	51,31	2	8	1	1,7791	4,89
33,38	2	4	1	2,6823	10,26	51,67	4	0	2	1,7677	3,28
34,12	0	3	3	2,6257	7,10	51,92	3	4	3	1,7598	23,62
35,86	2	5	0	2,5020	9,68	52,14	2	4	4	1,7529	4,00
36,41	3	0	1	2,4657	45,56	52,47	4	4	0	1,7426	2,19
38,07	3	2	1	2,3621	4,06	53,53	4	4	1	1,7107	9,23
40,05	3	3	1	2,2493	5,08	55,26	4	5	0	1,6610	3,57
40,33	2	6	0	2,2344	5,82	56,28	4	5	1	1,6332	2,75
42,31	1	1	4	2,1347	11,41	57,03	3	3	4	1,6135	2,36
42,71	3	4	1	2,1154	2,39	58,02	1	7	4	1,5883	2,55
43,95	0	8	0	2,0587	2,71	60,47	1	9	3	1,5297	2,38
45,04	1	7	2	2,0111	6,90	63,02	1	6	5	1,4739	2,58
45,21	1	3	4	2,0042	14,23	63,97	4	1	4	1,4542	2,54
45,31	2	6	2	1,9999	12,53	64,19	5	1	2	1,4498	2,87
45,94	3	5	1	1,9739	2,64	66,06	4	7	2	1,4133	2,95
46,05	0	4	4	1,9693	9,91	66,40	5	3	2	1,4069	3,63

Tabelle A 61: Gitterparameter und Reflexliste von Ba₃Yb₂(BO₃)₄ (rel. Int. > 5,0 %)

Barium Ytterbium Borat				Ba ₆ Yb ₅ (BO ₃) ₉				GoF = 1,21			
C2/C				Z = 4	a = 13,103(5) Å	b = 9,992(4) Å	c = 20,542(0) Å				
				V = 2575,22(2) Å ³	α = 90 °	β = 106,77 °	γ = 90 °				
Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]	Pos. [°2θ]	h	k	l	d-Wert [Å]	rel. Int. [%]
11,38	-1	1	1	7,7720	18,02	37,58	-5	1	5	2,3917	9,04
12,89	1	1	1	6,8638	6,84	40,45	0	4	4	2,2282	5,23
15,67	1	1	2	5,6517	10,06	43,57	-4	2	8	2,0756	5,49
15,97	-1	1	3	5,5440	11,71	44,98	1	1	9	2,0137	8,24
19,49	-1	1	4	4,5513	7,99	45,00	3	3	5	2,0128	9,66
19,90	0	2	2	4,4588	100,00	45,19	5	3	0	2,0049	5,69
22,33	0	2	3	3,9773	8,19	45,24	0	2	9	2,0030	7,54
22,34	-2	2	1	3,9756	12,82	45,35	-2	4	6	1,9982	8,01
22,72	2	2	0	3,9115	16,51	45,43	-1	1	10	1,9949	7,55
23,00	1	1	4	3,8641	36,05	45,59	4	2	5	1,9884	6,78
23,38	-1	1	5	3,8019	67,99	45,62	-4	4	2	1,9868	34,36
23,96	2	2	1	3,7109	5,92	45,77	-5	3	5	1,9806	6,86
24,29	-2	2	3	3,6617	16,75	45,93	1	5	0	1,9744	5,28
24,63	3	1	1	3,6114	34,62	45,95	5	1	4	1,9734	6,54
25,23	-3	1	4	3,5276	46,04	45,98	-6	2	1	1,9721	7,84
27,19	-4	0	2	3,2766	31,51	46,88	-4	2	9	1,9364	5,57
27,67	1	3	0	3,2215	15,19	47,02	2	2	8	1,9311	24,84
27,70	-3	1	5	3,2175	7,53	47,33	1	5	2	1,9190	13,17
28,38	1	3	1	3,1423	14,90	47,45	-1	5	3	1,9147	13,69
28,41	4	0	0	3,1386	22,96	47,83	-2	2	10	1,9000	17,39
28,57	2	2	3	3,1214	10,76	48,34	5	3	2	1,8815	15,17
28,84	0	2	5	3,0927	21,33	48,89	3	1	8	1,8615	8,66
28,97	-4	0	4	3,0796	18,00	49,34	-5	3	7	1,8457	14,95
29,79	1	3	2	2,9966	45,92	49,64	-7	1	4	1,8350	8,60
29,79	3	1	3	2,9965	81,72	50,14	-3	1	11	1,8179	6,10
29,96	-1	3	3	2,9802	67,80	50,23	-3	5	2	1,8147	8,65
30,69	-3	1	6	2,9110	56,50	50,49	2	4	6	1,8060	34,19
31,39	1	1	6	2,8477	41,03	50,56	-7	1	1	1,8039	12,61
31,66	2	2	4	2,8239	14,28	51,10	-2	4	8	1,7861	32,65
31,80	-1	1	7	2,8115	23,10	51,31	-7	1	6	1,7791	11,20
32,29	-2	2	6	2,7702	16,00	51,40	3	5	1	1,7763	6,56
33,69	4	2	0	2,6579	56,14	51,82	-6	2	8	1,7630	7,39
33,84	-3	3	1	2,6470	13,07	52,18	6	0	4	1,7514	12,82
33,93	-3	3	2	2,6402	19,26	52,69	5	1	6	1,7359	6,13
34,17	-4	2	4	2,6217	29,23	53,94	-6	0	10	1,6984	11,89
34,28	2	0	6	2,6137	13,93	55,94	0	6	2	1,6425	9,16
34,36	1	3	4	2,6078	5,74	58,12	-6	4	6	1,5859	5,28
34,37	3	3	0	2,6068	5,01	59,84	-8	2	2	1,5442	6,36
34,63	-1	3	5	2,5884	7,92	59,91	7	3	1	1,5427	6,08
35,10	-2	0	8	2,5543	11,02	61,05	1	3	11	1,5166	9,95
35,38	-5	1	2	2,5349	7,35	61,67	5	5	2	1,5029	5,37
35,53	-5	1	3	2,5249	9,52	61,91	6	2	6	1,4977	11,01
35,82	-4	2	5	2,5048	12,43	62,52	-5	5	7	1,4845	6,77
35,90	0	4	0	2,4994	6,13	63,14	4	6	0	1,4713	5,22
35,94	-3	3	4	2,4966	5,42	64,56	-5	3	12	1,4424	5,61
36,23	-1	1	8	2,4774	12,58	66,49	0	0	14	1,4052	6,75
37,10	4	2	2	2,4211	5,60	68,45	-8	4	4	1,3696	10,47

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1:	Schematischer Aufbau von WLEDs (nach [7]).....	1
Abb. 2:	Entwicklung der Lichtausbeute von Weißlichtquellen (Punkte entlang der blauen Kurve: Leistung handelsüblicher Hochleistungs-LEDs [7].....	2
Abb. 3:	Jablonski-Diagramm (nach [20]).....	6
Abb. 4:	Darstellung von Wirtsgitter-Ionen und Aktivator-Ionen im Periodensystem der Elemente [12,21].....	7
Abb. 5:	Ionenradien der hexakoordinierten REE ³⁺ Ionen [28].....	10
Abb. 6:	Dieke-Diagramm für freie REE ³⁺ -Ionen [29].....	12
Abb. 7:	Energieniveaudiagramm für Sm ³⁺ in CaAl ₂ O ₄	14
Abb. 8:	Energieniveaudiagramm für Dy ³⁺ in CaAl ₂ O ₄	15
Abb. 9:	Energieniveaudiagramm für Eu ³⁺ in CaEuAlO ₄	17
Abb. 10:	Präparierte Pulverprobe (links) und senkrechter Probenträger für den Pulverprobenhalter.....	20
Abb. 11:	Schematischer Ablauf der Festkörpersynthese.....	21
Abb. 12:	Schematischer Ablauf der Pechini-Synthese.....	24
Abb. 13:	Struktur des Ergebniskapitels.....	30
Abb. 14:	Röntgendiffraktogramm von CaAl ₂ O ₄	33
Abb. 15:	Kristallstruktur von CaAl ₂ O ₄	33
Abb. 16:	Röntgendiffraktogramm von SrAl ₂ O ₄ im Bereich 10 - 60 °2θ, Sintertemperatur 900 °C – 1200 °C.....	34
Abb. 17:	Kristallstruktur von SrAl ₂ O ₄	34
Abb. 18:	Röntgendiffraktogramme von BaAl ₂ O ₄ im Bereich 10 - 60 °2θ, Sintertemperatur 900 °C – 1200 °C.....	35
Abb. 19:	Kristallstruktur von BaAl ₂ O ₄	35
Abb. 20:	FTIR-Spektren von CaAl ₂ O ₄ , SrAl ₂ O ₄ und BaAl ₂ O ₄	36
Abb. 21:	REM-Aufnahmen von a) CaAl ₂ O ₄ , b) SrAl ₂ O ₄ und c) BaAl ₂ O ₄	36
Abb. 22:	Röntgendiffraktogramme von mit Sm ³⁺ dotierten MAl ₂ O ₄ (● = CaAl ₄ O ₇ ; ■ = CaSmAl ₃ O ₇ ; ◆ = SmAlO ₃).....	37
Abb. 23:	Anregungs- und Emissionsspektrum von CaAl ₂ O ₄ :0,0025Sm, Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 11.....	38
Abb. 24:	Emissionsspektren von CaAl ₂ O ₄ :xSm (λ _{Anr} = 401 nm).....	38
Abb. 25:	Anregungs- und Emissionsspektrum von SrAl ₂ O ₄ :0,0050Sm, die Übergänge der nummerierten Peaks sind in Tab. 11 angegeben.....	39
Abb. 26:	Emissionsspektren von SrAl ₂ O ₄ :xSm (λ _{Anr} = 399 nm).....	39
Abb. 27:	Emissionsspektren von mit 1,00 mol-% Sm ³⁺ dotiertem BaAl ₂ O ₄ bei verschiedenen Anregungswellenlängen.....	40
Abb. 28:	Röntgendiffraktogramme von mit Dy ³⁺ dotiertem MAl ₂ O ₄ (● = CaAl ₄ O ₇ ; ■ = CaDyAl ₃ O ₇ ; ◆ = SrDyAl ₃ O ₇ ; ▲ = Ba ₆ Dy ₂ Al ₄ O ₁₅).....	41

Abb. 29:	Anregungs- und Emissionsspektrum von mit 0,50 mol-% Dy ³⁺ dotiertem CaAl ₂ O ₄ , Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 12	42
Abb. 30:	Emissionsspektren von CaAl ₂ O ₄ :xDy ($\lambda_{\text{Anr}} = 346 \text{ nm}$), Raumtemperatur.....	42
Abb. 31:	Anregungs- und Emissionsspektrum von mit 0,50 mol-% Dy ³⁺ dotiertem SrAl ₂ O ₄ , Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 12	43
Abb. 32:	Emissionsspektren von SrAl ₂ O ₄ :Dy ($\lambda_{\text{Anr}} = 346 \text{ nm}$), Raumtemperatur	43
Abb. 33:	Emissionsspektren von BaAl ₂ O ₄ :0,0025Dy bei unterschiedlichen Anregungswellenlängen, Raumtemperatur.....	43
Abb. 34:	Anregungsspektrum von BaAl ₂ O ₄ :0,0025Dy mit ($\lambda_{\text{Em}} = 573 \text{ nm}$), Raumtemperatur	44
Abb. 35:	Emissionsspektren von BaAl ₂ O ₄ :xDy ($\lambda_{\text{Anr}} = 386 \text{ nm}$), Raumtemperatur	44
Abb. 36:	Röntgendiffraktogramm von CaB ₂ O ₄ , im Bereich 10 - 70 °2 θ , Vergleich der Synthesergebnisse von Pechini- und Festkörpermethode.....	49
Abb. 37:	Kristallstruktur von CaB ₂ O ₄	49
Abb. 38:	Röntgendiffraktogramm von SrB ₂ O ₄ im Bereich 10 - 70 °2 θ , Sintertemperatur 700 °C – 900 °C.....	50
Abb. 39:	FTIR-Spektren von CaB ₂ O ₄ und SrB ₂ O ₄	51
Abb. 40:	Röntgendiffraktogramm von BaB ₂ O ₄ im Bereich 10 - 70 °2 θ	52
Abb. 41:	Kristallstruktur von BaB ₂ O ₄	53
Abb. 42:	FTIR-Spektrum von BaB ₂ O ₄	53
Abb. 43:	Röntgendiffraktogramme von mit Sm ³⁺ dotierten MB ₂ O ₄	54
Abb. 44:	Anregungs- und Emissionsspektrum von mit 1,00 mol-% Sm ³⁺ dotiertem CaB ₂ O ₄ , Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 18	55
Abb. 45:	Emissionsspektren von CaB ₂ O ₄ :xSm ($\lambda_{\text{Anr}} = 401 \text{ nm}$), Raumtemperatur	55
Abb. 46:	Anregungs- und Emissionsspektrum von mit 1,00 mol-% Sm ³⁺ dotiertem SrB ₂ O ₄ , Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 18	56
Abb. 47:	Emissionsspektren von SrB ₂ O ₄ :xSm ($\lambda_{\text{Anr}} = 400 \text{ nm}$).....	56
Abb. 48:	Anregungs- und Emissionsspektrum von mit 1,00 mol-% Sm ³⁺ dotiertem BaB ₂ O ₄ , Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 18	56
Abb. 49:	Emissionsspektren von BaB ₂ O ₄ :xSm ($\lambda_{\text{Anr}} = 401 \text{ nm}$).....	56
Abb. 50:	Röntgendiffraktogramme von mit Dy ³⁺ dotiertem MB ₂ O ₄ (■ = DyBO ₃ , Hauptpeak bei 27,16 °2 θ ($hkl = 100$)).....	57
Abb. 51:	Anregungs- und Emissionsspektrum von mit 1,00 mol-% Dy ³⁺ dotiertem CaB ₂ O ₄ Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 19	58
Abb. 52:	Emissionsspektren von CaB ₂ O ₄ :xDy ($\lambda_{\text{Anr}} = 360 \text{ nm}$)	58
Abb. 53:	Anregungs- und Emissionsspektrum von mit 1,00 mol-% Dy ³⁺ dotiertem BaB ₂ O ₄	59
Abb. 54:	Emissionsspektren von BaB ₂ O ₄ :0,010Dy bei Anregungswellenlängen 349 und 360 nm	59
Abb. 55:	Röntgendiffraktogramm von CaO·La ₂ O ₃ , Pechini-Methode, Sintertemperatur 1200 - 1400 °C.....	63

Abb. 56:	Röntgendiffraktogramm von $\text{CaO} \cdot \text{Eu}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1100 - 1300 °C.....	63
Abb. 57:	Röntgendiffraktogramm von CaSc_2O_4 , Pechini-Methode, Sintertemperatur 800 - 1300 °C	64
Abb. 58:	Kristallstruktur von CaSc_2O_4	65
Abb. 59:	Röntgendiffraktogramm von $\text{SrO} \cdot \text{La}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1100 - 1300 °C.....	66
Abb. 60:	Röntgendiffraktogramm von SrEu_2O_4 , Pechini-Methode, Sintertemperatur 1100 - 1300 °C	67
Abb. 61:	REM Aufnahme von SrEu_2O_4	67
Abb. 62:	Röntgendiffraktogramm der Verbindungen SrREE_2O_4 (REE = Sm, Eu, Gd, Dy, Y, Yb, Sc).....	68
Abb. 63:	Röntgendiffraktogramm von $\text{BaO} \cdot \text{La}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 850 - 1450 °C.....	70
Abb. 64:	Röntgendiffraktogramm der Verbindungen BaREE_2O_4 (REE = Nd, Sm, Eu, Gd, Dy und Y)	71
Abb. 65:	Röntgendiffraktogramm von $\text{BaO} \cdot \text{Yb}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 850 - 1450 °C.....	72
Abb. 66:	Röntgendiffraktogramm von $\text{BaO} \cdot \text{Sc}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1400 - 1500 °C.....	73
Abb. 67:	Röntgendiffraktogramme von mit Sm^{3+} dotiertem SrEu_2O_4 und BaEu_2O_4	74
Abb. 68:	Anregungs- und Emissionsspektrum von SrEu_2O_4 und BaEu_2O_4 , Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 26	75
Abb. 69:	Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{SrEu}_2\text{O}_4:0,02\text{Sm}$ und $\text{BaEu}_2\text{O}_4:0,02\text{Sm}$, Raumtemperatur	75
Abb. 70:	Röntgendiffraktogramme von mit Dy^{3+} dotiertem SrEu_2O_4 und BaEu_2O_4	76
Abb. 71:	Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{SrEu}_2\text{O}_4:0,02\text{Dy}$ und $\text{BaEu}_2\text{O}_4:0,02\text{Dy}$, Raumtemperatur	77
Abb. 72:	Ionenradien der ausgewählten Elemente	78
Abb. 73:	Abhängigkeit der orthorhombischen MREE_2O_4 -Gitterparameter vom REE^{3+} -Ionenradius	79
Abb. 74:	Ternäres Diagramm $\text{SrO}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Eu}_2\text{O}_3$, rote Punkte entsprechen der theoretischen Zusammensetzung der eigenen Synthesen, schwarze Punkte entsprechen den Verbindungen, die aus den Datenbanken ICDD und ICSD bekannt sind	81
Abb. 75:	Ternäres Diagramm $\text{SrO}-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Eu}_2\text{O}_3$, rote Punkte entsprechen der theoretischen Zusammensetzung der eigenen Synthesen, schwarze Punkte entsprechen Verbindungen, die aus den Datenbanken ICDD und ICSD bekannt sind	82
Abb. 76:	Röntgendiffraktogramme der Mischkristallreihe $\text{SrEu}_x\text{Al}_{2-x}\text{O}_4$ ($x = 0; 0,1; 0,3; 0,5; 0,7; 0,9; 1$).....	83
Abb. 77:	Kristallstruktur von SrEuAlO_4	84
Abb. 78:	Graphische Darstellung der Verfeinerung von SrEuAlO_4 mittels Rietveld-Fit.....	85

Abb. 79:	Röntgendiffraktogramme der Mischkristallreihe $\text{SrEu}_x\text{Al}_{2-x}\text{O}_4$ ($x = 0; 0,1; 0,3; 0,5; 0,7; 0,9; 1$).....	86
Abb. 80:	Graphische Darstellung der Verfeinerung von $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ mittels Rietveld-Fit87	
Abb. 81:	Kristallstruktur von $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$	87
Abb. 82:	Röntgendiffraktogramm von $\text{CaO} \cdot 0,5\text{La}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1000 - 1200 °C	91
Abb. 83:	Röntgendiffraktogramme der Verbindungen CaREEAlO_4 (REE = Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb)	92
Abb. 84:	REM-Aufnahmen von a) CaYAlO_4 und b) CaDyAlO_4	93
Abb. 85:	Wärmeflussdiagramme von CaAl_2O_4 , CaDyAlO_4 , CaEuAlO_4 , CaGdAlO_4 und CaYAlO_4	93
Abb. 86:	Röntgendiffraktogramme der Verbindungen SrREEAlO_4 (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, und Dy)	95
Abb. 87:	Röntgendiffraktogramme von $\text{SrO} \cdot 0,5\text{Yb}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1000 - 1500 °C	96
Abb. 88:	Röntgendiffraktogramme von BaLaAlO_4 , Pechini-Methode, Sintertemperatur 1200 - 1300 °C.....	98
Abb. 89:	REM-Aufnahmen von BaLaAlO_4	98
Abb. 90:	Röntgendiffraktogramme von $\text{BaO} \cdot 0,5\text{Dy}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$, Pechini-Methode, Sintertemperatur 1300 und 1450 °C	99
Abb. 91:	Röntgendiffraktogramme von mit Sm^{3+} dotiertem CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4	99
Abb. 92:	Anregungs- und Emissionsspektrum von CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4 , Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 35	100
Abb. 93:	Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{CaEuAlO}_4:0,02\text{Sm}$ und $\text{SrEuAlO}_4:0,02\text{Sm}$, Raumtemperatur.....	100
Abb. 94:	Emissionsspektrum von $\text{CaEuAlO}_4:x\text{Sm}$ und $\text{SrEuAlO}_4:x\text{Sm}$ ($\lambda_{\text{Anr}} = 406 \text{ nm}$)..	102
Abb. 95:	Darstellung des Energieübertragungsprozesses bei $\text{CaEuAlO}_4:x\text{Sm}$	102
Abb. 96:	Röntgendiffraktogramme von mit Dy^{3+} dotierten CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4	103
Abb. 97:	Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{CaEuAlO}_4:0,02\text{Dy}$ und $\text{SrEuAlO}_4:0,02\text{Dy}$, Raumtemperatur	103
Abb. 98:	Abhängigkeit der MREEAlO_4 -Gitterparameter vom REE^{3+} -Ionenradius.....	105
Abb. 99:	Röntgendiffraktogramme der Verbindungen $\text{Ca}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb).....	109
Abb. 100:	Röntgendiffraktogramme der Verbindungen $\text{Sr}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb).....	111
Abb. 101:	FTIR-Spektren von $\text{Sr}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb)...	112
Abb. 102:	EDX-Spektrum von $\text{Sr}_3\text{Dy}_2(\text{BO}_3)_4$	113
Abb. 103:	Röntgendiffraktogramme der Verbindungen $\text{Ba}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy und Y).....	115
Abb. 104:	Röntgendiffraktogramme von $3\text{BaO} \cdot \text{Yb}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$	116
Abb. 105:	Röntgendiffraktogramme von mit Sm^{3+} dotiertem $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ und $\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$	117

Abb. 106: Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ und $\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$, Übergänge der nummerierten Peaks siehe Tab. 42	118
Abb. 107: Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4:0,02\text{Sm}$, $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4:0,02\text{Sm}$ und $\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4:0,02\text{Sm}$, Raumtemperatur.....	119
Abb. 108: Röntgendiffraktogramme von mit Dy^{3+} dotiertem $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ und $\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$	120
Abb. 109: Anregungs- und Emissionsspektrum von $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4:0,02\text{Dy}$, $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4:0,02\text{Dy}$ und $\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4:0,02\text{Dy}$, Raumtemperatur	120
Abb. 110: Abhängigkeit der $\text{M}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ -Gitterparameter vom REE^{3+} -Ionenradius	122

Tabellenverzeichnis

Tab. 1: Formen von Lumineszenz [21].....	6
Tab. 2: Elektronenkonfiguration der Seltenen Erden [26].....	9
Tab. 3: Vergleich von 4f→4f-Übergang und 4f→5d-Übergang [13]	13
Tab. 4: Messparameter für die röntgenographische Untersuchung der Edukte und Produkte	19
Tab. 5: Theoretische Zusammensetzung der mittels Festkörpermethode synthetisierten Wirtsgitter.....	21
Tab. 6: Mittels Festkörpermethode synthetisierte Leuchtstoffe	22
Tab.7: Theoretische chemische Zusammensetzung der mittels Pechini-Methode synthetisierten Wirtsgitter	25
Tab. 8: Mittels Pechini-Methode synthetisierte Leuchtstoffe.....	25
Tab. 9: Hersteller und Reinheitsgrade der verwendeten Chemikalien	28
Tab. 10: Bedingungen für die Synthese von MA_2O_4 (M = Ca, Sr, Ba).....	32
Tab. 11: Beobachtete Sm^{3+} -Übergänge in $CaAl_2O_4$ und $SrAl_2O_4$ (Nummerierung siehe Abb. 23 und Abb. 25).....	39
Tab. 12: Beobachtete Dy^{3+} Übergänge in MA_2O_4 (M = Ca, Sr, Ba; Nummerierung siehe Abb. 29, Abb. 31, Abb. 34 und Abb. 35).....	42
Tab. 13: Zusammenfassung der Synthese- und Lumineszenzeigenschaften der Leuchtstoffe $MA_2O_4:Sm$ und $MA_2O_4:Dy$ (M = Ca, Sr, Ba)	45
Tab. 14: Bedingungen für die Synthese von MB_2O_4 (M = Ca, Sr, Ba).....	48
Tab. 15: verfeinerte Gitterparameter von CaB_2O_4 , SrB_2O_4 und BaB_2O_4	50
Tab. 16: FTIR-Absorptionsbanden von CaB_2O_4 und SrB_2O_4	51
Tab. 17: FTIR-Absorptionsbanden von BaB_2O_4	54
Tab. 18: Beobachtete Sm^{3+} -Übergänge in MB_2O_4 (M = Ca, Sr, Ba; Nummerierung siehe Abb. 44, Abb. 46 und Abb. 48).....	55
Tab. 19: Dy^{3+} Übergänge in CaB_2O_4 (Nummerierung siehe Abb. 51).....	58
Tab. 20: Zusammenfassung der Synthese- und Lumineszenzeigenschaften der Leuchtstoffe $MB_2O_4:Sm$ und $MB_2O_4:Dy$ (M = Ca, Sr, Ba)	59
Tab. 21: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe $CaO \cdot REE_2O_3$	62
Tab. 22: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe $SrO \cdot REE_2O_3$	65
Tab. 23: Verfeinerte Gitterparameter für $SrREE_2O_4$ (REE = Sm, Eu, Gd, Dy, Y, Yb und Sc) bei Raumtemperatur. Raumgruppe: Pnam.	69
Tab. 24: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe $BaO \cdot REE_2O_3$	70
Tab. 25: Verfeinerte Gitterparameter für $BaREE_2O_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy und Y) bei Raumtemperatur. Raumgruppe: Pnam.	71
Tab. 26: Beobachtete Eu^{3+} -Übergänge in $SrEu_2O_4$ und $BaEu_2O_4$ (Nummerierung siehe Abb. 68).....	75
Tab. 27: Darstellung der durchgeführten Synthesen von Erdalkali-Seltenerd-Oxiden	78

Tab. 28: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Mischreihe $\text{SrEu}_x\text{Al}_{2-x}\text{O}_4$ ($0 \leq x \leq 2$), bei Auftreten mehrerer Phasen Sortierung nach abnehmendem Gehalt	83
Tab. 29: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Mischreihe $\text{SrEu}_x\text{B}_{2-x}\text{O}_4$ ($0 \leq x \leq 2$), bei Auftreten mehrerer Phasen Sortierung nach abnehmendem Gehalt	85
Tab. 30: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe $\text{CaO} \cdot 0,5\text{REE}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$	90
Tab. 31: Verfeinerte Gitterparameter für CaREEAlO_4 (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb) bei Raumtemperatur. Raumgruppe: $I4/mmm$ ($\alpha = \beta = \gamma = 90,00^\circ$; $a = b$)	91
Tab. 32: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe $\text{SrO} \cdot 0,5\text{REE}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$	94
Tab. 33: Verfeinerte Gitterparameter für SrREEAlO_4 (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y und Yb) bei Raumtemperatur. Raumgruppe: $I4/mmm$ ($\alpha = \beta = \gamma = 90,00^\circ$; $a = b$)	96
Tab. 34: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe $\text{BaO} \cdot 0,5\text{REE}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3$	97
Tab. 35: Beobachtete Eu^{3+} -Übergänge in CaEuAlO_4 und SrEuAlO_4 (Nummerierung siehe Abb. 92).....	101
Tab. 36: Darstellung der durchgeführten Synthesen von Erdalkali-Seltenerd-Aluminaten ...	104
Tab. 37: Ausgewählte Schmelztemperaturen der Verbindungsgruppe $\text{M}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$	107
Tab. 38: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe $3\text{CaO} \cdot \text{La}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$	110
Tab. 39: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese der Reihe $3\text{SrO} \cdot \text{La}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$	111
Tab. 40: Zusammenfassung der Ergebnisse zur Synthese von der Reihe $3\text{BaO} \cdot \text{La}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$	114
Tab. 41: Verfeinerte Gitterparameter für $\text{Ba}_3\text{REE}_2(\text{BO}_3)_4$ (REE = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy und Y) bei Raumtemperatur. Raumgruppe: Pnma	116
Tab. 42: Beobachtete Eu^{3+} -Übergänge in $\text{Ca}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$, $\text{Sr}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ und $\text{Ba}_3\text{Eu}_2(\text{BO}_3)_4$ (Nummerierung siehe Abb. 106).....	118
Tab. 43: Darstellung der durchgeführten Synthesen von Erdalkali-Seltenerd-Boraten	121

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name: Chimednorov Otgonbayar
Geburtsdatum: 27.02.1990
Geburtsort: Ulaanbaatar

Schulbildung

2005 – 2006 Südstadtgymnasium, Halle
2006 – 2008 Georg-Cantor-Gymnasium, Halle, Abitur

Hochschulstudium

2008 – 2012 Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Chemie (B.Sc.)
2012 – 2014 Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Chemie (M.Sc.)
2014 – 2016 Universität Leipzig
Fachchemiker für Analytik und Spektroskopie

Berufliche Tätigkeiten

seit 07/2021 Landesamt für Umweltschutz Sachsen-Anhalt
Dezernentin für instrumentelle Analytik

02/2021 – 06/2021 Analytik Jena GmbH
Applikationsspezialistin ICP-MS

2016 – 2020 Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Arbeitsgruppe: Mineralogie und Geochemie
Wissenschaftliche Mitarbeiterin

2015 Landesamt für Denkmalpflege und Archäologie Sachsen-Anhalt
Landesmuseum für Vorgeschichte
Mitarbeiterin

Naumburg (Saale)

Chimednorov Otgonbayar