

1. Teoretyczny opis luminescencji uczulonej układów zawierających jony ziem rzadkich

Jednym z etapów luminescencji wymuszonej jest proces transferu energii między donorem i akceptorem, w wyniku czego następuje wzbudzenie jonu świecącego. Świecenie to może być wymuszone przez otoczenie jonu o symetrii niższej niż sferyczna (czyli przez ligandy) lub przez inne domieszki znajdujące się w otoczeniu świecącego jonu. Do klasy tych zjawisk należą również procesy kooperacyjne, w których oba źródła zaburzenia symetrii jonu centralnego odgrywają ważną rolę (są to procesy up-conversion i quantum cutting albo down-conversion). Procesy te opisywane są w języku rachunku zaburzeń i za pomocą algebry Racaha. **Przedmiotem badań w ramach pracy magisterskiej jest ustalenie hierarchii ważności różnych mechanizmów fizycznych i ich wkład do wydajności transferu energii.**

2. Własności spektroskopowe chelatów organicznych skoordynowanych z jonami ziem rzadkich stosowanych jako sondy diagnozujące komórki rakowe

Jony ziem rzadkich dzięki specyficznej strukturze elektronowej zachowują własności spektroskopowe charakterystyczne dla swobodnych jonów nawet wtedy, kiedy zamknięte są w klatkach tworzonych przez organiczne chelaty o skomplikowanej strukturze chemicznej. Niezależnie od struktury otoczenia i jego symetrii w widmach luminescencji tych jonów pojawiają się ostre linie charakterystyczne dla układów swobodnych. Architektura klatek jest skorelowana z typem tkanki przez którą sonda jest zaabsorbowana po wprowadzeniu do krwiobiegu. Wydajność takiego procesu zależy w dużym stopniu od typu tzw. anteny, która dołączona jest do klatki i która absorbuje światło zewnętrzne. Obecnie prowadzone są intensywne badania nad takimi antenami, które absorbują w zakresie widzialnym, a proces wysyłania sygnałów przez jon lantanowca jest tak energetycznie dopasowany, że luminescencja wypada w podczerwieni mającej większą zdolność penetracji tkanek biologicznych niż inne zakresy promieniowania. **Przedmiotem badań w ramach pracy magisterskiej jest klasyfikacja, chemiczna i spektroskopowa, anten i mostków łączących je z klatkami macierzystymi.** Język tych badań opiera się na technikach operatorowych spektroskopii atomowej i podstawowych pojęciach takich jak DFT (density functional theory), mapy gęstości ładunku i pole krystaliczne.

3. Oddziaływania nadsubtelne jako mechanizm wymuszający przejścia elektryczne dipolowe między poziomami konfiguracji równowaznych elektronów

Przejścia elektryczne dipolowe między poziomami energetycznymi jonów lantanowców i aktynowców są opisywane teorią Judda-Ofelta opartą na drugim rzędzie rachunku zaburzeń. W teorii tej (dotychczas jedynej) przejścia, które zabronione są regułą wyboru Laporte'a, wymuszane są przez zaburzający wpływ potencjału pola krystalicznego otaczającego jon centralny. Ostatnio przeprowadzone wraz z doktorantem Andrzejem Kedzioriskim badania, doprowadziły do wniosku, że konkurencyjnym do zaburzającego wpływu pola krystalicznego jest mechanizm oddziaływań nadsubtelnych. Pojawił się więc nowy mechanizm wymuszający w drugim rzędzie przejścia typu f-f. **Przedmiotem badań w ramach pracy magisterskiej jest oszacowanie względnej ważności nowych wkładów do amplitudy przejścia przeprowadzając obliczenia numeryczne w ramach obu modeli, Judda-Ofelta i nowego sformułowania opartego na oddziaływaniach nadsubtelnych.** Językiem badań jest algebra Racaha i koncepcja efektywnych operatorów tensorowych.