



UNIUNEA EUROPEANĂ

GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI ȘI
PROTECȚIEI SOCIALEFondul Social European
POS DRU 2007-2013Instrumente Structurale
2007-2013MINISTERUL
EDUCAȚIEI
CERCETĂRII
TINERETULUI
ȘI SPORTULUI

OIPOSDRU

UNIVERSITATEA
„ALEXANDRU IOAN CUZA”
IASIFACULTATEA DE ȘTIINȚE POLITICE,
din Timișoara**Investește în oameni !**

FONDUL SOCIAL EUROPEAN

Program Operațional Sectorial Dezvoltarea Resurselor Umane 2007-2013

Axa prioritară 1 Educația și formarea profesională în sprijinul creșterii economice și dezvoltării societății bazate pe cunoaștere;

Domeniul major de intervenție 1.5 Programe doctorale și post-doctorale în sprijinul cercetării;

Titlul proiectului: „Rețea transnațională de management integrat al cercetării postdoctorale în domeniul Comunicarea Științei. Construcție instituțională (Școală postdoctorală) și program de burse (CommScie)”

Numărul de identificare al contractului: POSDRU/89/1.5/S/63663

Beneficiar: Universitatea “Alexandru Ioan Cuza” Iași

RAPORT DE CERCETARE

Cod raport: ANUL I-B (luna 1-12) (Selectați)

Perioada de raportare: septembrie 2010 - septembrie 2011

(Selectați)

1. DATE PERSONALE ALE CERCETATORULUI POST-DOCTORAL:

Nume:	Ștef
Prenume:	Marius
Telefon:	0721896312
E-Mail:	marius_stef2002@yahoo.com

2. DATE PERSONALE ALE TUTORELUI CERCETATORULUI POST-DOCTORAL :

Nume:	Nicoară
Prenume:	Irina
Telefon:	0256-592209
E-Mail:	nicoara@physics.uvt.ro

3. INSTITUȚIA GAZDĂ A CERCETĂTORULUI:

Denumire Instituție:	Universitatea de Vest din Timișoara	(Selectați)
Domeniul fundamental de cercetare :	D 1 – matematica, fizica, chimie	(Selectați)
Facultate/ Department:	Facultatea de Fizică	

4. TITLUL PROIECTULUI DE CERCETARE:Influența ionilor de Pb^{2+} asupra proprietăților spectroscopice ale cristalelor de $CaF_2:YbF_3$



UNIUNEA EUROPEANĂ

GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI ȘI
PROTECȚIEI SOCIALE
AMFOSNDIFondul Social European
POS DRU 2007-2013Instrumente Structurale
2007-2013MINISTERUL
EDUCAȚIEI
CERCETĂRII
TINERETULUI
ȘI SPORTULUI

OIPOSDRU

UNIVERSITATEA
„ALEXANDRU IOAN CUZA”
IASIFACULTATEA DE ȘTIINȚE POLITICE,
IAȘI**5. OBIECTIVELE PROIECTULUI (PENTRU PERIOADA DE RAPORTARE):**

	Obiective prevazute	Obiective realizate	Gradul de realizare (total/parțial/nerealizat)	Descriere/observații :
1	Obiectivul 1. Obținerea cristalelor de CaF_2 dopate cu YbF_3 .	Toate obiectivele au fost realizate	Total	
2	Obiectivul 2. Obținerea cristalelor de CaF_2 dopate cu YbF_3 și co-dopate cu 2,5 mol% NaF .			
3	Obiectivul 3. Caracterizarea cristalelor de CaF_2 dopate cu YbF_3 și co-dopate cu 2,5 mol% NaF			

6. ACTIVITĂȚILE PROIECTULUI (PENTRU PERIOADA DE RAPORTARE) :

	Activități prevazute	Activități realizate	Gradul de realizare	Descriere/observații :
1	A1.1. Informare-documentare.	Toate activitățile au fost realizate	Total	
2	A1.2. Măsurarea distribuției temperaturii în instalația de creștere, determinarea condițiilor de creștere.			
3	A1.3. Obținerea cristalelor de CaF_2 :x mol% YbF_3 .			
4	A1.4. Măsurarea, prelucrarea și interpretarea spectrelor de absorbție.			
5	A1.5. Măsurarea, prelucrarea și interpretarea spectrelor de emisie.			
6	A1.6. Determinarea distribuției dopantului de-a lungul cristalelor. Calcularea coeficientului de segregare.			
7	A1.7. Raport de activitate			
8	A2.1. Determinarea condițiilor de creștere.			
9	A2.2. Obținerea cristalelor de CaF_2 : x mol% YbF_3 (x = 0,07; 0,17; 0,7; 1,2) și codopate cu 2,5 mol% NaF .			
10	A3.1. Determinarea densității de dislocații			
11	A3.2. Măsurarea și interpretarea spectrelor dielectrice (măsurători de relaxare dielectrică)			
12	A3.3. Determinarea parametrilor de relaxare (energie de activare și timp de relaxare)			
13	A3.4. Determinarea numărului de centri cu simetrie C_{4v} (dipoli NN).			
14	A3.5. Măsurarea, prelucrarea și interpretarea spectrelor de absorbție.			
15	A3.6. Măsurarea, prelucrarea și interpretarea spectrelor de emisie și excitație.			
16	A3.7. Raport de activitate.			

7. REZULTATE LIVRATE (ÎN PERIOADA DE RAPORTARE) :



UNIUNEA EUROPEANĂ

GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERIUL MUNCII, FAMILIEI ȘI
PROTECȚIEI SOCIALEFondul Social European
POS, PDR și 2007-2013Instrumente Structurale
2007-2013MINISTERUL
EDUCAȚIEI,
CERCETĂRII,
TINERETULUI
ȘI SPORTULUI

OIPOSDRU

UNIVERSITATEA
„ALEXANDRU IOAN CUZA”
DE TIMIȘOARAFACULTATEA DE ȘTIINȚE POLITICE,
DE ȘTIINȚE SOCIALE ȘI
POLITICE**7.1. Participări la conferințe naționale:**

Titlul conferinței	Data și locul desfășurării	Organizator	Titlul lucrării prezentate	Calitate (autor, coautor etc.)
Physics Conference TIM-10	25-27 Noiembrie 2010 Timișoara	Fac. de Fizica, UVT	Some spectroscopic properties of PbF ₂ -doped CaF ₂ crystals	Coautor
			Etch pits morphology and dislocation distribution in double-doped (Er, Yb):CaF ₂ crystals	Coautor
Workshop “Comunicarea științei”	16 Aprilie 2011, Timișoara	În cadrul proiectului POSDRU63663	Obținerea și caracterizarea cristalelor de CaF ₂ :YbF ₃	Autor

7.2. Participări la conferințe internaționale

Titlul conferinței	Data și locul desfășurării	Organizator	Tipul prezentării invitat/oral/poster	Titlul lucrării, autorii, afilierea
III International School and Conference on Photonics	Belgrade, Serbia 29 Aug-02 Sept. 2011	University of Belgrade	poster	Influence of Na ⁺ ions on the dielectric spectra of double doped (YbF ₃ , NaF):CaF ₂ crystals, M. Stef and I. Nicoara, Universitatea de Vest din Timisoara

7.3. Cărți publicate

Titlul cărții	Editură	An apariție	ISBN/ISSN	Număr de pagini	Calitate (autor, coautor, coordinator etc.)

7.4. Articole/Lucrări publicate:**7.4.1. Lucrări publicate în reviste cotate ISI**

Autor(i)	Titlul lucrării	Revista	Data apariției	ISBN/ISSN	Pagini

7.4.2. Lucrări publicate în reviste indexate în BDI

Autor(i)	Titlul lucrării	Revista	Data apariției	ISBN/ISSN	Pagini

7.4.3. Lucrări publicate în BDI



UNIUNEA EUROPEANĂ

GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI ȘI
PROTECȚIEI SOCIALE
AMFOND IIFondul Social European
POS BDI 2007-2013Instrumente Structurale
2007-2013MINISTERUL
EDUCAȚIEI,
CERCETĂRII,
TINERETULUI
ȘI SPORTULUI

OIPOSDRU

UNIVERSITATEA
"ALEXANDRU IOAN CUZA"
IASIFACULTATEA DE ȘTIINȚE POLITICE,
POLITICĂ ECONOMICĂ

Autor(i)	Titlul lucrării	BDI	Data apariției	Adresa web

7.4.4. Lucrări publicate în reviste românești recunoscute de CNCIS

Autor(i)	Titlul lucrării	Revista	Data apariției	ISBN/IS SN	Pagini	Indexarea revistei (B, B+, C)

7.4.5. Lucrări publicate în volumele unor conferințe internaționale

Autor(i)	Titlul lucrării	Volumul	Editor coordonator	Data apariției	ISBN/ISSN	Pagini

7.4.6. Lucrări publicate în volumele unor conferințe naționale

Autor(i)	Titlul lucrării	Volumul	Coord. volum	Editura	Data apariției	ISBN/IS SN	Pagini

7.4.7. Alte publicații (de popularizare/comunicare a științei)

Autor(i)	Titlul lucrării	Revista/cotidian	Data apariției	ISBN/ISSN	Pagini

7.5. Brevete depuse spre omologare:

7.6. Brevete omologate:

7.7. Cereri de finanțare/aplicații depuse:



UNIUNEA EUROPEANĂ

GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI ȘI
PROTECȚIEI SOCIALEFondul Social European
POSDRU 2007-2013Instrumente Structurale
2007-2013MINISTERUL
EDUCAȚIEI,
CERCETĂRII,
TINERETULUI
ȘI SPORTULUI

OIPOSDRU

UNIVERSITATEA
„ALEXANDRU IOAN CUZA”
TIMIȘOARAFACULTATEA DE ȘTIINȚE POLITICE,
TIMIȘOARA**8. STAGII DE CERCETARE ȘI DOCUMENTARE ÎN STRĂINĂTATE :**

Locul (instituția: universitatea, institutul de cercetări etc.)	Perioada	Numărul de săptămâni

9. STAGII DE CERCETARE ȘI DOCUMENTARE ÎN ȚARĂ:

Locul (instituția: universitatea, institutul de cercetări etc.)	Perioada	Numărul de săptămâni

10. PARTICIPĂRI ÎN ECHEPE DE CERCETARE ALE ALTOR PROIECTE:

Proiectul (denumire și cod proiect/nr. contract etc.)	Programul	Valoarea proiectului	Calitatea (cercetător, asist.manager etc.)	Perioada

11. Publicațiile sau rezultatele apărute și raportate în urma cercetării finanțate prin proiectul POSDRU/89/1.5/S/63663 au menționat numele finanțatorului și numărul de contract:

DA (Selectați)

**PRIN ACEASTA SE CERTIFICA LEGALITATEA ȘI CORECTITUDINEA
DATELOR CUPRINSE ÎN PREZENTUL RAPORT DE ACTIVITATE ȘI ÎN ANEXA 1 .**



UNIUNEA EUROPEANĂ



GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI ȘI
PROTECȚIEI SOCIALE



Fondul Social European
POS DRU 2007-2013



Instrumente Structurale
2007-2013



MINISTERUL
EDUCAȚIEI
CERCETĂRII
TINERETULUI
ȘI SPORTULUI

OIPOSDRU



UNIVERSITATEA
„ALEXANDRU IOAN CUZA”
IASI



FACULTATEA DE ȘTIINȚE POLITICE,
din Timișoara

Data completării:
24/09/2011 (Selectați)

Nume, prenume
dr. Marius Ștef

Semnătura

Secțiune destinată tutorelui cercetătorului post-doctoral:

AVIZUL TUTORELUI PENTRU
CONTINUAREA ACTIVITĂȚII DE CERCETARE:

DA

(Selectați)

AVIZUL TUTORELUI PENTRU VALIDAREA
FINALĂ A ACTIVITĂȚII DE CERCETARE:

NU ESTE CAZUL

(Selectați)

(se bifează doar pentru ultimul raport de cercetare al bursei):

Data avizării:
24/09/2011 (Selectați)

Nume, prenume
Prof. univ. dr. Irina Nicoară

Semnătura



UNIUNEA EUROPEANĂ

GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI ȘI
PROTECȚIEI SOCIALEFondul Social European
POS DRU 2007-2013Instrumente Structurale
2007-2013MINISTERUL
EDUCAȚIEI
CERCETĂRII
TINERETULUI
ȘI SPORTULUI

OIPOSDRU

UNIVERSITATEA
„ALEXANDRU IOAN CUZA”
IASIFACULTATEA DE ȘTIINȚE POLITICE,
ȘI ȘTIINȚA POLITICĂ

Anexa 1

RAPORT DE CERCETARE (rezumat extins)

1. Stadiul cunoașterii și cercetărilor în domeniu, la nivel internațional și național. Delimitări terminologice și conceptuale. Bibliografia relevantă în domeniul de cercetare. (max. 2 pag.)

Omogenitatea și perfecțiunea unui cristal obținut prin metoda solidificării controlate sunt influențate puternic de câmpul termic exterior (din încălzitor), de aceea trebuie determinată distribuția temperaturii pe axa încălzitorului, și găsite condițiile optime de creștere: poziția ecranelor, poziția inițială a creuzetului, viteza de coborâre a creuzetului, timpul de răcire până la temperatura camerei, etc. [1-5]

Dislocațiile reprezintă una dintre tipurile de defecte termodinamice ireversibile. La acest tip de defecte, abaterea de la structura periodică a rețelei cristaline are loc în lungul unui șir de atomi sau ioni și din acest motiv dislocațiile se mai numesc și *defecte liniare* [6-13].

Dacă energia de suprafață a interfeței cristal-soluție este izotropă, groapa de atac corespunzătoare va fi circulară, în caz contrar forma bazei piramidei tinde să reflecte simetria cristalografică a cristalului [14].

Este cunoscut faptul că în cristalele de CaF_2 dopate cu ioni trivalenți de pământ rar se formează câteva tipuri de dipoli: NN (simetrie C_{4v}), NNN (simetrie C_{3v} sau C_{2v}) și diferite tipuri de agregate [15, 16]. Se observă o comportare anomală a lui ϵ_1 și ϵ_2 pentru probele dopate cu YbF_3 , în funcție de concentrația de impuritate. Această anomalie în comportarea dielectrică a mai fost observată și în cazul compușilor de tip perovschit [17] și în cazul cristalelor de $\text{CaF}_2:\text{ErF}_3$ [18]. Această comportare o asociem, prin urmare, unei tranziții de fază de tip ordine-dezordine [19]. Studiul fenomenelor de relaxare dielectrică în cristalele de CaF_2 dopate cu ioni RE a fost realizat și de alți autori. [15, 16, 20, 21]. Numărul dipolilor N_{NN} care contribuie la relaxarea dielectrică observată se poate calcula prin metodele descrise de Fontanella [15] și Campos [23]. Având în vedere ecuațiile lui Debye, tangenta unghiului de pierdere poate fi scrisă [24] ca suma a doi termeni, primul conținând conductivitatea electrică, iar cel de-al doilea relaxarea. Valoarea calculată pentru momentul electric dipolar al perechii de ioni $\text{Yb}^{3+} - \text{F}^-$, dipol în care ionul de fluor F^- ocupă o poziție interstițială de tip NN, aflat la o distanță $d = 2,7356 \text{ \AA}$ față de ionul de Ca^{2+} este în foarte bună concordanță cu valoarea obținută din măsurători ENDOR ($\mu = 4 \cdot 10^{-29} \text{ C}\cdot\text{m}$) [25].

În timpul creșterii cristalului, o parte din ionii trivalenți de Yb vor înlocui ionii de Ca^{2+} din rețea, așezându-se într-o poziție cu anumită simetrie [26]. În urma studiului efectuat pe astfel de cristale s-a observat o ușoară creștere a concentrației de clustere în comparație cu centrii izolați cu creșterea concentrației de YbF în cristale [26].

Spectrul de emisie al cristalelor de $\text{CaF}_2:\text{YbF}_3$ constă din două benzi largi, una în domeniul UV apropiat (300-400nm) denumită **banda A** și o altă bandă largă în domeniul vizibil, denumită **banda B**, cunoscută sub denumirea de *emisie galben-verde* [27-37]. Dependența intensității benzilor de emisie de concentrația dopantului (YbF_3) sau a codopantului a fost observată pentru multe tipuri de cristale dopate yterbiu. De exemplu, probele $\text{SrCl}_2:\text{Yb}^{2+}$ prezintă o dependență puternică a intensității emisiei de concentrația Yb^{2+} ; cristalele de RbMgF_3 codopate cu Eu^{2+} , KCaF_3 codopat cu Mn^{2+} arată o dependență a intensității emisiei de concentrația de Mn^{2+} [38]. Se știe că intensitatea fluorescenței [39] este influențată de mai mulți factori. Emisia în domeniul vizibil al cristalelor de CaF_2 dopate cu YbF_3 având ioni de Yb^{2+} a fost observată demult [27-37, 40]. Caracteristica acestei emisii este aceea că este puternic deplasată spre lungimi de undă mai mari în comparație cu emisia *d-f* normală [28], motiv pentru care a fost denumit „emisie anomală”. Această luminescență este atribuită autoionizării electronilor *5d* în banda de conducție [29, 41]. McClure și Pedrini [41] au arătat că există o relație directă între emisia anomală și poziționarea nivelelor excitate *5d* în sau în apropierea benzii de conducție al cristalului gazdă. S-a arătat [42] că starea *5d* a Yb^{2+} este aproape sau chiar în banda de conducție și excitarea nivelului *5d* duce la autoionizare. Electronul este delocalizat și se formează o



UNIUNEA EUROPEANĂ

GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI ȘI
PROTECȚIEI SOCIALEFondul Social European
POS DRU 2007-2013Instrumente Structurale
2007-2013MINISTERUL
EDUCAȚIEI
CERCETĂRII
TINERETULUI
ȘI SPORTULUI

OIPOSDRU

UNIVERSITATEA
„ALEXANDRU IOAN CUZA”
TIMIȘOARAFACULTATEA DE ȘTIINȚE POLITICE,
TIMIȘOARA

stare de tip “exciton captat” în apropierea ionului Yb^{3+} . Electronul rămâne localizat în jurul ionului trivalent și în urma tranziției radiative al acestei stări de “impurity trapped exciton” apare emisia de lungime de undă deplasată spre lungimi de undă mai mari decât cea corespunzătoare emisiei normale. Emisia “anomală” este tranziția radiativă pe starea fundamentală a Yb^{2+} .

Având în vedere aceste caracteristici și proprietățile emisiei probelor noastre, noi asociem emisiile observate unei emisii anormale. Pentru a lămurii toate caracteristicile emisiei în domeniul UV apropiat e nevoie totuși și de alte investigații, care deocamdată nu s-au efectuat. Desigur, sunt necesare alte investigații asupra eficienței laser ale probelor.

Bibliografie

- [1] Bridgman P.W., Proc.Am.Acad.Arts Sci. **60** (1925) 305
- [2] Stockbarger D.C., Rev. Sci. Instr. **7** (1938) 133
- [3] Stockbarger D.C., J. Opt. Soc. Am. **39** (1949)731
- [4] Nicoara I., Nicoara D., *Brevet de invenție Nr. 62842*, (1972)
- [5] Nicoara D., Nicoara I., Schlett Z., *Brevet de invenție Nr. 85993*, (1985)
- [6] Nicoara D. Nicoara I., *Mat. Sci. and Eng.* A102, L1, (1988)
- [7] Azaroff L.V., *Introduction to solids*, Huntington, NY.: Krieger (1960) **60** (1925) 305
- [8] Kittel C., *Introduction to solid state physics*, Wiley, NY. (1966)
- [9] Hannay N.B., *Solid-state chemistry*, Prentice-Hall (1867)
- [10] S. Amelinckx, *The direct observation of dislocations*, Academic Press, N.Y., (1964)
- [11] J.Friedel, *Dislocations*, Pergamon Press, Oxford, (1967)
- [12] Weertman J., Weertman J.R., *Elementary dislocation theory*, Oxford University Press, (1992)
- [13] Weertman J., *Dislocation based fracture mechanics*, World Scientific Publishing Co., (1996)
- [14] A. Prună, M. Ștef, G. Bușe, I. Nicoară, *Analele Universității de Vest din Timișoara*, **LII**, (2008)
- [15] J. Fontanella and C. Andeen, *J. Phys. C* **9** (1976) 1055
- [16] M. Ștef, *Teza de doctorat*, Universitatea de Vest din Timișoara, Timișoara (2009)
- [17] G. A. Smolenskii et all., *Sov. Phys., Solid State* **1** (1959)150
- [18] I. Nicoara, M. Munteanu, E. Preda and M. Ștef, *J. Crystal Growth* **310** (2008) 2020
- [19] B. A. Strukov and A.P. Levanyuk, *Ferroelectric Phenomena in crystals*, Springer, Berlin, 1998
- [20] C. Andeen, J. Fontanella, M. C. Wintersgill, P. J. Wecher, R. J. Kimble, Jr., and G. E. Matthews, Jr., *J. Phys. C : Solid State Phys.* **14** (1981) 3557
- [21] H. B. Johnson, N. J. Tolar, G. R. Miller and I. B. Cutler, *J. Phys. Chem. Solids*, **30** (1969) 31-42
- [22] R. D. Shelley and G. R. Miller, *J. Solis State Chemistry*, **1** (1970)218-226
- [23] V.B. Campos, G.F. Leal Ferreira, *J. Phys. Chem. Solids* **4** (1974)905
- [24] A. B. Lidiard, *Ionic conductivity, Handbuch derPhysik*, **XX**, (1957) 246
- [25] D. Kiro, W. Low, *Phys. Letters* **29A**, (1969) 537
- [26] V. Petit, P. Camy, J-L. Doualan, X. Portier and R. Moncorge, *Phys. Rev.* **B 78** (2008) 085131
- [27] P.P. Feofilov, *Opt. Spectrosc.* **1** (1956) 992,
- [28] A. A. Kaplyanskii and P. P. Feofilov, *Opt. Spectrosc.* **13** (1962) 235,
- [29] E. G. Reut, *Opt. Spectrosc.* **40** (1976) 99,
- [30] A. A. Kaplyanskii, V. N. Medvedev and P. L. Smolyanskii, *Opt. Spectrosc.* **42** (1977) 136,
- [31] S. Lizzo, A. Meijerink, G. J. Dirksen and G. Blasse, *J. Lumin.* **63** (1995) 223,
- [32] J. R. O’Connor and H. A. Bostick, *J. Appl. Phys.* **33** (1962) 1868,
- [33] D. S. McClure and Z. Kiss, *J. Chem. Phys.* **39** (1963) 3251,
- [34] S. M. Kaczmarek, T. Tsuboi, M. Ito, G. Boulon and G. Leniec, *J. Phys.: Condens. Mater.* **17** (2005) 3771,
- [35] A. A. Kaplyanskii and P. L. Smolyanskii, *Opt. Spectrosc.* **40** (1976) 528,
- [36] A.A. Kaplyanskii, V. N. Medvedev and P. L. Smolyanskii, *Opt. Spectrosc.* **41** (1976) 1043,
- [37] V. S. Zapasskii and P. P. Feofilov, *Opt. Spectrosc.* **41** (1976) 1051,
- [38] J. Rubio, *J. Phys. Chem. Solids* **52** (1991) 101
- [29] J. R. Lakowicz, *Principles of Fluorescence Spectroscopy*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, 1991,
- [40] T. S. Piper, J. P. Brown and D. S. McClure, *J. Chem. Phys.* **46** (1967) 1353
- [41] D. S. McClure and C. Pedrini, *Phys. Rev. B* **32** (1985) 8465,
- [42] P. Dorenbos, *J. Phys.: Condens. Matter.* **15** (2003) 2645.



UNIUNEA EUROPEANĂ

GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI ȘI
PROTECȚIEI SOCIALE
MĂDĂRĂȘIFondul Social European
POS DRU 2007-2013Instrumente Structurale
2007-2013MINISTERUL
EDUCAȚIEI
CERCETĂRII
TINERETULUI
ȘI SPORTULUI

OIPOSDRU

UNIVERSITATEA
„ALEXANDRU IOAN CUZA”
IASIFACULTATEA DE ȘTIINȚE POLITICE,
TIMIȘOARA

2. Obiectivele generale ale proiectului. (max. 1/2 pag.).

Obiectivul principal al primelor 6 luni al proiectului este studiul unor proprietăți fizice – structura de defecte și proprietățile spectroscopice – ale cristalelor de CaF_2 dopate cu diferite concentrații de YbF_3 în vederea găsirii compoziției optime pentru care se obține emisia cea mai puternică în domeniul UV; scopul este găsierea unui nou material laser în UV apropiat. Emisia observată este asociată cu tranzițiile ionilor bivalenți de Yterbiu.

Obiectivul principal al ultimelor 6 luni a fost studiul unor proprietăți fizice – structura de defecte și proprietățile spectroscopice – ale cristalelor de CaF_2 dopate cu diferite concentrații de YbF_3 ($x = 0,07; 0,17; 0,7; 1,2$) și codopate cu 2,5 mol% NaF pentru a studia modul în care ionii de Na^+ influențează proprietățile fizice, în special emisia, cristalelor de $\text{CaF}_2:\text{YbF}_3$ în vederea găsirii compoziției optime pentru care se obține emisia cea mai puternică în domeniul UV; scopul este găsierea unui nou material laser în UV apropiat. Emisia observată este asociată cu tranzițiile ionilor bivalenți de Yterbiu.

3. Metodologia utilizată (max. 1 pag.).

Proiectul își propune investigarea proprietăților spectroscopice, dielectrice și defectele de structură ale unor cristale de CaF_2 dopate cu YbF_3 și codopate cu ioni de Pb^{2+} și Na^+ , în vederea obținerii unor noi materiale laser în UV (prin codopare cu Pb^{2+}) și îmbunătățirea performanței emisiei în VIS-IR al cristalelor de $\text{CaF}_2:\text{YbF}_3$ codopate cu NaF, bazându-se pe procesul de *up-conversion*. În primul rând trebuie obținute aceste cristale.

S-au făcut achiziții de materiale, necesare obținerii cristalelor și s-au găsit condițiile de creștere. S-au obținut cristalele martor, CaF_2 dopate numai cu YbF_3 dar și cristalele de codopate cu NaF folosind metoda Bridgman de creștere a cristalelor existentă în Laboratorul de Creșterea Cristalelor a Universității de Vest din Timișoara.

S-au studiat proprietățile cristalelor de CaF_2 dopate cu YbF_3 și codopate cu NaF. Am ales acest codopant fiindcă recent s-a observat că performanțele laser ale materialelor dublu dopate sunt mai bune; aceasta se datorează procesului de reducere a defectelor de structură datorate compensării de sarcină, defecte care determină structura de multisite a spectrelor de absorbție și emisie. S-a studiat influența ionului de Na^+ , asupra spectrelor de absorbție și emisie, atât a ionilor bivalenți de Yb cât și a ionilor trivalenți de Yb. S-au făcut și alte investigații pe cristale obținute ca de exemplu: punerea în evidență a dislocațiilor, studiul morfologiei gropilor de atac și determinarea densității de dislocații. Pentru studierea modului în care ionii de Na^+ influențează proprietățile dielectrice ale cristalelor de $\text{CaF}_2:\text{YbF}_3$ s-au înregistrat spectrele de relaxare dielectrică, s-au determinat parametrii de relaxare (energia de activare și timpul de relaxare) și s-au determinat numărul de dipoli NN, respectiv Na^+-V_F pentru toate cristalele studiate. S-au înregistrat spectrele de absorbție și de emisie al tuturor cristalelor studiate și s-a pus în evidență atât luminescență galben-verde cât și cea din domeniul UV. În următoarea fază se va determina raportul optim de ioni Na:Yb pentru a elimina formarea defectelor de tip cluster și pentru a obține emisia cea mai eficientă. Atât obținerea cristalelor, cât și studiul proprietăților cristalelor, se vor efectua în cadrul Laboratorului de Creșteri de Cristale și a Laboratorului de Caracterizare a Cristalelor din cadrul Facultății de Fizică a Universității de Vest din Timișoara, dotate cu aparatură necesară efectuării tuturor investigațiilor. Măsurătorile de luminescență în domeniul IR nu pot fi efectuate în țară deoarece lipsește aparatură necesară. Astfel de măsurători se pot efectua, de exemplu la Universitatea din Caen, Franța.

Trebuie să menționez că obținerea cristalelor de CaF_2 , pure sau dopate, se pot obține doar la Universitatea de Vest din Timișoara.



UNIUNEA EUROPEANĂ

GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI ȘI
PROTECȚIEI SOCIALEFondul Social European
POS DRU 2007-2013Instrumente Structurale
2007-2013MINISTERUL
EDUCAȚIEI
CERCETĂRII
TINERETULUI
ȘI SPORTULUI

OIPOSDRU

UNIVERSITATEA
„ALEXANDRU IOAN CUZA”
IASIFACULTATEA DE ȘTIINȚE POLITICE,
TIMIȘOARA

4. Rezultatele obținute și diseminarea acestora (impactul, relevanța și aplicabilitatea rezultatelor) (max. 1 pag).

Obținerea unor noi cristale, care să fie utilizate ca medii active laser și investigarea proprietăților acestor cristale, este o direcție importantă în *Știința materialelor*, atât din punct de vedere al cercetării fundamentale cât și al cercetării aplicative. Cercetările legate de obținerea cristalelor laser, cu distribuția dopanților cât mai uniformă și investigarea unor noi materiale pentru a obține medii laser care să funcționeze la temperatura camerei, sunt de mare actualitate. O categorie aparte de materiale care pot fi folosite pentru generarea radiației laser o reprezintă materialele sub formă cristalină, monocristale dopate (impurificate), care se pot obține pe cale artificială prin diverse metode.

Studiul proprietăților cristalelor de CaF_2 dopate cu pământuri rare, în vederea utilizării lor ca medii laser în domeniul vizibil și infrarosu, este din nou în atenția cercetătorilor. Dificultățile legate de obținerea acestor cristale cu calități optice bune, reduce aria celor care pot investiga influența concentrației dopanților în vederea îmbunătățirii performanțelor laser a acestor materiale. Proprietățile spectroscopice ale ionilor Yb^{3+} sunt bine cunoscute pentru emisia în domeniul IR apropiat (la 1030nm). Emisia datorată ionilor de Yb^{2+} (care pot coexista în rețeaua CaF_2 cu ionii Yb^{3+}) este mai puțin studiată datorită dificultăților de a obține o conversie eficientă a valenței. Emisia ionilor bivalenți are loc, atât în domeniul UV apropiat, cât și în vizibil. Studiul influenței ionilor de Na^+ asupra intensității emisiei ionilor Yb^{2+} nu a fost raportat în literatura, înafara unor rezultate preliminare și încurajatoare, publicate de noi recent. Nu s-a analizat încă care este concentrația optimă a dopantului și a co-dopantului asupra intensității emisiei. În ultimele șase luni de derulare a proiectului s-au obținut următoarele rezultate semnificative:

- ✓ S-au obținut cristale martor de CaF_2 dopate cu x mol% YbF_3 ($x = 0,07; 0,17; 0,7; 1,2$) dar și codopate cu 2,5 mol% NaF folosind metoda Bridgman de obținere a cristalelor. Cristalele au fost obținute în *Laboratorul de creșterea cristalelor* de la Facultatea de Fizică a Universității de Vest din Timișoara. Cristalele obținute sunt transparente, fără incluziuni de grafit sau alte incluziuni gazoase, fără centrii de împrăștiere, având un diametru de aproximativ 10 mm și o lungime de 7-8 cm.
- ✓ S-au determinat condițiile optime de creștere: s-a determinat puterea și timpul necesar pentru a obține temperatura de topire (1388°C), temperatura de uscare (800°C) a materiei prime utilizate și gradientul de temperatură necesar obținerii acestor cristale.
- ✓ S-a determinat densitatea de dislocații în cristalele obținute și s-a constatat că în urma codopării cu 2,5 mol% NaF a cristalelor de $\text{CaF}_2:\text{YbF}_3$ densitatea de dislocații este de ordinul 10^4 dislocații/ cm^2 , ceea ce corespunde unor cristale de bună calitate.
- ✓ S-a pus în evidență fenomenul de relaxare dielectrică și s-au determinat parametrii de relaxare (energia de activare și timpul de relaxare).
- ✓ S-a observat în spectrul de relaxare dielectrică atât maximele caracteristice dipolilor $\text{Yb}^{3+}-\text{F}^-$, cât și a dipolilor $\text{Na}^+ - \text{V}_{\text{F}}$.
- ✓ S-au determinat parametrii de relaxare (energia de activare și timpul de relaxare) pentru ambele tipuri de dipoli.
- ✓ S-a constatat că valorile constantelor dielectrice ale probelor codopate cu NaF sunt mai mici decât cele ale cristalelor necodopate.
- ✓ Din spectrele dielectrice s-a determinat numărul de dipoli NN pentru toate probele studiate.
- ✓ Se observă că odată cu creșterea concentrației de YbF_3 în cristalele codopate numărul de dipoli NN (simetrie C_{4v}) scade formându-se astfel agregate dipolare mai complexe.
- ✓ S-au înregistrat spectrele de absorbție optică pentru cristalele de $\text{CaF}_2: x$ mol% YbF_3 codopate cu 2.5 mol% NaF ($x = 0,07; 0,17; 0,7; 1,2$).



UNIUNEA EUROPEANĂ

GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI ȘI
PROTECȚIEI SOCIALEFondul Social European
POS DRU 2007-2013Instrumente Structurale
2007-2013MINISTERUL
EDUCAȚIEI
CERCETĂRII
TINERETULUI
ȘI SPORTULUI

OIPOSDRU

UNIVERSITATEA
„ALEXANDRU IOAN CUZA”
IASIFACULTATEA DE ȘTIINȚE POLITICE,
din Timișoara

- ✓ Din analiza acestor spectre rezultă că, cu excepția cristalului de CaF_2 cu concentrația cea mai mică de YbF_3 , prezența ionilor de Na^+ diminuează intensitatea benzilor de absorbție caracteristice ionilor de Yb^{2+} din regiunea UV a spectrului, acest lucru fiind nefavorabil atunci când se dorește utilizarea acestor benzi pentru pompajul optic în vederea obținerii unor fenomene de luminescență.
- ✓ După codoparea cu NaF , benzile din domeniul IR caracteristice ionului de Yb^{3+} se rezolvă și se observă că acele benzi asociate ionilor de Yb^{3+} în poziții cu simetrie C_{4v} , respectiv cele asociate clusterilor de tip hexamer sunt mult diminuate.
- ✓ Se observă o nouă bandă (Y1), asociată ionilor de Yb^{3+} într-un câmp cristalin cu simetrie C_{3v} datorită prezenței ionului de Na^+ ca și compensator de sarcină electrică locală.
- ✓ S-au înregistrat spectrele de emisie ale cristalelor codopate cu NaF și s-au comparat cu cele ale cristalelor necodopate.
- ✓ Se observă că intensitatea maximelor de emisie ale probelor codopate este mai mică decât intensitatea probei “martor”, adică al probei dopată doar cu YbF_3 .
- ✓ Se observă influența, relativ slabă, a lungimii de undă la care se face excitarea asupra maximelor de emisie.
- ✓ Pentru a identifica maximele de emisie pentru probele de mai sus, s-a făcut descompunerea gaussiană a maximelor de emisie.
- ✓ Pentru toate probele codopate cu NaF , intensitatea benzii de emisie caracteristice ionilor de Yb^{2+} este diminuată de prezența ionilor de Na^+ , motiv pentru care putem spune că impurificarea cristalelor de $\text{CaF}_2:\text{YbF}_3$ cu NaF nu este de dorit atunci când se urmărește îmbunătățirea emisiei acestor cristale.
- ✓ Studiul influenței ionilor de Na^+ asupra proietăților de emisie observată în domeniul UV apropiat, pentru toate probele analizate în acest studiu, nu a fost raportată până acum în literatura de specialitate. Datorită faptului că benzile de absorbție în care se face excitarea nu se suprapun peste cele de emisie, putem afirma că aceste cristale ar putea fi medii active laser atât în domeniul vizibil cât și în UV apropiat. Desigur, sunt necesare și investigații specifice privind eficiența laser a acestor cristale, măsurători de timp de viață, etc.

Obținerea și investigarea proprietăților cristalelor este un domeniu de mare actualitate, cu perspective reale în ceea ce privește obținerea de materiale noi care să ajute la progresul tehnic în diferite domenii (electronică, optică, laseri, medicina, etc). În pofida rezultatelor promițătoare, domeniul se confruntă încă cu unele probleme tehnice, de rezolvarea cărora depinde aplicabilitatea materialelor obținute. Prin realizarea prezentului proiect s-ar deschide calea pentru implementarea în țara noastră a unor tehnici de vârf ce stau la baza obținerii materialelor laser. Expertiza în acest domeniu ar putea constitui o premiză pentru trecerea la aplicații industriale, ducând într-un final la îmbunătățirea caracteristicilor materialelor folosite în construcția laserilor. În concluzie, proiectul de față poate asigura suport științific pentru progresul tehnologic din România, fiind promițător și din punct de vedere economic dacă rezultatele obținute vor fi transferate în industrie.