

Application de la théorie de Judd–Ofelt pour l'étude des transitions intra-configurationnelles des ions terres rares insérés dans nano-cristaux -

Billal LEGHIGHANE

Soutenue en:

(Thèse en préparation)

Abstract: Les matériaux inorganiques activés aux ions terres rares sont largement employés comme des matériaux pour la détection des rayonnements nucléaires, lasers et autres applications dans le domaine photonique. La lumière émise sous l'influence des rayonnements excitatrices peut avoir des transitions dipolaires électriques $5d - 4f$ ou/et les transitions dipolaires magnétiques $4f-4f$ comme origines. Dans ce type de matériaux et sous formes des cristaux massif, Il est bien connu que les propriétés optiques, telles que les transitions d'absorption, d'excitation et d'émission, des ions de terres rares trivalents, dépendent fortement de la matrice cristalline hôte. Ces transitions peuvent être décrites par l'application de théorie de Judd-Ofelt (JO). Cette théorie peut fournir des informations sur plusieurs paramètres spectroscopiques importants tels que, les forces des transitions radiatives, les rapports de branchements ainsi que les durées de vies radiatives théoriques des niveaux d'énergies. En général, les paramètres de Judd-Ofelt, sont obtenus à partir des spectres d'absorption et/ou d'excitation des matériaux sous formes des monocristaux. Du point de vue fondamental, dans le cas des cristaux massifs, de dimensions macroscopiques et malgré qu'il existe encore jusqu'à maintenant quelques ambiguïtés, les phénomènes impliqués dans de luminescence sont aujourd'hui assez bien connus avec leurs problèmes associés. Par contre, dans le cas des nanomatériaux ces phénomènes peuvent être altérés par le confinement spatial (rapport surface sur volume), ce qui constitue une problématique scientifique importante, ainsi que la détérioration de structure idéal du matériau scintillateur. Par voie de conséquence, le développement passe par la compréhension de ces altérations et modifications qui est devenu récemment un défi scientifique. Les matériaux à l'échelle nanométriques sous présentes en général sous formes des poudres ce qui rends l'enregistrement des spectres d'absorptions difficulté voir non exploitable. De ce fait, l'évolution des paramètres de JO en fonction de taille et la morphologie des nano cristallites sont inconnus et non encore exploités. L'objectif de cette thèse de doctorat est d'adapter les calculs de Judd-Ofelt déjà utilisé pour les spectres d'absorption en utilisant les spectres d'émission terres rares dans plusieurs exemples de ces matériaux à l'échelle nanométrique solides. Cette implémentation sera effectuée à travers la maîtrise de la théorie de Judd-Ofelt et l'élaboration d'un programme de calcul, à travers lequel, on pourra extraire les paramètres spectroscopies, les forces des transitions radiatives, les rapports de branchements ainsi que les durées de vies radiatives théoriques des niveaux d'énergies.

Keywords : judd ofelt, ions terre rare, nano-cristaux JO