



Fenómeno de TL-TT en fluoruros dobles de potasio dopados con Tb

A.Gallegos¹, R. Licona^{2,1}, J. Azorin^{3,1}, J.A.I. Díaz Góngora¹, F. Rivas², T. Rivera¹, G. Hernandez².

¹ Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada del Instituto Politécnico Nacional, Legarí 694. Colonia Irrigación, 11500 México D. F.

² Instituto de Física de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. San Claudio y Blvd. 18 Sur Col. San Manuel Edificios 110 'A', 110 'B' y 110 'C', Ciudad Universitaria C.P. 72570, Puebla.

³ Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina C.P. 09340 Delegación Iztapalapa, México, D.F.

Resumen

Reportamos la aparición del fenómeno de termoluminiscencia termo-trasferida (TT-TT) en fluoruros dobles de potasio e itrio dopados con terbio, posterior a su irradiación durante el tratamiento termal de decaimiento isotérmico y la estructura de bandas del $K_2YF_5:Tb$ basado en DFT. Observándose en la estructura de bandas, hibridación y mezcla de estados f y fd donde se presentan la termo-trasferencia.

Introducción

En la datación de sedimentos de cuarzo utilizando la técnica de OSL se observa una recuperación de la señal luminiscente después de un blanqueamiento óptico y posterior tratamiento isothermal, tal fenómeno es conocido como TT-OSL de recuperación (Wang et al, 2006^a) y un incremento de la señal luminiscente, derivada de la liberación de electrones insensibles a la luz, por un tratamiento termal, ubicados en trampas termalmente más estables y su posterior re-atrapamiento en trampas sensibles a la luz, productoras de señal OSL, llamándose a este fenómeno de TT-OSL de transferencia básica (Wang et al, 2006^b). En la caracterización de materiales TL con usos en dosimetría personal los fluoruros dobles como el $K_2YF_5:Tb$ 0.99%, $K_2LuF_5:Tb$ 0.99% y $K_2GdF_5:Tb$ 0.99%, presentan una recuperación y/o pérdida de la señal local TL de un pico TL en la curva de brillo TL relacionada con la pérdida y/o recuperación de la señal local TL de otro pico diferente en la misma curva de brillo TL. A este fenómeno se le llamo termoluminiscencia Termo-transferida (TL-TT).

Una forma alternativa de estudiar los fenómenos que se producen en la estructura electrónica de un cristal, es a través del modelado de esta mediante un estudio mecánico cuántico, como el que desarrolla la teoría del funcional de la densidad (DFT), mediante la resolución de las ecuaciones de Kohn-Sham.

Procedimiento Experimental

Se estudiaron mediante absorción óptica los centros luminiscentes de los materiales $K_2YF_5:Tb$ 0.99%, $K_2LuF_5:Tb$ 0.99% y $K_2GdF_5:Tb$ 0.99% midiéndose el pico mas intenso de absorción en alrededor de 283 nm, la cual presentan dos picos de emisión TL para cada material.

Se realizaron modelaciones para el K_2YF_5 y $K_2YF_5:Tb$ construidas por el método de pseudopotencial ultra suave de Vanderbilt en un esquema LDA de Perdew-Zunger con un

conjunto de onda plana usando un conjunto base médium y con multiplicidad 6 para el caso de $K_2YF_5:Tb$.

Resultados y Análisis

Para cada material TL se calculo la profundidad de ambas trampas, por el método de forma de la curva para distintos modelos, observándose una diferencia de energía entre estas profundidades es pequeña comparada con sus profundidades. Además de un orden cinético no especifico para alguna o ambas trampas por lo que nos indica que posiblemente se encuentren mas trampas involucradas en la envolvente, lo que es indicativo de mas orbitales moleculares involucrados en la región de las trampas electrón (tabla 1).

Tabla 1. Energías de activación de las trampas y órdenes cinéticos

Muestra	Temperatura <i>a</i> (°C)	O.C. γ	E (eV)
$K_2YF_5:Tb$	266	0.973	1.1
0.99%	426	2.2	1.5
$K_2LuF_5:Tb$	222	2.0	0.8
0.99%	420	1.5	1.4
$K_2GdF_5:Tb$	262	1.8	0.7
0.99%	402	0.73	1.0

En la figura 1 se presenta la densidad de estados electrónicos y estructura de bandas del K_2YF_5 , donde se observa un gap de aproximadamente de 7 eV.

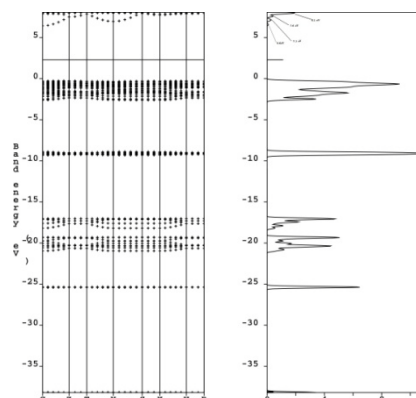


Fig. 1 Densidad de estados y estructura de bandas del K_2YF_5 .



En la figura 2 se muestra la densidad de estados y estructura de bandas del $K_2YF_5:Tb$ donde se observan los estados metaestables y banda de conducción muy extendida comparada con la de la figura 1, del cristal puro, donde se encuentran los orbitales mezclados f y fd, debajo del LUMO que corresponden a las trampas electrón y causados posiblemente por interacción eléctrica entre los electrones de la impureza con los electrones de los átomos ligantes de los centros luminiscentes así como también interacción espín-orbita y posiblemente campo cristalino. Este efecto en la estructura electrónica es posiblemente el responsable primeramente de transiciones no permitidas posiblemente responsables del fenómeno de termo-trasferencia dentro de la banda prohibida de la red cristalina durante el tratamiento isothermal que se aplica al material para su caracterización dosimétrica, y que refleja en las variaciones de las intensidades de las picos TL.

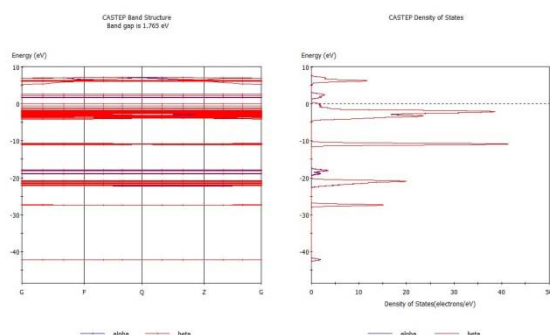


Fig. 2. Densidad de estados y estructura de bandas del $K_2YF_5:Tb$.

Conclusiones

Se propone que el fenómeno de TL-TT se produce durante la etapa de almacenamiento isothermal, por una transición no permitida entre estados f y fd que son trampas electrón (posiblemente centros F y/o excitones) y que es factible esta transferencia debido a que probablemente se encuentren orbitales intermedios entre los estados orbitales representados por las trampas en 266 °C y 426 °C y que tiene diferencias de energía de activación menor a 0.4 eV y que son posibles observarlas en la estructura de bandas de la figura 2, y probablemente correspondientes a bandas de absorción en NIR.

Agradecimientos

Agradecemos al CONACYT y al Programa Institucional de Formación de Investigadores (PIFI) del IPN por su apoyo a este trabajo.

Referencias

- [1] J. Azorin, A. Gallegos, T. Rivera, J.C. Azorin, N. Khaidukov, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 580 (2007) 177–179.
- [2] G. Adamiec et al. J. Phys. D: appl. Phys. 41 (2008) 135503
- [3] M. Stephan et al. Journal of Luminescence 114 (2005) 255-266