

## EFFETTI STRUTTURALI SU NANOPOLVERI DI Nd:YAG

Marco Giorgetti,<sup>1</sup> Mario Berrettoni,<sup>1</sup> Mario Luisa Saladino,<sup>2</sup> Eugenio Caponetti<sup>2</sup>

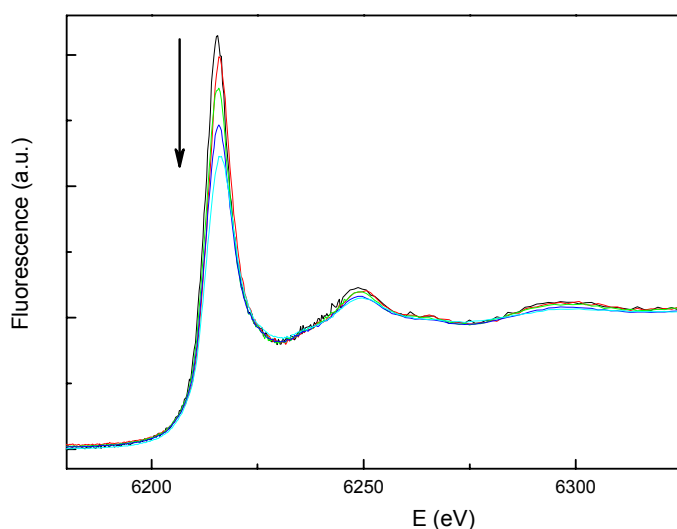
<sup>1</sup> *Dipartimento di Chimica Fisica ed Inorganica, Università di Bologna, Viale del Risorgimento 4 40126 Bologna, email: marco.giorgetti@unibo.it*

<sup>2</sup> *Dipartimento di Chimica Fisica, Università di Palermo, Viale delle Scienze; Parco D'Orleans II Pad. 17, 90128 Palermo*

L'inserzione di droganti quali i lantanidi su sistemi composti da ossidi di ittrio ed alluminio (in particolare la fase YAG) ha suscitato negli ultimi anni un notevole interesse a causa delle possibili applicazioni tecnologiche di questi materiali luminescenti, quali laser allo stato solido ad elevata potenza, sensori luminescenti, fibre ottiche nei sistemi di telecomunicazione.<sup>1-3</sup> Questi sistemi sono descritti in letteratura mediante differenti tipi di fasi cristalline: YAG, YAP, YAH e YAM. Le caratteristiche dei materiali ottenuti nonché la solubilità e la collocazione strutturale dello ione ospitato nelle varie fasi, dipendono in larga misura dal metodo di preparazione, dalla morfologia e dalla concentrazione relativa del drogante.

In questo contesto sono state eseguite delle misure di spettroscopia di assorbimento di raggi X (XAS)<sup>4</sup>, allo scopo di indagare la struttura locale attorno al drogante ed, in particolare, le modifiche strutturali, che interessano l'atomo di neodimio in una serie di campioni (nanopolveri di Nd:YAG) aventi un contenuto di neodimio pari a 1.6, 3.2, 6.4, 12.8 e 24 at.%. L'uso della tecnica XAS permette di focalizzare l'attenzione sull'intorno atomico locale degli atomi di neodimio, indipendentemente sia dallo stato di aggregazione della materia sia dalla presenza di un miscuglio di varie fasi, poiché le informazioni strutturali contenute nel segnale EXAFS, cioè la  $\chi(k)$ , dipendono solo dall'intorno chimico del fotoassorbitore. Il campo di azione della sonda XAS è limitato dal cammino libero medio del fotoelettrone ed è di circa 3-4 Å attorno all'atomo fotoassorbitore, in questo caso il neodimio.

La Figura 1 mostra la sovrapposizione delle curve XANES normalizzate, per tutti i campioni analizzati. Le curve appaiono simili, e quindi si esclude a priori l'esistenza di grandi modifiche nella geometria locale e nella struttura elettronica delle polveri analizzate, nell'intero intervallo di concentrazione. Tuttavia si osserva una diminuzione significativa dell'intensità della *white line*, osservabile a circa 6220 eV, all'aumentare del contenuto di neodimio. L'intensità della *white line* è legata alla risonanza dal livello di core  $2p_{3/2}$  allo stato vacante  $d$  dell'atomo assorbitore<sup>5</sup> e quindi relativa alla geometria locale attorno all'atomo di neodimio. La diminuzione lineare dell'intensità della *white line* in funzione del contenuto di neodimio (non apprezzabile dalla figura) sembra seguire due regimi distinti. Questo andamento è simile a quello riscontrato per il parametro di cella valutato mediante l'analisi degli spettri XRD<sup>6</sup> e supporta l'ipotesi che il neodimio sia distribuito in tutte le fasi cristalline presenti.



**Figura 1.** Spettri XANES alla soglia  $L_{III}$  del Neodimio. La direzione della freccia indica spettri di concentrazione crescente di neodimio.

La presente comunicazione riporta inoltre i risultati dell'analisi degli spettri EXAFS e, come di consueto<sup>7</sup>, consente di determinare i parametri strutturali. In questo caso, considerata la bassa concentrazione atomica del fotoassorbitore nei vari composti, le misure sperimentali sono affette da un non trascurabile rumore sperimentale. Di conseguenza, l'analisi dei dati non può spingersi oltre la prima sfera di coordinazione. Nonostante questo limite, l'analisi combinata degli spettri EXAFS e XANES ci ha permesso di confermare la sostituzione ittrio-neodimio nella fase YAG e la segregazioni di altre fase durante l'arricchimento di drogante.

## Riferimenti

1. Shikao S., Jiye W., *J. Alloys Compounds*, 2001, 327, 82
2. Manalart R., Rahaman M.N., *J. Mater. Sci.* 1996, 31, 3453.
3. Santra S., Zhang P., Wang K., Tapeç R., Tan W., *Anal. Chem.* 2001, 73, 4988.
4. Rehr J.J., Albers R.C., *Rev. Mod. Phys.* 2000, 72, 621.
5. Bianconi A., Marcelli A., Dexpert H., Karnak R., Totani A., Jo T., Petiau J., *Phys. Rev. B* 1987, 35, 806.
6. Caponetti E., Saladino M.L., Serra F., Enzo S., *J. Mater. Sci.* 2007, 42, 4418.
7. Giorgetti M., Berrettoni M., Scaccia S., Passerini S., *Inorg. Chem.* 2006, 45, 2750.