

Radiācijas defektu struktūra un stabilitāte LiYF₄

Jēkabs Cīrulis, Andris Antuzevičs, Andris Fedotovs, Uldis Rogulis
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Scintilatori ir materiāli, kas tiek izmantoti radiāciju detektējošās iekārtās, tādēļ tie var tikt pakļauti intensīvas radiācijas ietekmei. Patstāvīgu defektu veidošanās jonizējošā starojuma iedarbības rezultātā var ievērojami izmainīt materiālā mehāniskās un optiskās īpašības.

Darbā pētīti iepriekš sintezēti LiYF₄ monokristāli, kas tika apstaroti ar rentgenstarojumu. Apstarotajiem paraugiem tika izmērītas EPR un ENDOR spektru leņķiskās atkarības, rotējot kristālu ap divām savstarpēji perpendikulārām asīm. Paraugi tika izkarsēti temperatūrās no 50 °C līdz 400 °C, lai novērtētu defektu stabilitāti izmantojot EPR signāla intensitāti kā indikatoru defektu koncentrācijai. EPR spektriem veikta modelēšana un noskaidroti spina-Hamiltoniāņa parametri. No spina-Hamiltoniāņa parametru vērtībām izdarīti secinājumi par defektu struktūru. Defektu struktūras verifikācijai veikti DFT aprēķini, kas salīdzināti ar eksperimentālajiem EPR datiem.

Secināts, ka apstarotā LiYF₄ izveidojas vismaz trīs EPR aktīvi defekti, kas sabrūk pēc karsēšanas virs 300 °C. Sākotnējie DFT aprēķini dod labu tuvinājumu eksperimentālajiem datiem.

Structure and stability of radiation defects in LiYF₄

Jekabs Cirulis, Andris Antuzevics, Andris Fedotovs, Uldis Rogulis
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Scintillators are materials used for radiation detection and can therefore be exposed to intensive radiation. As a result of exposure to ionizing radiation, the mechanical and optical properties of the material may be significantly altered.

Pre-synthesized LiYF₄ single crystals were irradiated by X-rays. For irradiated samples, EPR and ENDOR spectra angular dependence was measured, rotating crystal around two mutually perpendicular axes. Samples were annealed at temperatures between 50 °C and 400 °C to assess the stability of the defects by using EPR signal intensity as an indicator for the concentration of defects. Spectra simulations have been performed for acquired EPR spectra and spin-Hamilton parameters were determined. Conclusions about the defect structure have been drawn from the values of spin-Hamilton parameters. DFT calculations have been carried out for verification of defect structure, which were compared with experimental EPR data.

It has been concluded that at least three EPR active defects are formed in irradiated LiYF₄ crystal, which anneal above 300 °C. Initial DFT calculations give a good approximation to experimental data.

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers “Jaunu radiācijas defektu struktūra LiYF₄” realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.