

Skābekļa piemaisījuma un fluora vakances kompleksa lokālā struktūra LiYF₄

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

Scintilatori ir materiāli, kas tiek izmantoti radiācijas 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. 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. Iespējamos modeļos izskatīti atsevišķu skābekļa piemaisījumu jonu un skābekļa molekulu defekti LiYF₄.

LiYF₄ sintēzes rezultātā ir iebūvējušies elektroniski neitrāli lādēti skābekļa defekti. Materiālu apstarojot ar rentgenstariem tiek izmainīta skābekļa elektronu konfigurācija, kas ir stabila istabas temperatūrā.

Local structure of an oxygen impurity and fluorine vacancy complex in LiYF₄

Jekabs Cirulis, Andris Antuzevics, Andris Fedotovs, Uldis Rogulis, Guntars Zvejnieks
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 dependencies were measured, rotating crystal around two mutually perpendicular axes. 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. Single oxygen impurity ions and oxygen molecules were considered as plausible defect models in LiYF₄.

During synthesis of LiYF₄ electronically neutral is oxygen formed. After material irradiation with X-rays, electron configuration on the oxygen defect is changed that remains stable at room temperature.

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.