### <u>https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-2-103-109</u> УДК 535.37

# ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ Y3Al5O12 (100) ОБЛУЧЕННЫХ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ ИОНАМИ КСЕНОНА

<u>Ж. Б. Досмағамбетов</u><sup>1</sup>, Р. Н. Асылбаев<sup>2</sup>, Ж. Т. Карипбаев<sup>1</sup>, Д. А. Джунисбекова<sup>1\*</sup>, А. Т. Акилбеков<sup>1</sup>, А. К. Даулетбекова<sup>1</sup>, Г. Б. Ергешбай<sup>1</sup>, Б. Ғ. Сұлтан<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан <sup>2</sup> Павлодарский педагогический университет им. Ә. Марғұлан, Павлодар, Казахстан

\* E-mail для контактов: diana911115@gmail.com

YAG (Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub>) является одним из важных оптических материалов. Он широко используется в твердотельных лазерах, осветительных приборах в качестве преобразователя белого светодиода, а также в сцинтилляционной технике.

В настоящей работе монокристаллы YAG (100) облучались ионами Хе с энергией 230 МэВ до флюенсов 6·10<sup>10</sup>–10<sup>13</sup> ион/см<sup>2</sup>, что позволяет изучить поведение материала в полях жесткой радиации. Для анализа облученных кристаллов YAG использовались следующие методы исследования: спектроскопия оптического поглощения и спектроскопия комбинационного рассеяния.

Анализ спектров поглощения показывает образование центров окраски в облученных образцах YAG. Концентрация различных типов точечных дефектов значительно увеличивается с ростом флюенса. Разностные спектры обнаруживают перекрывающиеся полосы в диапазоне 4,1–5,2 эВ, которые соответствуют различным конфигурациям F<sub>2</sub>-центров.

С увеличением флюенса приповерхностный слой становится аморфным, и материал аморфизуется. Высокоэнергетические моды рамановских спектров начинают расширяться уже при флюенсе 10<sup>10</sup> ион/см<sup>2</sup>. Учитывая высокую степень воздействия ионов Хе, можно утверждать, что начиная с флюенса 10<sup>12</sup> ион/см<sup>2</sup> все катион-анионные связи практически разрушаются.

**Ключевые слова:** *Y*<sub>3</sub>*Al*<sub>5</sub>*O*<sub>12</sub>, оптическое поглощение, Рамановские спектры, быстрые тяжелые ионы, радиационные дефекты.

### Введение

Многокомпонентные широкозонные кристаллические гранаты являются важнейшими функциональными материалами, имеющими широкие перспективы применения, к которым относится иттрий-алюминиевый гранат (Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub>, YAG) – один из важнейших оптических материалов, диэлектрик с большой шириной запрещенной зоны (около 7,8 эВ [1-3]), благодаря чему является идеальной матрицей для ионов редкоземельных и переходных металлов (например, Nd, Er, Cr и Tm). Кроме того, вследствие достаточно большого размера иона иттрия в решетке YAG, он легко может быть заменен в результате легирования большими ионами Nd, Ce, Eu и т.д. Уровни, связанные с различными дефектами и примесями в кристаллической структуре иттрий-алюминиевого граната, располагаются в пределах запрещенной зоны. Благодаря этому YAG широко используется в твердотельных лазерах, осветительных устройствах в качестве преобразователя белого светодиода, а также в сцинтилляционной технике [4-10].

Согласно [1] элементарная ячейка YAG содержит восемь формульных единиц со 160 атомами. YAG принадлежит к пространственной группе симметрии Ia3d (230), с Y в 24(c) 8-кратно координированных узлах, Al в 16(a) 6-кратно и 24(d) 4-кратно координированных узлах, и O в 96(h) узлах. Элементарная ячейка структуры YAG в полиэдрической системе состоит из додекаэдров, в которых локализируются ионы иттрия, а также октаэдров и тетраэдров, в которых размещены ионы Al.

Общеизвестно, что в процессе выращивания из расплава при высокой температуре в YAG кристаллах могут образоваться дефекты замещения или анти-сайт дефекты. В кристаллах иттрий-алюминиевого граната они возникают в результате замещений ионов  $Al^{3+}$  ионами  $Y^{3+}$  (Y<sub>Al</sub>), т. е. ионов  $Y^{3+}$  в додекаэдрических с-узлах ионами Al<sup>3+</sup> (Al<sub>y</sub>) [12–15]. Теоретический расчет энергии образования различных дефектов в кристаллах YAG показал, что анти-сайт дефекты являются преобладающими среди собственных дефектов, поскольку энергия их образования значительно меньше, чем дефектов по Френкелю и Шоттки [16–18]. Анти-сайт дефекты ведут к образованию электронных и дырочных ловушек и существенно влияют на рекомбинационные процессы в сцинтилляторах на основе гранатов, в частности на кинетику затухания сцинтилляций и наличие значительного вклада медленных компонентов в общей светосумме сцинтилляций [19, 20].

Радиационные дефекты в гранате YAG, могут возникать под воздействием различных видов излучения. В результате радиационного воздействия может происходить изменение физических свойств материала, включая его структурные, оптические и механические характеристики [12–21]. Однако следует



Рисунок 1. Структура ҮАG, ион иттрия размещается в додекаэдре, а ион алюминия – октаэдре и тетраэдре

отметить, что исследования радиационных дефектов в YAG, облученном быстрыми тяжелыми ионами (БТИ), имеет решающее значение для его применения в оптике и детектировании высоких энергий, лазерах и сцинтилляционных детекторах, которые работают в жестких радиационных условиях. Радиационные дефекты могут включать вакансии, междоузельные атомы, а также более сложные структуры, такие как, агрегаты дефектов, треки и хиллоки. С другой стороны, ионными пучками можно модифицировать свойства материала и использовать их. Например, скрытые треки созданные БТИ можно селективно вытравить в травящих растворах, создавая таким образом микро- или нанопористые слои. Этот процесс является основой использования облученных материалов в качестве детекторов частиц и фильтрационных мембран [21, 22]. Кроме того, пучки БТИ становятся мощным инструментом создания и модификации различных наноструктур благодаря уникальной способности практически мгновенно передавать энергию твердому телу в локализованном наноразмерном объеме [22].

Поэтому исследование поведения кристаллов YAG под действием пучка ионов 230 МэВ Хе, несомненно, является важной задачей физики высоких энергий, ядерного и термоядерного материаловедения.

#### Материалы и методы

В работе исследовались кристаллы Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub> (YAG) компании ALINEASON (Germany) с ориентацией (100). На рисунке 1 приведена структура монокристаллов YAG.

Монокристаллы  $Y_3Al_5O_{12}$ были облучены на ускорителе ДЦ-60 ионами Xe с энергией 230 МэВ в интервале флюенсов  $6\cdot 10^{10}-10^{13}$ ион/см². Параметры ионов 230 МэВ  $^{132}Xe^{22+}$  представлены на рисунке 2, согласно коду SRIM [23]: электронные потери  $S_e=22,5$ кэВ/рм,  $S_n=0,08$ кэВ/нм, длина пробега R=14,25 мкм.



Рисунок 2. Потери энергии иона 230 МэВ Хе в кристаллах YAG: 1 – удельные ионизационные потери Se (электронные); 2 – упругие потери энергии (ядерные) Sn

Отношение  $S_e/S_n = 25, 2/0, 08 = 315$ , то есть удельные ионизационные потери доминируют.

Спектры оптического поглощения измеряли с помощью универсального спектрофотометра Agilent Cary 7000 UMS (Agilent, Santa Clara, USA).

Спектры комбинационного рассеяния регистрировали с использованием Spectrometer с тройной решеткой TriVista 777 (TELEDYNE, USA).

#### Результаты и обсуждение

Спектры оптического поглощения монокристаллов YAG, облученных ионами 230 МэВ Хе, в зависимости от флюенса и ориентации представлены на рисунке 3. Все спектры были аппроксимированы гауссовыми функциями со следующими параметрами, представленными в таблице 1.

Центр Модель		Еп, нм Еп, эВ		<b>Е</b> л, э <b>В</b>	Е₅., эВ	Ссылки	
F+	v <sub>0</sub> <sup>2+</sup> + e	235; 370	5,23; 3,35	3,095; 2,67 (10 K)	3,33; 5,37; 6,56; 7,3	[24–27]	
F	v <sub>0</sub> <sup>2+</sup> + 2e	195; 240	6,36; 5,17	2,67 (10 K)	4,17 (слабый); 4,9; ~6,6; 6,95	[24–27]	
F <sup>.</sup>	v <sub>0</sub> <sup>2+</sup> + 3e	360; 480; 830	3,44; 2,58; 1,49			[28]	
$F^{+}(Y_{Al}^{3+})$	возмущенный F⁺около АД	370; 235; 200	3,35; 5,28; 6,2	400 нм, 3,1 эВ		[29]	
F*(Fe <sup>2+</sup> )	F⁺около примеси Fe	310	4,0			[29]	
F <sub>2</sub>	2(v <sub>0</sub> <sup>2+</sup> + 2e)	239; 221	5,19; 5,62			[30]	
0-		400	3,1			[31]	
F⁺	v <sub>0</sub> <sup>2+</sup> + e			3,1	4,9; 5,37; 6,57; 6,93, 7,30	[25]	
F	v <sub>0</sub> <sup>2+</sup> + 2e			2,69	4,165; 4,9; 6,57; 6,93	[25]	

Таблица 1. Параметры дефектов кристаллов YAG

Примечания: Е<sub>п</sub> – максимум полосы поглощения в нм и эВ; Е<sub>п</sub> – максимум полосы люминесценции в нм и эВ; Е<sub>в</sub> – максимум возбуждающего света в эВ.



Рисунок 3. Спектры радиационно-индуцированного оптического поглощения монокристалла YAG (100), облученного при RT ионами <sup>132</sup>Xe с энергией 230 МэВ до флюенса 6·10<sup>10</sup> (1), 10<sup>11</sup> (2), 10<sup>12</sup> (3) и 10<sup>13</sup> (4) ион/см<sup>2</sup>

В необлученных кристаллах YAG, выращенных из расплава, присутствуют различные точечные дефекты, самыми известными из которых являются анти-сайт дефекты (АД)  $Y_{Al}^{3+}$ , и кислородные вакансии. АД  $Y_{Al}^{3+}$ , согласно литературным данным, является самым распространенным дефектом в решетке YAG, поскольку энергия его образования является наименьшей для всех возможных дефектов структуры граната [32]. В необлученном кристалле YAG концентрация AD  $Y_{Al}^{3+}$  может доходить даже до 0,1– 0,2 ат.% [27].

Известно, что кислородные вакансии являются эффективными ловушками для электронов. Они могут быть заполнены одним или двумя электронами, формируя заряженный  $F^+$  и нейтральный F центры, соответственно (см. таблицу 1). В кристаллах YAG до облучения могут также присутствовать комплексные дефекты  $F^+$  ( $Y_{Al}^{3+}$ ), представляющий собой  $F^+$ центр поблизости АД ( $Y_{Al}^{3+}$ )<sup>осt</sup>, где ион иттрия заменяет ион алюминия в октаэдре (рисунок 1) [29].

Анализ данных, приведенных на рисунке 3, свидетельствует о формировании электронных центров в монокристаллах YAG (100), подвергнутых облучению ионов Xe с энергий 230 МэВ. Из таблицы 2 видно, что все полосы поглощения известных центров перекрываются, что значительно затрудняет их анализ. Несмотря на это, можно утверждать, что с увеличением дозы облучения количество точечных дефектов различной природы заметно увеличивается в облученных образцах.



Рисунок 4. Увеличение поглощения между флюенсами облучения (6·10<sup>10</sup> → 10<sup>11</sup>) Хе/см<sup>2</sup> (кривая 1), (10<sup>11</sup> → 10<sup>12</sup>) Хе/см<sup>2</sup> (кривая 2), (10<sup>12</sup> → 10<sup>13</sup>) Хе/см<sup>2</sup> (кривая 3) для монокристаллов YAG (100)

Разностные спектры поглощения для различных флюенсов позволили выявить ряд особенностей (рисунок 4). Наиболее интенсивной является полоса 4,9 эВ для всех флюенсов. Наблюдается смещение максимума этой полосы в сторону больших энергий с увеличением флюенса. Можно предположить, что это дефект связан с агрегатами электронных центров окраски. Вероятнее всего, это перекрывающиеся полосы от 4,1 до 5,2 эВ для различной конфигурации F<sub>2</sub> центров. Полоса 3,3 эВ, вероятнее всего – вторая полоса поглощения F<sup>+</sup> центра. Известно, что кристаллы иттрий-алюминиевого граната аморфизуются под действием БТИ-облучения с пороговым значением S<sub>e</sub> = 7,5 кэВ/нм [33].



Рисунок 5. Рамановские спектры монокристалла YAG (100), облученного при комнатной температуре ионами <sup>132</sup>Хе с энергией 230 МэВ и флюенсами до 10<sup>10</sup>–10<sup>13</sup> ион/см<sup>2</sup>

В нашем случае S<sub>e</sub> = 25,2 кэВ/нм, что значительно превышает пороговое значение. Эффект аморфизации хорошо виден на рисунке 5, где представлена зависимость Рамановских спектров монокристаллов YAG от флюенса.

В таблице 2 представлены экспериментальные частоты активного режима Рамана [34, 35].

В исследовании [36] показано, что моды симметрии  $A_{1g}$  имеют молекулярный характер и могут быть классифицированы как внутренние и внешние моды тетраэдрических субъединиц AlO<sub>4</sub>. Для необлученного кристалла и облученного до флюенса  $10^{10}$  ион/см<sup>2</sup> можно увидеть три интенсивные ярко выраженные моды  $A_{1g}$  и наблюдается уширение полос в области 1200–1500 см<sup>-1</sup> для облученного образца.

Согласно анализу [34, 36, 37], низкочастотные моды в основном соответствуют трансляционному движению тяжелых атомов Y с небольшими вкладами от вращательного и трансляционного движения, а также v<sub>3</sub> колебательных мод тетраэдров AlO<sub>4</sub>. Среднеэнергетические моды обусловлены квадрупольной (v<sub>2</sub>) молекулярной модой, а высокоэнергетические моды содержат в основном дыхательные (v<sub>1</sub>) и v<sub>4</sub> молекулярных мод AlO<sub>4</sub> [38]. При облучении до флюенса  $1 \cdot 10^{12}$  сm<sup>-2</sup>, в Рамановском спектре исчезают полосы 566, 715, 400, 545 v<sub>3</sub> (AlO<sub>4</sub>), 689 v<sub>1</sub>+ v<sub>4</sub> (AlO<sub>4</sub>), 715, 854 см<sup>-1</sup>. Увеличение флюенса до  $1 \cdot 10^{13}$  см<sup>-2</sup>, приводит к тому, что в Рамановском спектре остаются колебательные моды (370, 162 Y, 401, и 260 translation + rotation + v<sub>3</sub> (AlO<sub>4</sub>)) см<sup>-1</sup>.

(01)	<u> </u>	(01-1)	240- 43 40		<b></b>	<b>•</b>	•
Таблица 2. Экспериментальные частоты активного режима Рамана							

Симметрия моды	Эксп. ω <sub>ехр</sub> (см⁻¹) [34]	Эксп. ω <sub>ехр</sub> (см⁻¹) [35]	Эксп. ω <sub>exp</sub> (см⁻¹) Virgin	Флюенс 6·10 <sup>10</sup> см <sup>-2</sup>	Флюенс 1·10¹² см⁻²	Флюенс 1·10 <sup>13</sup> см <sup>-2</sup>	Колебания [35]
A <sub>1g</sub>	370	373	370	370	370	370	
A <sub>1g</sub>	559	556	567	566			
A <sub>1g</sub>	783	784	780	780	780		
Eg	163	164	162	162	162	162	Y
Eg	310		310	310	310		
Eg	340	340	339	338	337		
Eg	402		400	400	400	401	
Eg	523						
Eg	536						
Eg	712	720	716.5	715			
Eg	754						
T <sub>2g</sub>	45						
T <sub>2g</sub>	220	220	218	218	218		translation
T <sub>2g</sub>	243						
T <sub>2g</sub>	261	263	259	259	260	260	translation + rotation + v <sub>3</sub> (AlO <sub>4</sub> )
T <sub>2g</sub>	295						
T <sub>2g</sub>	361						
T <sub>2g</sub>	372						
T <sub>2g</sub>	406	403	400	400			
T <sub>2g</sub>	438						
T <sub>2g</sub>	545	544	545	545			v3 (AIO4)
T <sub>2g</sub>	691	690	689	689			v1+ v4 (AIO4)
T <sub>2g</sub>	718	720	716	715			
T <sub>2g</sub>	857	857	854	854			

Следует отметить, что высокоэнергетические моды начинают уширяться уже с флюенса 10<sup>10</sup>ион/см<sup>2</sup>, т.е. они более чувствительны к началу аморфизации материала. Учитывая высокий уровень воздействия со стороны БТИ, можно утверждать, что начиная с флюенса 10<sup>12</sup> ион/см<sup>2</sup> все связи практически разрушены вследствие перекрытия треков.

### Выводы

Монокристаллические образцы ҮАС (100) облучались ионами Хе с энергией 230 МэВ на ускорителе ДЦ-60 до флюенсов от 6·10<sup>10</sup> до 10<sup>13</sup> ионов/см<sup>2</sup>. Отношение Se/Sn, равное 315, указывает на преобладание ионизационных потерь в диапазоне 14,5 мкм. Поскольку в спектрах поглощения наблюдается значительное перекрывание полос поглощения различных дефектов, для анализа мы воспользовались разностными спектрами между различными флюенсами. Разностные спектры поглощения для различных флюенсов позволили выявить ряд особенностей. Наиболее интенсивной является полоса 4,9 эВ для всех флюенсов. Наблюдается смещение максимума этой полосы в сторону больших энергий с увеличением флюенса. Можно предположить, что этот дефект связан с агрегатами электронных центров окраски. Вероятнее всего это перекрывающиеся полосы от 4,1 до 5,2 эВ, для различной конфигурации F2 центров.

Согласно анализу низкочастотные моды в основном соответствуют трансляционному движению тяжелых атомов Y с небольшими вкладам дыхательного и трансляционного движения, а также  $v_3$  колебательных мод тетраэдров AlO<sub>4</sub>. Средне энергетические моды обусловлены квадрупольной ( $v_2$ ) молекулярной модой, а высокоэнергетические моды содержат в основном дыхательные ( $v_4$ ) молекулярные моды AlO<sub>4</sub>. Увеличение флюенса до  $1 \cdot 10^{13}$  см<sup>-2</sup>, приводит к тому, что в Рамановском спектре остаются колебательные моды (370, 162 Y, 401, и 260 translation + rotation +  $v_3$  (AlO<sub>4</sub>)) см<sup>-1</sup>). Все это свидетельствует о перекрывании треков.

#### Благодарность

Данное исследование было профинансировано Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № АР19574768).

#### ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

- Zorenko Y. et al. Luminescence of excitons and antisite defects in the phosphors based on garnet compounds // Radiation measurements. - 2004. - V. 38. - No. 4–6. - P. 677–680. https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2004.02.009
- Zorenko Y. V. et al. Luminescence of excitons in singlecrystal garnets //Optics and Spectroscopy. – 2004. – V. 96. – P. 390–397. https://doi.org/10.1134/1.1690031
- Zorenko Y. et al. Exciton and antisite defect-related luminescence in Lu<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub> and Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub> garnets // Physica status solidi (b). – 2007. – V. 244. – No. 6. – P. 2180–2189. https://doi.org/10.1002/pssb.200642431

- Franta D., Mureşan M. G. Wide spectral range optical characterization of yttrium aluminum garnet (YAG) single crystal by the universal dispersion model // Optical Materials Express. – 2021. – V. 11. – No. 12. – P. 3930– 3945. https://doi.org/10.1364/OME.441088
- Lupei V., Lupei A. Nd: YAG at its 50th anniversary: Still to learn // Journal of Luminescence. – 2016. – V. 169. – P. 426–439. https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2015.04.018
- Nandi P. et al. Study of crystallization kinetics, microstructure and optical properties of Ce: YAG glassceramics for white LED applications // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. – 2022. – P. 1–7. https://doi.org/10.1007/s10973-021-10690-w
- Borlaf M. et al. Strong photoluminescence emission at low dopant amount in YAG: Ce and YAG: Eu phosphors // Materials Research Bulletin. – 2018. – V. 100. – P. 413– 419. https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2018.01.005
- Zapadlik O. et al. Engineering of YAG: Ce to improve its scintillation properties // Optical Materials: X. – 2022. – V. 15. – P. 100165. https://doi.org/10.1016/j.omx.2022.100165.
- Sidletskiy O. et al. Impact of carbon co-doping on the optical and scintillation properties of a YAG: Ce scintillator // Crystal Growth & Design. 2021. V. 21. No. 5. P. 3063–3070.
- https://doi.org/10.1021/acs.cgd.1c00259
  10. Pankratov V. et al. Peculiarities of luminescent properties of cerium doped YAG transparent nanoceramics // Radiation Measurements. 2010. V. 45. No. 3-6. P. 392-394. https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2009.12.014
- Euler F., Bruce J. A. Oxygen coordinates of compounds with garnet structure // Acta Crystallographica. – 1965. – V. 19. – No. 6. – P. 971–978. https://doi.org/10.1107/S0365110X65004747
- Euler F., Bruce J. A. Oxygen coordinates of compounds with garnet structure //Acta Crystallographica. – 1965. – V. 19. – No. 6. – P. 971–978. https://doi.org/10.1107/S0365110X65004735
- Ashurov M. K. et al. Spectroscopic study of stoichiometry deviation in crystals with garnet structure // Physica status solidi (a). - 1977. - V. 42. - No. 1. - P. 101-110. https://doi.org/10.1002/pssa.2210420108.
- Dong J., Lu K. Noncubic symmetry in garnet structures studied using extended x-ray-absorption fine-structure spectra // Physical Review B. – 1991. – V. 43. – No. 11. – P. 8808. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.8808
- Landron C. et al. Yttrium coordination shell in YAG related structures // Physica status solidi (b). – 1996. – V 196. – No. 1. – P. 25–31. https://doi.org/10.1002/pssb.2221960104
- Kuklja M. M., Pandey R. Atomistic modeling of native point defects in yttrium aluminum garnet crystals // Journal of the American Ceramic Society. – 1999. – V. 82. – No. 10. – P. 2881–2886. https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1999.tb02172.x
- 17. Kuklja M. M. Defects in yttrium aluminium perovskite and garnet crystals: atomistic study // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2000. – V. 12. – No. 13. – P. 2953. https://doi.org/10.1088/0953-8984/12/13/307
- Liu Bo, Gu Mu, Liu Xiaolin, Huang Shiming, Ni Chen. Formation energies of antisite defects in Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub>: A firstprinciples study // Applied Physics Letters. – 2009. – V. 94. – No. 12. https://doi.org/10.1063/1.3109799

- Nikl M., Laguta V. V., Vedda A. Complex oxide scintillators: Material defects and scintillation performance // Physica status solidi (b). – 2008. – V. 245. – No. 9. – P. 1701–1722. https://doi.org/10.1002/pssb.200844039
- Stanek C.R., McClellan K.J., Levy M.R., Milanese C., Grimes R.W. The effect of intrinsic defects on Re<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub> garnet scintillator performance // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2007. – V. 579. – No. 1. – P. 27–30. https://doi.org/10.1016/j.nima.2007.04.006
- Fleischer R. L., Price P. B., Walker R. M. Nuclear tracks in solids: principles and applications. – Univ of California Press, 2022.
- Komarov F. F. Nano-and microstructuring of solids by swift heavy ions // Physics-Uspekhi. – 2017. – V. 60. – No. 5. – P. 435.
- https://doi.org/10.3367/UFNe.2016.10.038012
  23. Ziegler J. F., Biersack J. P. The stopping and range of ions in matter // Treatise on heavy-ion science: volume 6: astrophysics, chemistry, and condensed matter. Boston, MA: Springer US. 1985. P. 93–129.
- 24. Popov A. I., Kotomin E. A., Maier J. Basic properties of the F-type centers in halides, oxides and perovskites // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2010. – V. 268. – No. 19. – P. 3084–3089. https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.05.053
- Zorenko Y., Zorenko T., Voznyak T. Luminescence centers in Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub>:La single crystals // Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing. – 2011. – V. 289. – No. 1. – P. 012028.
- https://doi.org/10.1088/1742-6596/289/1/012028
  26. Izerrouken M., Meftah A., Nekkab M. Color centers in neutron-irradiated Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub>, CaF<sub>2</sub> and LiF single crystals // Journal of luminescence. 2007. V. 127. No. 2. P. 696–702. https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2007.04.005
- Zorenko Y., Zorenko T., Voznyak T., Mandowski A., Xia Q., Batentschuk M., Friedrich J. Luminescence of F+ and F centers in Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> oxide compounds // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – IOP Publishing, 2010. – V. 15. – No. 1. – P. 012060. https://doi.org/10.1088/1757-899X/15/1/012060
- Izerrouken M., Meftah A., Nekkab M. Radiation damage induced by swift heavy ions and reactor neutrons in Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub> single crystals // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2007. – V. 258. –

No. 2. – P. 395–402.

https://doi.org/10.1016/j.nimb.2007.02.092

- Springis M., Pujats A., Valbis J. Polarization of luminescence of colour centres in YAG crystals // Journal of Physics: Condensed Matter. – 1991. – V. 3. – No. 28. – P. 5457. https://doi.org/10.1088/0953-8984/3/28/021
- 30. Masumoto T., Kuwano Y. Effects of oxygen pressure on optical absorption of YAG // Japanese journal of applied physics. – 1985. – V. 24. – No. 5R. – P. 546. https://doi.org/10.1143/JJAP.24.546
- Kvapil J., Kvapil J., Kubeček V. Laser properties of YAG: Nd grown from the melt contained in molybdenum crucibles // Czechoslovak Journal of Physics B. – 1979. – V. 29. – No. 11. – P. 1282–1292. https://doi.org/10.1007/BF01590449
- 32. Nikl M. et al. Scintillator materials achievements, opportunities, and puzzles // IEEE transactions on nuclear science. – 2008. – V. 55. – No. 3. – P. 1035–1041. https://doi.org/10.1109/TNS.2007.913480
- Meftah A., Djebara M., Khalfaoui N., Stoquert J.P., Studer F., Toulemonde M. Thermal spike description of the damage creation in Y3Al5O12 induced by swift heavy ions // Materials Science Forum. – 1997. – V. 248. – P. 53–56.
- 34. Poulos Markos, Giaremis Stefanos, Kioseoglou Joseph, Arvanitidis John, Christofilos Dimitris, Ves Sotirios, P. Hehlen Markus, Neil L. Allan, Chris E. Mohn, and Papagelis Konstantinos. Lattice dynamics and thermodynamic properties of Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub> (YAG) // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2022. – V. 162. – P. 110512. https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2021.110512
- Kostić S., Lazarević Z.Ž., Radojević V., Milutinović A., Romčević M., Romčević N.Ž., Valčić A. Study of structural and optical properties of YAG and Nd: YAG single crystals // Materials Research Bulletin. – 2015. – V. 63. – P. 80–87.
- https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2014.11.033
- 36. Papagelis K., Kanellis G., Arvanitidis J., Kourouklis G.A., Ves S. Phonons in rare-earth aluminum garnets and their relation to lattice vibration of AlO4 // Physica status solidi (b). – 1999. – V. 215. – No. 1. – P. 193–198. https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3951(199909)215: 1%3C193::AID-PSSB193%3E3.0.CO;2-G
- 37. Papagelis K., Kanellis G., Ves S., Kourouklis G.A. Lattice dynamical properties of the rare earth aluminum garnets (Re<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub>) // Physica status solidi (b). – 2002. – V. 233. – No. 1. – P. 134–150. https://doi.org/10.1002/1521-3951 (200209)233:1%3C134::AID-PSSB134%3E3.0.CO;2-Z
- Herzberg G. Molecular spectra and molecular structure I // Spectra of diatomic molecules. – 1950.

## ЖОҒАРЫ ЭНЕРГИЯЛЫ КСЕНОН ИОНДАРЫМЕН СӘУЛЕЛЕНГЕН ҰзАІ<sub>5</sub>О<sub>12</sub> (100) МОНОКРИСТАЛДАРЫНЫҢ ОПТИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ

<u>Ж. Б. Досмағамбетов</u><sup>1</sup>, Р. Н. Асылбаев<sup>2</sup>, Ж. Т. Карипбаев<sup>1</sup>, Д. А. Джунисбекова<sup>1\*</sup>, А. Т. Акилбеков<sup>1</sup>, А. К. Даулетбекова<sup>1</sup>, Г. Б. Ергешбай<sup>1</sup>, Б. Ғ. Сұлтан<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Л.Н. Гумилев атындагы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан <sup>2</sup> Әлкей Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті, Павлодар, Қазақстан

\* Байланыс үшін E-mail: diana911115@gmail.com

YAG (Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub>) маңызды оптикалық материалдардың бірі болып табылады. Ол қатты денелі лазерлерде, ақ жарықдиодты түрлендіргіш ретінде жарықтандыру құрылғыларында, сонымен қатар сцинтилляциялық технологияда кеңінен қолданылады.

Бұл жұмыста ҮАС (100) монокристалдары 230 МэВ энергиямен Хе иондарымен б·10<sup>10</sup>–10<sup>13</sup> ион/см<sup>2</sup> флюенске дейін сәулелендірілді, бұл материалдың қатан радиация өрістеріндегі әрекетін зерттеуге мүмкіндік береді. Сәулеленген ҮАС кристалдарын талдау үшін келесі зерттеу әдістері қолданылды: оптикалық жұтылу спектроскопиясы және комбинациялық шашырау спектроскопиясы.

Жұтылу спектрлерін талдау сәулеленген ҮАС үлгілерінде боялу орталықтарының түзілуін көрсетеді. Әртүрлі типтегі нүктелік ақаулардың концентрациясы флюенстің жоғарылауымен айтарлықтай артады. Айырымдық спектрлер 4,1–5,2 эВ диапазонында қабаттасатын жолақтарды анықтайды, олар F<sub>2</sub> орталықтарының әртүрлі конфигурацияларына сәйкес келеді.

Флюенс ұлғайған сайын беткі қабаты аморфты болады, және материал аморфизацияланады. Раман спектрлерінің жоғары энергиялық модалары 10<sup>10</sup> ион/см<sup>2</sup> флюенс кезінде кеңейе бастайды. Хе иондарының әсер етуінің жоғары дәрежесін ескере отырып, 10<sup>12</sup> ион/см<sup>2</sup> флюенстен бастап барлық катион-аниондық байланыстар іс жүзінде жойылады деп айтуға болады.

*Түйін сөздер: Y*<sub>3</sub>*Al*<sub>5</sub>*O*<sub>12</sub>, оптикалық жұтылу, Раман спектрлері, жылдам ауыр иондар, радиациалық ақаулар.

### OPTICAL PROPERTIES OF Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub> (100) SINGLE CRYSTALS IRRADIATED WITH HIGH-ENERGY XENON IONS

<u>Zh. B. Dosmagambetov</u><sup>1</sup>, R. N. Assylbayev<sup>2</sup>, Zh. T. Karipbayev<sup>1</sup>, D. A. Junisbekova<sup>1\*</sup>, A. T. Akilbekov<sup>1</sup>, A. K. Dauletbekova<sup>1</sup>, G. B. Yergeshbay<sup>1</sup>, B. G. Sultan<sup>1</sup>

> <sup>1</sup> L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan <sup>2</sup> Margulan University, Pavlodar, Kazakhstan

> > \* E-mail for contacts: diana911115@gmail.com

YAG  $(Y_3Al_5O_{12})$  is one of the important optical materials. It is widely used in solid-state lasers, lighting devices as a white LED converter, and in scintillation technology.

In this work, YAG (100) single crystals were irradiated with 230 MeV Xe ions to fluences of  $6 \cdot 10^{10}$ – $10^{13}$  ion/cm<sup>2</sup>, which allows us to study the behavior of the material in hard radiation fields. The following research methods were used to analyze the irradiated YAG crystals: optical absorption spectroscopy and Raman spectroscopy.

Analysis of the absorption spectra shows the formation of color centers in the irradiated YAG samples. The concentration of various types of point defects increases significantly with increasing fluence. The difference spectra reveal overlapping bands in the range of 4.1-5.2 eV, which correspond to different configurations of  $F_2$  centers.

With increasing fluence, the surface layer becomes amorphous, and the material is amorphized. High-energy modes of Raman spectra begin to expand already at a fluence of  $10^{10}$  ion/cm<sup>2</sup>. Considering the high degree of influence of Xe ions, it can be stated that starting from a fluence of  $10^{12}$  ion/cm<sup>2</sup>, all cation-anion bonds are practically destroyed.

*Keywords: Y*<sub>3</sub>*Al*<sub>5</sub>*O*<sub>12</sub>, optical absorption, Raman spectra, fast heavy ions, radiation defects.