

## Neitronu izraisītu radiācijas defektu EPR $Gd_3Ga_5O_{12}$

Jēkabs Cīrulis<sup>1</sup>, Uldis Rogulis<sup>1</sup>, Nīna Mironova-Ulmane<sup>1</sup>, Andris Antuzevičs<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Gallija gadolīnija granāts (GGG) un līdzīgi materiāli ir plaši izmantoti kā scintilatori. Scintilatori tiek pakļauti jonizējošajam starojumam, un stabilu defektu rašanās negatīvi ietekmē šādu materiālu darbību. Gadolīnija alumīnija gallija granāts (GAGG) ir plaši izmantots komerciāls scintilatoru materiāls, kas pēc struktūras ir ļoti līdzīgs GGG. Stablu strukturālo defektu izpēte ir svarīga, lai izprastu GGG un līdzīgu materiālu mijiedarbību ar jonizējošo starojumu.

GGG EPR-aktīvi defekti, izņemot vienu platu  $Gd^{3+}$  līniju [1], parasti nav novērojami. Izmantojot blīvuma funkcionālu teoriju (DFT), tika atklāts, ka EPR defekti nav novērojami pie normāliem apstākļiem, jo gadolīnija  $4f^7$  elektroni atrodas  $S=7/2$  stāvoklī, ar ievērojamu nulles lauka un Starka šķelšanos [2] un neaizpildītie enerģijas līmeņi atrodas aizliegtajā zonā, kur tie nomāc defektu EPR novērošanu.

Tika atklāts, ka novērotie EPR-aktīvie defekti rodas GGG [3] strukturālu izmaiņu rezultātā pēc apstarošanas ar 0,1 MeV neitroniem un  $10^{20}$  n/cm<sup>2</sup> fluenci. Šajā pētījumā viena no defektu pozīcijām tiek attiecināta uz konkrētu oktaedrisko Ga pozīciju, kas starošanas virzienā ir identiska neatkarīgi no rotācijas simetrijas operācijām. Neitronu saķeršanas kodolreakcijas rezultātā Ga pārvēršas par Ge, kā valences  $4p^1$  elektrona orbitāle novietojas virzienā, kas ir paralēls starošanas virzienam.

## EPR of neutron-radiation-induced defects in $Gd_3Ga_5O_{12}$

Jekabs Cirulis<sup>1</sup>, Uldis Rogulis<sup>1</sup>, Nina Mironova-Ulmane<sup>1</sup>, Andris Antuzevics<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Gallium gadolinium garnet (GGG) and similar compounds are extensively used as scintillator materials. Scintillators are subjected to ionising radiation and the occurrence of stable defects negatively impacts the performance of such materials. Gadolinium aluminium gallium garnet (GAGG) is a commonly used commercial scintillator material that is structurally very similar to GGG. Studying stable structural defects could be important for understanding the how GGG and similar materials interact with ionising radiation.

EPR spectra for defects in GGG are usually not observed [1] with the exception of a single broad  $Gd^{3+}$  line. Using density functional theory (DFT) it was discovered that EPR-active defects are suppressed because gadolinium  $4f^7$  electrons have a  $S=7/2$  spin state with significant zero field and Stark splitting [2] as a result unfilled gadolinium levels are located in the band gap suppressing observation of EPR defects.

The formation of EPR-active defects in GGG have been reported due to structural changes [3] after irradiation with 0.1 MeV neutrons and fluence of  $10^{20}$  n/cm<sup>2</sup>. In this study, the one of defect positions is attributed to specific the octagonal Ga position that is rotationally invariant along irradiation direction where Ga is replaced with Ge as a result of neutron capture nuclear reaction. Where uncompensated  $4p^1$  electron orbital is oriented parallel to the irradiation direction.

[1] Mironova-Ulmane, N., et al. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 480 (2020): 22-26.

[2] Pardavi-Horváth, M., et al. *physica status solidi (a)* 84.2 (1984): 547-553.

[3] Chukalkin, Yu G., *physica status solidi (a)* 144.1 (1994): 9-15.