

ФОРМИРОВАНИЕ ПОЛОС ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ИОНОВ Ce^{3+} В КРИСТАЛЛАХ YAG:Ce

Т.И. БУТАЕВА*, К.Л. ОВАНЕСЯН, А.В. ЕГАНЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: tbutaeva@gmail.com

(Поступила в редакцию 15 сентября 2023 г.)

Рассмотрены спектральные особенности и структурные факторы, влияющие на формирование полос люминесценции Ce^{3+} ионов в кристаллах YAG:Ce . Определены энергетические уровни $4f$ оболочек ионов Ce^{3+} , занимающих как додекаэдрические, так и октаэдрические узлы кристаллической решетки. Показано участие ионов Ce^{3+} и ионов $\text{Ce}^{3+}_{\text{Al}}$ в структуре полосы люминесценции и определена многоцентровая структура ионов Ce^{3+} в $4f \rightarrow 5d$ переходах активатора.

1. Введение

При необходимости использования быстродействующих сцинтилляторов при высоких температурах, либо при исследовании агрессивных сред, перспективны лёгкие кислородсодержащие кристаллы, в частности YAG:Ce . Механическая и химическая стойкость, высокий световыход (20000–24000 ф/МэВ) и короткое время высвечивания (70 нс) [1–3] этих кристаллов позволяет использовать их в качестве сцинтилляторов во многих областях и, в частности, для регистрации гамма и рентгеновского излучения.

Сцинтилляция кристаллов YAG:Ce определяется структурой энергетических уровней ионов Ce^{3+} , обеспечивающей видимое излучение кристалла на интерконфигурационном $4f^0 5d^1 \rightarrow 4f^1 5d^0$ переходе активатора. $5d$ состояние иона Ce^{3+} , в кубическом кристаллическом поле YAG:Ce , расщепляется на пять уровней, обусловленных дуплетом $^5D_{3/2}$ и триплетом $^5D_{5/2}$. В настоящее время, к переходам с участием нижних возбуждённых уровней состояния $5d$ отнесены полосы поглощения на 459, 340, ~220 и ~205 нм [4–6]. В работе [6] предполагается, что пятый уровень иона Ce^{3+} находится в зоне проводимости кристалла.

Идеальная структура кристалла граната YAG:Ce подразумевает частичное замещение додекаэдрических ионов Y^{3+} ионами Ce^{3+} , а октаэдрические и тетраэдрические узлы заняты ионами Al^{3+} . Однако, реальная структура кристалла далека от совершенства, что связано с особенностями методов их выращивания и чистотой исходной шихты. И, чем сложнее состав кристалла, тем более разнообразны способы замещения ионами тех или иных узлов кристаллической решетки, что напрямую отражается на спектральном поведении активатора. Так, например, в процессе выращивания кристаллов YAG:Ce происходит существенное увеличение количества дефектов Y_{Al} , связанных с неэквивалентными замещени-

ями, которые приводят к увеличению параметра элементарной ячейки и вероятности вхождения ионов Ce^{3+} в кристалл. В кристаллах LuAG:Ce , основываясь на результатах ЭПР и спектрально-люминесцентного анализа [7–9] и в кристаллах YAG:Ce [10] были идентифицированы центры Ce^{3+} и $\text{Ce}^{3+}_{\text{Al}}$ и, искажённые ближайшим дефектом (d), центры $\text{Ce}^{3+}_{\text{Al}-d}$. Наличие коротковолнового дуплета в области $\sim 217\text{--}238$ нм и длинноволнового триплета в области $\sim 260\text{--}320$ нм этих центров показало, что энергетическое положение полос возбуждения соответствует октаэдрическому окружению активатора.

Влияние γ -облучения на кристаллы YAG:Ce (0.1 и 0.2 ат%) [10], выращенные методом Бриджмена, показало, что в γ -наведённых спектрах кристаллов наблюдается почти в 10 раз более интенсивное поглощение центров $\text{Ce}^{4+}_{\text{Al}}$ на 300 нм, чем в не активированном кристалле. В выращенном кристалле с низким содержанием ионов Ce (0.1 ат%), весьма заметная доля от реальной концентрации активатора стабилизируется в состоянии Ce^{4+} , увеличивая количество дырочных ловушек в ближайшем окружении отмеченного иона. При этом часть этих ловушек (3–6 ат%) стабилизируется вблизи октаэдрических $\text{Ce}^{4+}_{\text{Al}}$ узлов кристалла. В кристалле YAG:Ce (0.2 ат%) лишь 0.75 % ионов Ce, т.е. 0.0015 ат% находится в состоянии Ce^{4+} , однако, при этом фиксировалось вдвое большее количество $\text{Ce}^{4+}_{\text{Al}}$ дефектов. Повышенное содержание $\text{Ce}^{4+}_{\text{Al}}$ в выращенных кристаллах YAG:Ce (0.2 ат%) стабилизирует большее количество зарядовых ловушек вблизи этих дефектов и приводит к упорядочению ближайшего окружения додекаэдрического узла иона Ce^{3+} . В работе [12], с использованием EXAFS-спектроскопии, было показано, что собственные и примесные точечные дефекты в кристаллах YAG будут, прежде всего, адаптироваться за счет образования антицентров, а не вакансий или междоузлий в решетке.

Цель данного исследования – определение спектральных особенностей полосы люминесценции ионов Ce^{3+} в кристаллах YAG:Ce , обусловленной межконфигурационными переходами активатора $4f^15d^0 \rightarrow 4f^05d^1$.

2. Используемые материалы и методы исследования

Монокристаллы YAG:Ce были выращены методом вертикальной направленной кристаллизации (метод Бриджмена) [13] в молибденовых контейнерах диаметром 14 мм в инертно-восстановительной среде (Ar/H_2 10 об%) со скоростью 1–1.5 мм/час на заправки, ориентированные вдоль кристаллографической оси $\langle 100 \rangle$. Выращивание кристаллов проводилось из стехиометрических расплавов с ионами высокочистых оксидов Y_2O_3 , CeO_2 (99.99%) и кристаллического Al_2O_3 (99.95%).

Абсорбционно-люминесцентные исследования проводились с использованием спектрофотометров SPECORD M40 (54000–11000 cm^{-1}), SPECORD M80 (2000–400 cm^{-1}) и спектрометра ДФС-24 (360–800 нм). Люминесценция возбуждалась галогенными лампами (“PHILIPS”, 100 Вт) с использованием оптических фильтров. Возбуждающее излучение фокусировалось собирающей линзой на плоской поверхности кристалла, перпендикулярной направлению регистрации полученного излучения, которое, посредством кварцевого световода, подавалось на входную щель спектрометра.

3. Экспериментальные результаты и обсуждение

Полосы люминесценции Ce^{3+} ионов в кристаллах со структурой граната, в первую очередь обусловлены энергетическим положением и структурой $4f$ уровней основного $^2F_{5/2}$ и возбужденного $^2F_{7/2}$ состояний, а также уровней оболочки $5d$. В этой связи были подробно рассмотрены как внутриконфигурационные ($4f \rightarrow 4f$), так и межконфигурационные переходы ($4f^1 5d^0 \leftrightarrow 4f^0 5d^1$), которые позволили определить особенности формирования полос люминесценции в том или ином кристалле.

3.1. Внутриконфигурационные переходы ($4f \rightarrow 4f$).

Часть полос поглощения кристалла YAG:Ce (0.66 ат%) находится на краю валентной зоны, которая заметно сдвинута в сторону высоких энергий, по сравнению с неактивированным кристаллом YAG (рис.1). Интенсивность внутриконфигурационных $4f \rightarrow 4f$ ($^2F_{5/2} \rightarrow ^2F_{7/2}$) полос поглощения на ~ 2.7 порядка меньше, чем интенсивность поглощения полос межконфигурационных $4f \rightarrow 5d$ переходов. Рассматриваемые переходы относятся к запрещённым переходам и наблюдаются, в основном, в результате вынужденных электродипольных переходов [14], связанных с нецентросимметричными взаимодействиями примесного иона с кристаллическим окружением. Полуширина наиболее интенсивной полосы поглощения составляет $\sim 29 \text{ см}^{-1}$. Непосредственно перед основным спектром $^2F_{5/2} \rightarrow ^2F_{7/2}$ перехода иона Ce^{3+} в кристалле YAG:Ce также присутствует слабоинтенсивный и узкий дополнительный спектр, который ассоциируется с поглощением октаэдрических ионов $\text{Ce}^{3+}_{\text{Al}}$. Повышение концентрации Ce^{3+} ионов увеличивает количества как додекаэдрических узлов, где ион Ce^{3+} замещает ион Y^{3+} , так и октаэдрических, где ион Ce^{3+} замещает ион Al^{3+} , что способствует увеличению параметра элементарной ячейки кристалла (табл.1).

Табл.1. Координационные числа и ионные радиусы [15] элементов кристалла YAG:Ce , концентрация ионов Ce^{3+} и параметр элементарной ячейки (a_0) YAG:Ce

Ион	К. ч.	Радиус, Å	К. ч.	Радиус, Å	Кристалл		
Ce^{3+}	6	1.01	8	1.14	Состав	Концентрация ионов Ce^{3+} , ат%	a_0 , Å
Ce^{4+}	6	0.80	8	0.97			
Y^{3+}	6	0.9	8	1.019	YAG:Ce	0.11	12.005
Al^{3+}	6	0.53				0.66	12.012

Для подтверждения наличия в кристалле октаэдрических ионов Ce^{3+} было проведено сравнительное рассмотрение спектров кристаллов YAG:Ce (0.66 ат%) и GdScAG:Ce (2.5 ат% в расплаве), нормированных на величины первых, наиболее интенсивных полос (рис.2).

Как следует из спектров, представленных на рис.2, полосы поглощения ионов Ce^{3+} , занимающих додекаэдрические позиции рассматриваемых кристаллов, смещены друг относительно друга в зависимости от энергии связи иона Ce^{3+} в додекаэдрическом узле. По сравнению с кристаллом YAG:Ce , полосы поглощения ионов Ce^{3+} в кристалле GdScAG:Ce смещены в низкоэнергетическую область из-за сравнительно большего объёма отмеченного узла. В высокоэнергетической области наблюдаются спектры поглощения, которые могут быть отнесены к

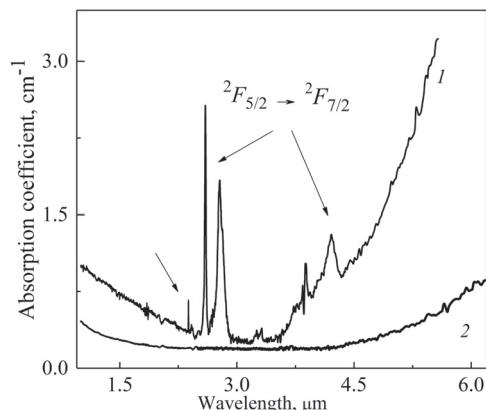


Рис.1. Спектры поглощения кристаллов: 1 – YAG:Ce (0.66 ат%) и 2 – YAG в области $4f \rightarrow 4f$ переходов ионов Ce^{3+} . Положение полос октаэдрических ионов Ce^{3+} отмечено стрелкой в области 2.3–2.5 мкм. Двумя стрелками отмечено поглощение додекаэдрического узла.

спектрам ионов Ce^{3+} , занимающих октаэдрические позиции (рис.2b, область спектров 1, 2 и 3). Максимальная интенсивность этих полос для центров 1 составляет $\approx 21\%$ от интенсивности нормированных на единицу основных полос поглощения. Неожиданным оказалось полное совпадение спектрального распределения октаэдрических центров 1 в обоих кристаллах (рис.2b). Подобное совпадение означает, что в кристаллах GdScAG:Ce обнаруживается такая же доля ионов Ce^{3+} , занимающих октаэдрические позиции, как и в YAG:Ce и предполагает полное отсутствие в их ближайшем окружении как ионов Gd^{3+} , так и Sc^{3+} .

На основе анализа представленных на рис.2 спектров поглощения и данных по относительному распределению уровней состояния $^2F_{7/2}$ ионов Ce^{3+} в кристалле YAG:Ce, полученных при 13 К [11], определены схемы энергетических уровней $^2F_{5/2}$ и $^2F_{7/2}$ и идентифицированы переходы между ними при 300 К (табл.2) в кристалле YAG:Ce (0.66 ат%).

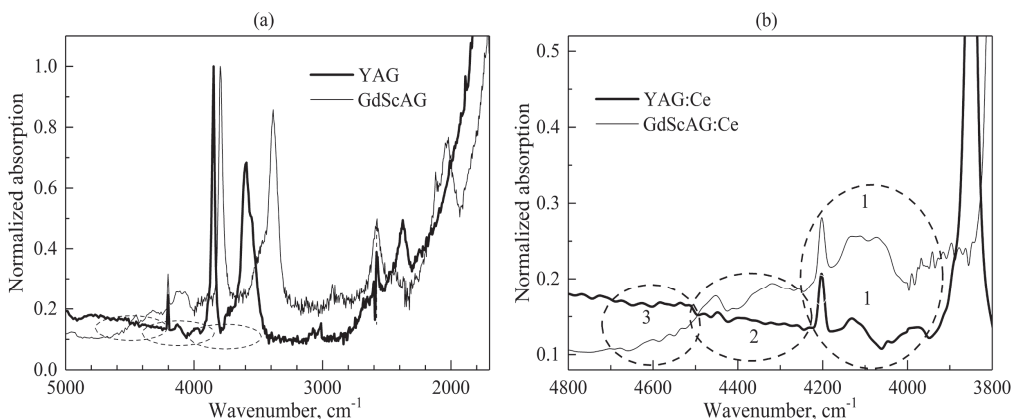


Рис.2. (а) Нормированные спектры поглощения кристаллов 1 – YAG:Ce (0.66 ат%) и 2 – GdScAG:Ce (2.5 ат% в расплаве) в области переходов $^2F_{5/2} \rightarrow ^2F_{7/2}$ ионов Ce^{3+} . (б) Фрагмент спектров, где отмечены области полос поглощения ионов Ce^{3+} , занимающих октаэдрические позиции в кристаллах YAG:Ce (1) и в GdScAG:Ce (1–3).

Табл.2. Уровни энергии состояний $^2F_{5/2}$ и $^2F_{7/2}$ ионов Ce^{3+} и переходы между ними в кристаллах YAG:Ce

Основное состояние	№ уровня	$E, \text{см}^{-1}$	Переходы ионов Ce^{3+} в кристалле YAG:Ce					
	1	0	Додекаэдрический узел иона Ce^{3+}					
$^2F_{5/2}$	2	250	$^2F_{5/2} \rightarrow ^2F_{7/2}$	см^{-1}	$^2F_{5/2} \rightarrow ^2F_{7/2}$	см^{-1}	$^2F_{5/2} \rightarrow ^2F_{7/2}$	см^{-1}
	3	296						
Состояние $^2F_{7/2}$	4	2094	$1 \rightarrow 4$	2094	$2 \rightarrow 4$	1844	$3 \rightarrow 4$	1798
	5	2250	$1 \rightarrow 5$	2250	$2 \rightarrow 5$	2000	$3 \rightarrow 5$	1954
	6	2375	$1 \rightarrow 6$	2375	$2 \rightarrow 6$	2125	$3 \rightarrow 6$	2079
	7	3848	$1 \rightarrow 7$	3848	$2 \rightarrow 7$	3597	$3 \rightarrow 7$	3552
Основное состояние	№ уровня	$E, \text{см}^{-1}$	Октаэдрический узел иона Ce^{3+}					
	1	0						
$^2F_{5/2}$	2	75	$^2F_{5/2} \rightarrow ^2F_{7/2}$	см^{-1}	$^2F_{5/2} \rightarrow ^2F_{7/2}$	см^{-1}	$^2F_{5/2} \rightarrow ^2F_{7/2}$	см^{-1}
	3	93						
Состояние $^2F_{7/2}$	4	4021	$1 \rightarrow 4$	4021	$2 \rightarrow 4$	3946	$3 \rightarrow 4$	3928
	5	4047	$1 \rightarrow 5$	4047	$2 \rightarrow 5$	3971	$3 \rightarrow 5$	3954
	6	4075	$1 \rightarrow 6$	4075	$2 \rightarrow 6$	4000	$3 \rightarrow 6$	3902
	7	4202	$1 \rightarrow 7$	4202	$2 \rightarrow 7$	4127	$3 \rightarrow 7$	4109

3.2. Межконфигурационные переходы ($4f^1 5d^0 \rightarrow 4f^0 5d^1$)

Следующая группа уровней, принимающая участие в процессах люминесценции ионов Ce^{3+} принадлежит уровням $5d$ конфигурации и находится в области высокоэнергетического края прозрачности кристаллов (выше 52729 см^{-1}). Основная часть спектра поглощения межконфигурационного перехода $^2F_{5/2} \rightarrow ^2D_{3/2}$ ионов Ce^{3+} в кристаллах YAG:Ce с различным содержанием активатора наблюдается в области $54000\text{--}12000 \text{ см}^{-1}$ (рис.3а). С увеличением концентрации активатора интенсивность разрешенных полос на 22285 см^{-1} и 28798 см^{-1} возрастает. Полуширины полос поглощения при различных концентрациях активатора составляют ~ 1700 и $\sim 1800 \text{ см}^{-1}$, соответственно. Для отмеченных полос не наблюдалось сколько-либо существенного спектрального сдвига при изменении концентрации активатора. Однако рассмотрение последовательных разностных спектров поглощения отмеченных кристаллов (рис.3б) позволило выявить структуру уровней основного состояния $^2F_{5/2}$ внутри полосы на 22350 см^{-1} (табл.3). Расстояния между пиками 1 и 2, а также между 1 и 3 соответствуют расстояниям между уровнями состояния $^2F_{5/2}$ (табл.2). Наличие двух смещённых друг относительно друга групп (1, 2 и 3), т. е. двух смещённых центров иона Ce^{3+} объясняется разницей параметров элементарных ячеек кристалла с концентрацией Ce^{3+} 0.073 ат% ($12.006 \text{ \AA}$) и кристаллов с концентрацией 0.15 и 0.21 ат% ($12.007 \text{ \AA}$).

Табл.3. Уровни энергии ионов Ce^{3+} в кристаллах YAG:Ce, участвующие в переходах $4f^1 5d^0 \rightarrow 4f^0 5d^1$

YAG:Ce					
Переход	Полоса	Энергия уровня, см ⁻¹	Переход	Полоса	Энергия уровня, см ⁻¹
$F_{5/2} \rightarrow {}^2D_{3/2}$	1	≈ 22285	${}^2F_{5/2} \rightarrow {}^2D_{5/2}$	3	≈ 44060
	2	≈ 29986		4	≈ 45889
				5	≈ 48380

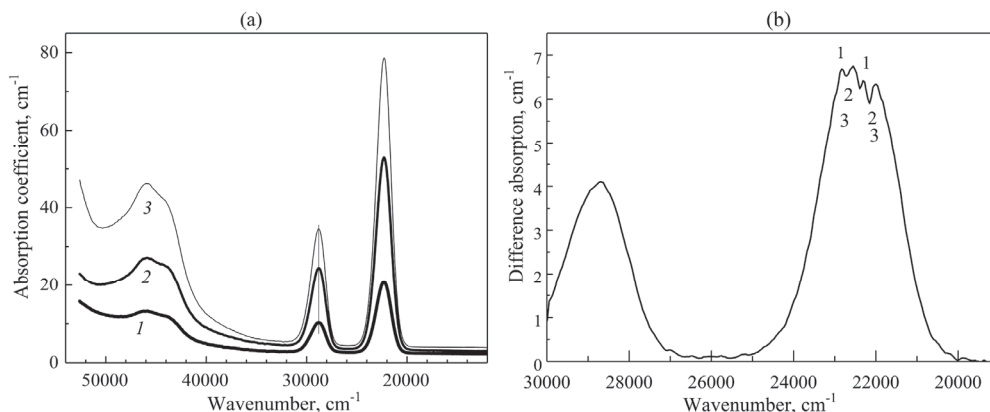


Рис.3. (а) Спектры поглощения ($F_{5/2} \rightarrow {}^2D_{3/2}$) кристаллов YAG:Ce с различным содержанием активатора: 1 – 0.073 ат%, 2 – 0.15 ат%, 3 – 0.21 ат%. (б) Разностные спектры полос поглощения отмеченных кристаллов.

3.3. Люминесценция ионов Ce^{3+} в кристаллах YAG:Ce

Возбуждение спектров люминесценции ионов Ce^{3+} в кристаллах граната связано с необходимостью использования кристаллических образцов сравнительно крупного размера, спектр поглощения которых может быть чрезмерно интенсивным. На рис.4а приведены спектры поглощения и люминесценции ($4f^15d^0 \leftrightarrow 4f^05d^1$) кристаллов YAG:Ce с концентрацией активатора 0.11 и 0.66 ат% с толщиной пластинок 0.195 см.

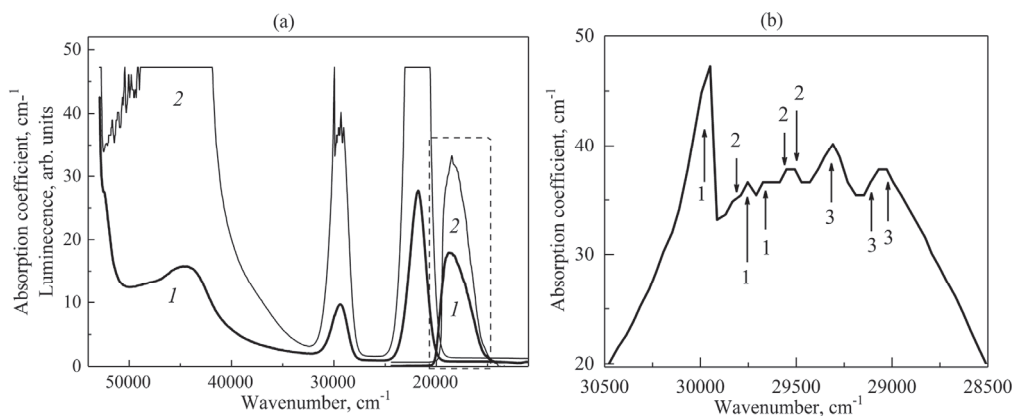


Рис.4. (а) Спектры поглощения кристаллов: 1 – YAG:Ce (0.11 ат%) и 2 – YAG:Ce (0.66 ат%) толщиной 0.195 см⁻¹; и увеличенные в 8 раз полосы люминесценции ионов Ce^{3+} , возбужденных галогенной лампой. Область излучения отмечена пунктирной линией. (б) Структура полосы поглощения на ≈ 29986 см⁻¹ кристалла YAG:Ce (0.66 ат%).

При одинаковых размерах образцов и условий возбуждения люминесценции для кристаллов с большей концентрацией активатора наблюдается увеличение интенсивности излучения ионов Ce^{3+} почти вдвое и сдвиг максимума излучения в низкоэнергетическую область. Кроме того, на вершине, единственной полностью видимой полосы поглощения на ≈ 29986 см⁻¹ (рис.4а,б), в кристалле

YAG:Ce (0.66 ат%) наблюдается структура полос, которая свидетельствует о наличии, как минимум, трех различных Ce^{3+} -центров, отмеченных стрелками на рис.4b. Расстояния между пиками внутри каждого из центров 1, 2 и 3 соответствуют величинам расщепления основного состояния $^2F_{5/2}$ (табл.2). Повышение концентрации активатора и объема кристалла увеличивает долю смещённых уровней активатора из-за наличия различных дефектов и изменения параметра ячейки. Многоцентровая структура полос переходов $^2F_{5/2} \rightarrow ^2D_{3/2,5/2}$ ионов Ce^{3+} (рис.3b и рис.4) не позволяет зафиксировать точное значение пика полос поглощения (в пределах 500 см^{-1} и более).

Максимум полосы люминесценции кристалла YAG:Ce (0.11 ат%) представляет собой неравномерное плато (рис.5), образованное структурой нижнего возбужденного уровня состояния $^2D_{3/2}$. Как следует из рис.3b, низкоэнергетический уровень состояния $^2D_{3/2}$, в процессе возбуждения приобретает повторяющуюся структуру основного состояния $^2F_{5/2}$, где преобладают два центра, разных по интенсивности поглощения. Однако в спектрах поглощения кристалла YAG:Ce (0.66 ат%) идентифицируются три центра (рис.4b) и, соответственно, максимум излучения также образуется тремя (1, 2, 3) различными центрами (рис.5b и табл.4). Более того, те же самые максимумы излучения наблюдаются в объемном кристалле YAG:Ce (0.11 ат%) (рис.5).

В исследуемых кристаллах ширина уровней $^2D_{3/2}$ формируется совокупностью уровней ионов Ce^{3+} , занимающих несколько отличающихся додекаэдрических узлов. Высооэнергетическое крыло полос люминесценции формируется переходами с полосы $\sim 22285 \text{ см}^{-1}$ ($5d$) (табл.3) на уровни 5, 6 и 7 состояния $^2F_{7/2}$ оболочки $4f$ додекаэдрических узлов ионов Ce^{3+} (табл.2). Низкоэнергетическое крыло полосы излучения в YAG:Ce (0.11 ат% и 0.66 ат%) ($d = 0.19 \text{ см}$) частично

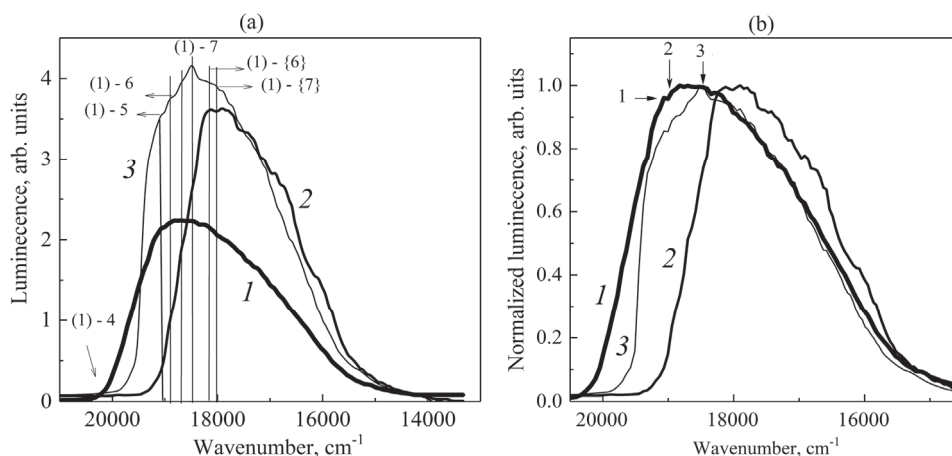


Рис.5. (а) Полосы люминесценции ионов Ce^{3+} в кристаллах YAG:Ce: 1 – Ce 0.11 ат% ($d = 0.19 \text{ см}$), 2 – Ce 0.11 ат% ($d = 0.90 \text{ см}$), 3 – Ce 0.66 ат% ($d = 0.07 \text{ см}$). Вертикальными линиями отмечена часть идентифицированных переходов, принимающих участие в формировании полос люминесценции. (1) – первый уровень состояния $^2D_{3/2}$ (табл.3), 4, 5, 6, 7 – уровни $^2F_{7/2}$ додекаэдрических или октаэдрических ({}) узлов ионов Ce^{3+} (табл.2). (б) Нормированные полосы люминесценции кристаллов, где стрелками отмечены максимумы пиков излучения 3-х различных центров ионов Ce^{3+} (табл.4).

формируется переходами с той же $5d$ полосы, но на уровне ${}^2F_{7/2}$ ($4f$) октаэдрических узлов $\{\}$ ионов Ce^{3+} (табл.2 и рис.5). Ниже $\sim 18000 \text{ см}^{-1}$, в кристалле YAG:Ce (0.11 ат%) ($d = 0.90 \text{ см}$), в спектре люминесценции усиливаются интенсивности добавочных центров ионов Ce^{3+} из-за увеличения объема кристалла (рис.5). Значительное сужение полосы люминесценции этого кристалла в высокоэнергетической области обусловлено реабсорбцией излучения заметно уширенной полосы поглощения на $\sim 22285 \text{ см}^{-1}$.

4. Заключение

Интенсивность и форма полос люминесценции ионов Ce^{3+} в кристаллах YAG:Ce зависят от концентрации активатора, объема исследуемого образца и внутренних дефектов в структуре кристалла. Высокоэнергетическое крыло полосы люминесценции формируется ионами Ce^{3+} додекаэдрических узлов кристалла, а низкоэнергетическое – ионами октаэдрических узлов Ce_{AL} .

В кристаллах YAG:Ce (0.11 и 0.66 ат%) были обнаружены три различных центра ионов Ce^{3+} . Причиной образования многоцентровости кристаллов является величина коэффициента распределения иона активатора в растущем кристалле, который может быть либо больше, либо меньше единицы в зависимости от относительного размера активатора. Коэффициент распределения иона Ce^{3+} в YAG равен 0.1, что приводит к последовательному обогащению расплава ионами Ce^{3+} в процессе роста. Соответственно, увеличение концентрации ионов Ce^{3+} в растущем кристалле увеличивает параметр элементарной ячейки. Этот эффект наглядно виден в высококонцентрированном кристалле (рис.4b), где градиент концентрации активатора приводит к смещению и уширению уровней энергии $4f^1 5d^0 \leftrightarrow 4f^0 5d^1$ переходов. Уровни состояний $4f$, энергия которых на порядок или на два порядка меньше, существенно не изменяются по сравнению с межконфигурационными переходами.

Наличие октаэдрических узлов активатора (Ce_{AL}) несколько расширяет область максимума излучения в кристалле с концентрацией 0.11 ат%, но при этом, изменяя свою валентность ($\text{Ce}^{3+}_{\text{Al}} \leftrightarrow \text{Ce}^{4+}_{\text{Al}}$), образует буферную зону вблизи активатора, отвлекая на себя часть электронных дырочных ловушек [10]. Увеличение в 6 раз содержания ионов Ce^{3+} в кристалле YAG:Ce (0.66 ат%) проявляет максимум излучения и способствует более резкому увеличению интенсивности излучения. Соответственно уменьшается ширина полос излучения 3023 см^{-1} для кристалла YAG:Ce (0.11 ат%) и 2751 см^{-1} для кристалла YAG:Ce (0.66 ат%).

Многоцентровая структура полос поглощения и люминесценции ионов Ce^{3+} на переходах $4f \leftrightarrow 5d$ приводит к значительному разбросу экспериментальных данных [11] по определению энергии (или длины волны) как полос поглощения, так и люминесценции. Максимальная интенсивность того или иного центра будет определять максимальное положение полос поглощения и люминесценции ионов Ce^{3+} , а количество центров – ширину этих полос, что, в свою очередь, зависит от концентрации активатора и метода выращивания кристалла. Причиной многоцентровости могут быть также и различные дефекты в кристаллах: октаэдрические Ce^{3+} вблизи додекаэдрического иона Ce^{3+} , различные вакансии вблизи активатора и т.д.

Работа выполнена при поддержке Государственного Комитета по науке РА (Республики Армении) (проект 21AG–1C030).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Ueda, S. Tanabe. Optical Materials: X, **1**, 100018 (2019).
2. M. Moszynski, M. Kapusta, M. Mayhugh, D. Wolski, S.O. Flyckt. IEEE Trans. Nucl. Sci., **44**, 1052 (1997).
3. J.A. Mares, M. Nikl, A. Beitlerova, C.D'Ambrosio, F. de Notaristefani, K. Blazek, P. Maly, K. Nejezhleb. Optical Materials, **24**, 281 (2003).
4. J.F. Owen, P.B. Dorain, T. Kobayasi. J. Appl. Phys. **52**, 12161223 (1981).
5. W.J. Miniscalco, J.M. Pellegrino, W.M. Yen. J. Appl. Phys., **49**, 6109 (1978).
6. V. Mürk, N. Yaroshevich. In: Proc. Intern. Conf. on Inorganic Scintillators and Their Applications (SCINT-95), p. 359 (1996, Delft University Press).
7. V.V. Laguta, A.M. Slipenyuk, M.D. Glinchuk, I.P. Bykov, Y. Zorenko, M. Nikl, J. Rose, K. Nejezhleb. Radiat. Meas., **42**, 835 (2007).
8. V. Babin, V.V. Laguta, A. Makhov, K. Nejezhleb, M. Nikl, S. Zazubovich. IEEE Trans. Nuclear Science, **55**, 1156 (2008).
9. C.R. Stanek, K.J. McClellan, M.R. Levy, C. Milanese, R.W. Grimes. Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research, **A579**, 27 (2007).
10. T. Butaeva, I. Ghambaryan, M. Mkrtchyan. Opt. Spectr, **118**, 247 (2015).
11. H. Przybylinska, Ch.-G. Ma, M.G. Brik, A. Kaminska, P. Sybilski, A. Wittlin, M. Berkowski, Yu. Zorenko, V. Gorbenko, H. Wrzesinski, A. Suchocki. Appl. Phys. Letters, **102**, 241112 (2013).
12. M.M Kuklja. Phys.: Condens. Matter, **12**, 295 (2000).
13. Kh.S. Bagdasarov. High-Temperature Crystallization from Melt. Yerevan, Edit Print, 2003.
14. Д.Т. Свиридов, Р.К. Свиридова, Ю.Ф. Смирнов. Оптические спектры ионов переходных металлов в кристаллах. Москва, Наука, 1975.
15. R.D. Shannon. Acta Cryst., **A32**, 751 (1976).

FORMATION OF LUMINESCENCE BANDS OF Ce³⁺ IONS IN YAG:Ce CRYSTALS

T.I. BUTAEVA, K.L. HOVHANNESYAN, A.V. YEGANYAN

The spectral features and structural factors influencing the formation of luminescence bands of Ce³⁺ ions in YAG:Ce crystals are considered. The energy levels of the 4f shell of Ce³⁺ ions occupying both dodecahedral and octahedral sites of the crystal lattice have been determined. The participation of Ce³⁺ ions and Ce³⁺_{Al} ions in the structure of the luminescence band was shown and the multicenter structure of Ce³⁺ ions in the 4f→5d transitions of the activator was determined.

Ce³⁺ ԻՈՆՆԵՐԻ ԼՅՈՒՄԻՆԵՍԵՆՏԻՈՆ ՇԵՐՏԵՐԻ ԿԱԶՄԱՎՈՐՈՒՄԸ YAG:Ce ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ

Տ.Ի. ԲՈՒՏԱԵՎԱ, Կ.Լ. ՀՈՎՀԱՆՆԻՍՅԱՆ, Ա.Վ. ԵԳԱՆՅԱՆ

Ներկայացված աշխատանքում դիտարկված են YAG:Ce բյուրեղներում Ce³⁺ իոնների սպեկտրալ առանձնահատկությունները և կառուցվածքային գործոնները, որոնք ազդում են ակտիվատորի լյումինեսցենցիոն շերտերի կազմավորման վրա: Որոշված են Ce³⁺ իոնների 4f շերտի էլեկտրոնային մակարդակները, որոնք զբաղեցնում են բյուրեղական ցանցում ինչպես դոդեկաէդրիկ, այնպես էլ օկտաէդրիկ հանգույցները: Ցույց է տրված դոդեկաէդրիկ և օկտաէդրիկ հանգույցներում գտնվող ակտիվատորի մասնակցությունը լյումինեսցենցիոն շերտի կառուցվածքում և սահմանվել են ակտիվատորի 4f→5d անցումների բազմակենտրոն կառուցվածքը: