










XFTAP 29.17.41

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-152-3-169-187>

Ғылыми мақала

## Моделирование дефектных состояний и роли 4f-электронов в $Gd_3Ga_5O_{12}$ методами DFT

Ж.Т. Карипбаев<sup>1</sup>, З. Умар<sup>2</sup>, Г.М. Аралбаева\*<sup>1</sup>, А. Бақытқызы<sup>1</sup>, А.М. Жунусбеков<sup>1</sup>,  
К.К. Кумарбеков<sup>1</sup>, А.И. Попов<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

<sup>2</sup>Таджикский государственный педагогический университет имени С. Айни, Душанбе, Таджикистан

<sup>3</sup>Центр инновационного развития науки и новых технологий, Национальная академия наук Таджикистана, Душанбе, Таджикистан

<sup>4</sup>Институт физики твердого тела, Латвийский университет, Рига, Латвия

(E-mail: aralbayevagulnara@gmail.com)

**Аннотация.** Гадолиний-галлиевый гранат ( $Gd_3Ga_5O_{12}$ , GGG) представляет собой важный синтетический кристалл с широкой областью применения в лазерных системах, магнитооптике и радиационно-стойкой электронике. Фундаментальное понимание его электронной структуры и дефектных состояний необходимо для оптимизации оптических и функциональных свойств. Целью настоящей работы является исследование влияния различных видов дефектов и роли 4f-электронов иона  $Gd^{3+}$  на формирование зонной структуры и оптического отклика GGG в рамках современного теоретического метода – теории функционала плотности (ТФП, DFT). Квантово-механические расчёты выполнены с помощью программы VASP с использованием различных обменно-корреляционных функционалов: GGA-PBE, SCAN, mBJ и гибридного HSE06. Сравнительный анализ показал, что учёт 4f-электронов  $Gd^{3+}$  при моделировании оказывает значительное влияние на электронную структуру GGG: их включение приводит к формированию локализованных уровней как в валентной зоне, так и в зоне проводимости. Установлено, что заряженные вакансии  $[GGG]Vo^{2+}$  смещают уровень Ферми, не создавая дефектных уровней, тогда как нейтральные вакансии  $[GGG]Vo0$  формируют локализованные состояния внутри запрещённой зоны, что снижает прозрачность и ухудшает оптические характеристики кристалла.

Полученные результаты имеют фундаментальное и прикладное значение. С научной точки зрения, они уточняют роль сильно коррелированных 4f-электронов в гранатах и механизм влияния кислородных дефектов. С практической – дают основу для прогнозирования радиационной стойкости и разработки оптических материалов нового поколения. Настоящая работа вносит вклад в развитие физики дефектных состояний и теоретическое моделирование функциональных кристаллов.

**Ключевые слова:** гадолиний-галлиевый гранат, DFT, 4f-электроны, зонная структура, кислородные вакансии, плотность состояний, оптические свойства

Поступила 11.09.2025. После доработки 22.09.2025. Принята к печати 23.09.2025. Доступно онлайн 30.09.2025.

<sup>1\*</sup>автор для корреспонденции

## Введение

Гадолиний-галлиевый гранат ( $Gd_3Ga_5O_{12}$ , GGG) является одним из наиболее востребованных синтетических кристаллов, который находит широкое применение в лазерной физике, оптоэлектронике, магнитооптике и радиационно-стойкой электронике. Он широко применяется в лазерных системах, микроволновой электронике, магнитооптических устройствах, а также служит подложкой для эпитаксиального роста тонких пленок, таких как иттрий-железный гранат (YIG) и другие функциональные материалы [1, 2]. Кроме того, кристаллы GGG и YAG ( $Y_3Al_5O_{12}$ ) представляют значительный интерес в качестве детекторных материалов, используемых в ядерных исследованиях и медицинских технологиях [3-6]. Исследование их кристаллической и электронной структуры, а также свойств дефектов является важным шагом для оптимизации эксплуатационных характеристик и разработки новых оптоэлектронных технологий на основе GGG. Можно отметить, что наличие сильно коррелированных 4f-электронов в структуре GGG обуславливает его уникальные свойства.

Подробный анализ научной литературы показывает, что, несмотря на активные исследования в последнее время, вопросы, связанные с корректным описанием влияния 4f-электронов и дефектных состояний на электронную структуру и оптические характеристики GGG, остаются нерешенными. Известно, что теоретические исследования на основе теории функционала плотности (ТФП/DFT) подтверждают экспериментальные данные и дополняют их за счёт получения параметров, недоступных для прямого измерения в эксперименте. Расчёты показывают, что GGG является широкозонным диэлектриком с шириной запрещённой зоны  $E_g \approx 5,66 \pm 0,01$  эВ [8], что объясняет высокую прозрачность этого материала в диапазоне длин волн 0,4-7,0 мкм. С другой стороны, известны что моделирование в рамках стандартного функционала LDA (Local density approximation – приближение локальной плотности) сильно недооценивает значение  $E_g$  (3,02 эВ) по сравнению с экспериментальным значением (5,66 эВ), что является следствием известной проблемы ТПФ при описании широкозонных полупроводников и диэлектриков. Для решения проблем, связанных с расчётом ширины запрещённой зоны, в современных теоретических исследованиях используются различные функционалы, такие как GGA-PBE, PBEsol, mBJ (модифицированный потенциал Бекке-Джонсона), SCAN, гибридные функционалы (HSE06), а также расчёты с учетом поправки Хаббарда (GGA+U), позволяющие учесть сильную корреляцию d- и f-электронов в системе [9].

Особое значение при эксплуатации GGG в условиях интенсивных радиационных полей имеет моделирование кислородных и катион-анионные антисайтные дефекты и связанных с ними F- и F<sup>+</sup>-центров. Именно локальная динамика F- и F<sup>+</sup>-центров во многом определяет деградацию оптических свойств в условиях экстремальных радиационных нагрузок, поэтому их моделирование имеет критически важное значение для разработки радиационно-стойких материалов. С этой точки зрения, актуальность настоящей темы исследования состоит в следующем. Во-первых, интенсивное развитие лазерных технологий и создание новых типов твердотельных генераторов требуют материалов с прогнозируемыми и контролируемыми оптическими параметрами.

Во-вторых, использование GGG в качестве подложек для эпитаксиального роста и в элементах интегральной оптики обуславливает необходимость понимания дефектной природы подобных кристаллов. В-третьих, возросший интерес к радиационно-стойким материалам в связи с развитием космических технологий делает особенно важным изучение того, как кислородные вакансии и связанные с ними дефекты влияют на стабильность и прозрачность GGG. Существующие экспериментальные исследования, хотя и внесли значительный вклад в понимание свойств гранатов, но существуют следующие недостатки с наших взглядов. Во-первых, локальные состояния 4f-электронов  $Gd^{3+}$  слабо поддаются прямому экспериментальному наблюдению, что приводит к неоднозначным трактовкам полученных данных. Во-вторых, контроль и количественное определение дефектов, таких как кислородные вакансии и катион-анионные антисайты, представляют собой сложную задачу, в свою очередь требующую привлечения теоретических методов моделирования. В связи с этим, имеет очень важную роль вычислительные подходы, в первую очередь методов на основе теории функционала плотности (DFT), которые в том числе позволяют моделировать электронную структуру с учётом локализации 4f-электронов и влияния различных дефектов.

Объектом исследования в данной работе является оксид гадолиний-галлиевый гранат, а предмет исследования – электронная структура и дефектные состояния в структуре GGG.

Цель исследования заключается в теоретическом моделировании влияния 4f-электронов и дефектов на электронную структуру и оптические свойства GGG.

Для достижения поставленной цели, в рамках настоящей работы выполняются следующие шаги:

- Провести квантово-механические расчёты геометрической и электронной структуры GGG для каждого исследуемого объекта в отдельности;
- Сравнить плотности электронных состояний с учётом и без учёта 4f-электронов иона  $Gd^{3+}$  для выявления их вклада в формирование зонной структуры;
- Исследовать влияние заряженных и нейтральных F- и  $F^+$ -центров дефектов на положение уровня Ферми и возможное появление локализованных уровней в запрещённой зоне;
- Установить взаимосвязь между дефектными состояниями и изменением оптических свойств GGG.

Методологической основой работы является теория функционала плотности (DFT), реализованная в пакет-программе VASP, который в последние годы стал широко используемым инструментом в области теоретического материаловедения. Гипотеза исследования заключается в том, что именно учёт локализованных 4f-электронов и моделирование с учетом дефектов являются ключевыми условиями для адекватного описания экспериментально наблюдаемых оптических свойств GGG. Ожидается, что нейтральные вакансии будут формировать дефектные уровни в запрещённой зоне, снижая прозрачность кристалла, тогда как заряженные вакансии приведут к смещению уровня Ферми без значительного ухудшения оптических характеристик.

Теоретическая значимость работы состоит в уточнении механизмов формирования зонной структуры и роли дефектных состояний в электронной структуре GGG, что

вносит вклад в развитие фундаментальной физики кристаллов с f-сильно коррелированными электронами. Практическая значимость заключается в создании основы для прогнозирования и улучшения характеристик кристаллов, используемых в лазерных и магнитооптических устройствах, а также в перспективных радиационно-стойких системах.

Таким образом, данная работа направлена на восполнение пробела в понимании электронной структуры GGG и её изменения под действием дефектов, что имеет как научную, так и прикладную ценность.

## Методология

Квантово-механические расчёты из первых принципов были выполнены с использованием пакет-программы VASP [10], основанного на теории функционала плотности (DFT) и методе проекционных присоединённых волн (PAW) [11].

Оптимизация геометрической структуры «чистого» GGG проводилась с использованием GGA-PBE [12] и SCAN [13] функционалов. Электронная структура рассчитывалась с применением GGA-PBE, mBJ, SCAN и гибридного функционала Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE06), SCAN – оптимизированный файл структуры использовались при mBJ и HSE06 расчетов электронной структуры. Энергия отсечки плоской волны была выбрана равной 520 эВ. Оптимизация позиций атомов была выполнена методом сопряженных градиентов с критерием сходимости 0,01 эВ/А, а условием сходимости для самосогласованных расчетов был инвариант полной энергии системы с точностью  $10^{-6}$  эВ. Зоны Бриллюэна были построены с использованием сеток Монкхорста-Пака [14-16], включая сетки  $2 \times 2 \times 2$  k-точек с центром в точке Гамма, для кубических элементарных ячеек GGG.

Для получения более точных результатов, особое внимание было уделено влиянию 4f-электронов на электронную структуру GGG. В расчетах применялись два типа стандартных PAW-потенциалов: в первый случай, выбрали в качестве валентных электронов  $5p^6 5d^1 6s^2$  электроны, т.е. без включения 4f-электронов атома  $Gd^{3+}$ , во второй случай, PAW-потенциал включает  $4f^7 5s^2 5p^6 5d^1 6s^2$  электронов в качестве валентных электронов. Такой подход позволяет выявить различия в плотности электронных состояний GGG.

С учетом того, что электронная конфигурация иона  $Gd^{3+}$  в структуре GGG включает сильно коррелированные как 4f-, так и 5d-электроны, моделирование проводилось в рамках метода DFT с учетом поправки Хаббарда (GGA+U). Были рассмотрены две модели. В первой модели использовался PAW-потенциал, в котором 4f-электроны не включены в число валентных (то есть находятся в острове). В этом случае поправка Хаббарда U применялась к 5d-орбиталям атома  $Gd^{3+}$ . Во второй модели в котором применялся PAW-потенциал с 4f-электроны в валентную зону, поправка Хаббарда U использовалась для 4f-орбиталей. Такой подход успешно применялся ранее для изучения электронных и магнитных свойств соединений типа  $XF_3$  [17]. Значения параметра U были выбраны произвольно, а также с учетом рекомендации [17], для первого подхода (GGA+U для

5d-орбиталей)  $U = 2$  эВ, а для второго подхода (GGA+U для 4f-орбиталей)  $U = 5,7$  эВ. Моделирование кислородных вакансий проводилось для двух случаев: заряженных  $[Vo]^{2+}$  и нейтральных  $[Vo]^0$  дефектов в рамках метода GGA-PBE.

Таким образом, методология исследования сочетает в себе оптимизацию кристаллической структуры, расчёт электронной плотности состояний и зонной структуры с учётом и без учёта 4f-электронов, а также моделирование кислородных дефектов в разных зарядовых состояниях, что обеспечивает комплексное описание электронных и оптических свойств гадолиний-галлиевого граната.

## Результаты и Обсуждение

Как выше отметили, объектом исследования данной работы является кристалл гадолиний-галлиевого граната (GGG), кристаллизующийся в кубической сингонии (пространственная группа Ia-3d, №230) и относящийся к структурному типу граната. Его элементарная ячейка содержит 160 атомов, что эквивалентно восьми формульным единицам GGG. Кристаллическая структура GGG характеризуется следующим распределением катионов: ионы  $Gd^{3+}$  занимают додекаэдрические позиции 24c (координационное число 8), а ионы  $Ga^{3+}$  распределены между октаэдрическими позициями 16a (КЧ = 6) и тетраэдрическими позициями 24d (КЧ = 4). Анионы кислорода, расположенные в позициях 96h, формируют трёхмерный каркас, соединяющий катионные подрешётки. Каждый атом кислорода координирован одним катионом  $Gd^{3+}$  и двумя катионами  $Ga^{3+}$ , что обуславливает формирование жёсткой и сложной оксидной структуры [7]. Визуализация элементарной ячейки GGG представлена на рис. 1.

Поскольку известно, что стандартное приближение локальной плотности (LDA) часто совпадает с экспериментальными геометрическими данными, с этой точки зрения геометрическая оптимизация GGG были проведены с использованием более совершенные функционалы: GGA-PBE и SCAN.

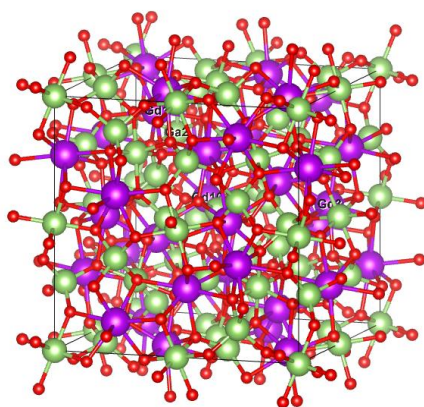


Рисунок 1. Кристаллическая структура GGG

Параметры решётки и длины связей Gd-O и Ga-O, оптимизированные с помощью функционалов GGA-PBE и SCAN, приведены в таблице 1. Расчётное значение длины

додекаэдрической связи Gd-O, полученное методом GGA-PBE, на 14,8% превышает длину октаэдрической связи Ga-O и на 21.2% – длину тетраэдрической связи Ga-O. Оптимизированный параметр решётки для GGA-PBE оказался на 0,91% больше экспериментального значения, в то время как для SCAN он на 0,32% меньше. В таблице 1 также представлены рассчитанные методом GGA-PBE параметры решётки и длины связей Gd-O и Ga-O для структур с дефектными по кислороду состояниями.

Экспериментальные данные, полученные методами рентгеновской и нейтронной дифракции, дают значение постоянной решётки  $a = 12.383 \text{ \AA}$  и выявляют анизотропию в геометрии координационных полиэдров. Для додекаэдра  $\text{GdO}_8$  наблюдаются два набора длин связей Gd-O:  $2.38 \text{ \AA}$  и  $2.52 \text{ \AA}$ . Октаэдры  $\text{GaO}_6$  характеризуются длиной связи  $2.03 \text{ \AA}$ , а в тетраэдрах  $\text{GaO}_4$  длина связи Ga-O сокращается до  $\sim 1.87 \text{ \AA}$ . Ключевую роль в исследовании сыграла нейтронография, позволившая точно определить позиции лёгких атомов кислорода и изучить магнитную структуру кристалла.

**Таблица 1. Сравнение рассчитанных и экспериментальных параметров решетки и длин межионных связей чистого GGG и GGG с дефектными состояниями [0]**

Система	Параметр решетки и длина связи, $\text{\AA}$	Расчитанные		Эксп.
		GGA	SCAN	
$\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$	a	12.482	12.329	12.383
	Gd-O	2.377 2.478	2.449 2.355	2.38 2.52
	Ga-O x6	2.024	1.994	2.03
	Ga-O x4	1.873	1.849	1.87
$[\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}]\text{Vo}^{2+}$	a	12.509, 12.537, 12.515		
	Gd-O	2.472, 2.378, 2.381		
	Ga-O x6	2.024 2.031 2.027		
	Ga-O x4	1.892 1.891 1.892 1.892		
	a	12.565 12.593 12.574		
	Gd-O	2.391, 2.530, 2.371		

[Gd <sub>3</sub> Ga <sub>5</sub> O <sub>12</sub> ]Vo <sup>0</sup>	Ga-O x6	2.036 2.042 2.052		
	Ga-O x4	1.902 1.903 1.903 1.899		

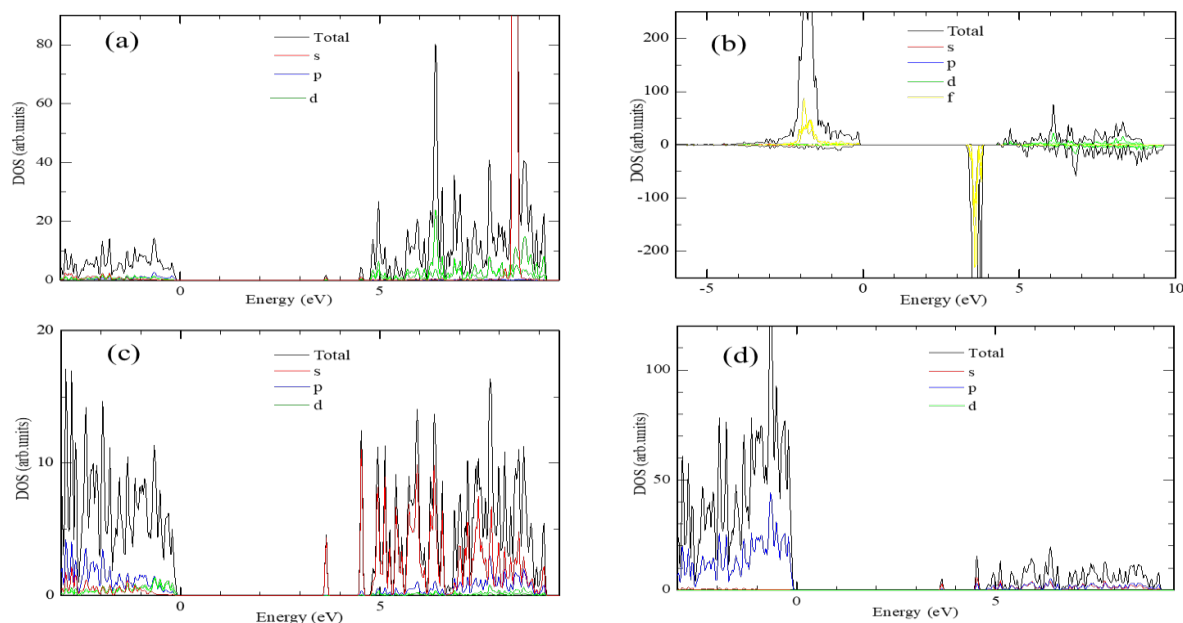
В Таблице 2 представлены результаты вычисления ширины запрещенной зоны GGG, полученные в рамках различных обменно-корреляционных функционалов. Проведенное вычисления демонстрирует сильную зависимость предсказанного значения ширины щели от выбранного метода расчета. Согласно нашим результатам: GGA-PBE дает сильно заниженное значение – примерно 3.8 эВ, что является известным систематическим недостатком этого функционала, SCAN существенно улучшает результат, повышая расчетное значение до ~4.6 эВ. Метод mBJ (модифицированный потенциал Беке-Джонсона) предсказывает значение, наиболее близкое к экспериментальным данным – ~6.0 эВ. Гибридный функционал HSE06 в данном случае дает результат (~4.53 эВ), сопоставимый с meta-GGA функционалом SCAN, что хуже ожиданий от гибридных подходов в данном случае. Сравнение с экспериментальными данными показывает, что наиболее адекватное описание обеспечивает функционал mBJ. В то же время, стандартный GGA-PBE сильно недооценивает ширину запрещенной зоны, а результаты HSE06 и SCAN занимают промежуточное положение, но все еще занижают экспериментальное значение. Эти результаты согласуются с существующей литературой, где отмечалось, что для корректного описания электронных свойств диэлектриков и широкозонных полупроводников необходимы более сложные подходы, такие как модифицированные потенциалы (mBJ) или гибридные функционалы, которые позволяют значительно улучшить согласие значения ширины запрещенной зоны с экспериментом по сравнению со стандартными методами LDA и GGA. Надо отметить, что в рамках настоящей работы, ширина запрещенной зоны вычислены только для первого модели, т. е. с PAW – потенциал с отсутствием f-валентных электронов.

**Таблица 2. Сравнение рассчитанных и экспериментальной ширины запрещенной зоны GGG. Все значения указаны в эВ.**

Системы	Вычисления				Эксп.
	GGA	SCAN	mBJ	HSE06	
Gd <sub>3</sub> Ga <sub>5</sub> O <sub>12</sub>	3.764	4.561	5.986	4.531	5.66 [8]

На рис. 2 представлены графики парциальной плотности электронных состояний кристаллического GGG. Парциальная плотности электронных состояний для атома Gd приведена для двух случаев: с учётом и без учёта 4f-электронов (рис. 2а и 2б, соответственно). Анализ парциальных плотностей состояний показывает, что

валентная зона в основном формируется 2p-орбиталями кислорода (O), в то время как значительный вклад в зону проводимости вносят s-состояния галлия (Ga) и d-состояния гадолиния (Gd). Также в зоне проводимости присутствует незначительный вклад от p- и d-состояний атома Ga и s-состояний атома Gd, что свидетельствует о гибридизации между их орбиталями. С оптической точки зрения такая структура зон означает, что фундаментальный оптический переход при поглощении света представляет собой перенос заряда от O 2p- к Ga/Gd 5d-состояниям (что соответствует широкой полосе межзонного поглощения). Узкие 4f-уровни Gd, однако, не участвуют в этом переходе напрямую, поскольку подуровень  $4f^7$  является заполненным, а прямые оптические переходы на нём электрически дипольно-запрещены. Тем не менее, эти уровни могут проявляться в виде внутрицентровых f-f переходов, характерных для редкоземельных ионов, и оказывает косвенное влияние на оптические свойства. Таким образом, анализ парциальной плотности электронных состояний позволяет чётко распределить роли каждой элементов в формирование общей плотности состояний: кислород определяет валентную зону, галлий и гадолиний – зону проводимости, а также имеют незначительный вклад в формирование валентной зоне. Наличие гадолиния в структуре GGA добавляет локализованные 4f-состояния, корректный учёт которых необходим для адекватного описания электронной структуры.

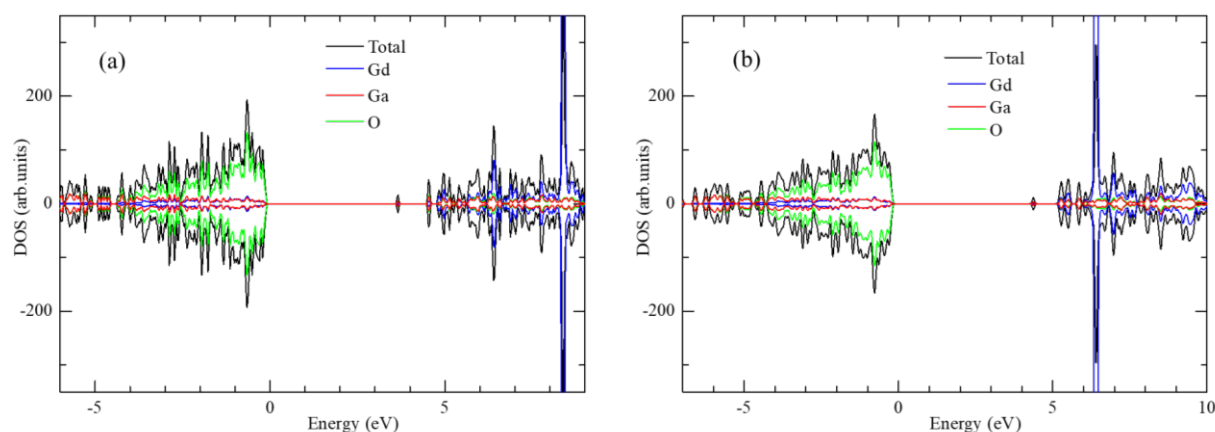


**Рисунок 2. Парциальная плотность состояний (PDOS) GGG, рассчитанная в рамках метода GGA-PBE: (a) Gd, (b) Gd с учетом f-электроны, (c) Ga и (d) O**

На рис. 3 представлены графики полной плотности электронных состояний (ППС) кристалла GGG, рассчитанные в рамках функционалов GGA-PBE (a) и SCAN (b) для PAW-потенциала, не включающего f-электроны. Видно, что общая картина ППС, полученная обоими методами (GGA-PBE и SCAN), качественно сохраняется: вклад атомов в зону



проводимости и валентную зону остаётся практически неизменным. Основные изменения наблюдаются лишь в области ширины запрещённой зоны. В связи с этим, учитывая, что отличия проявляются преимущественно в величине запрещённой зоны, мы сочли возможным не приводить полные графики ППС, рассчитанные с использованием функционалов mBJ, HSE06 и GGA+U, а ограничиться представлением соответствующих численных значений в таблице 2.



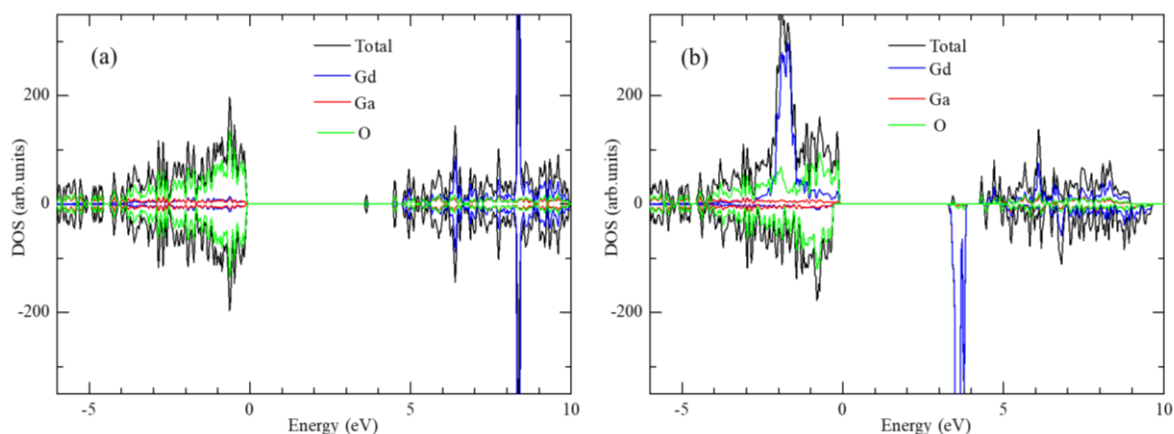
**Рисунок 3. Общая плотность состояний (TDOS) GGG, рассчитанная в рамках метода (a) GGA-PBE и (b) SCAN методов**

Полная и парциальная плотности состояний (DOS и PDOS) взаимно дополняют друг друга в понимании электронного строения GGG. Полная DOS (рис. 3, 4) показывает суммарное распределение электронных состояний по энергиям, в то время как PDOS (рис. 2) раскрывает вклад каждого химического элемента и их отдельных орбиталей. Для стехиометрического GGG характерно, что верх валентной зоны формируется в основном 2p-орбиталями кислорода, тогда как дно зоны проводимости образовано состояниями катионов – прежде всего d- и s-орбиталями ионов  $Ga^{3+}$  и  $Gd^{3+}$ . На рис. 4 для наглядного сравнения представлены рассчитанные методом GGA кривые полной плотности электронных состояний GGG для моделей с учётом и без учёта f-электронов гадолиния. На спектре DOS с учётом 4f-электронов чётко видны узкие пики, соответствующие состояниям со спином вверх и спином вниз, которые отделены от основного континуума зон. В расчётах GGA пик 4f-состояний со спин-вниз расположен вблизи границы запрещённой зоны или внутри неё, в то время как пик 4f-состояний со спин-вверх находится внутри валентной зоны.

Видно, что учет 4f-электронов иона  $Gd^{3+}$  оказывает существенное влияние на распределение плотности состояний (DOS) кристалла GGG. В составе GGG гадолиний имеет семь 4f-электронов (ион  $Gd^{3+}$  с электронной конфигурацией  $[Xe]4f^7$ ), которые в расчётах в рамках функционала GGA-PBE (без учёта параметра U) проявляются в виде узких локализованных состояний. При включении f-орбиталей в расчёт эти 4f-состояния  $Gd^{3+}$  явно проявляются в валентной зоне, формируя острые пики на спектре DOS вблизи

её верхней границы. Подобные локализованные уровни снижают эффективную ширину запрещённой зоны. Например, в расчёте по схеме GGA появление наполовину заполненной 4f-зоны  $Gd^{3+}$  приводит к её сужению. Напротив, при исключении f-электронов из расчёта (то есть когда оболочка  $4f^7$  рассматривается как часть остовных состояний иона  $Gd^{3+}$  и не участвует в валентных взаимодействиях) электронная структура существенно упрощается: основные валентные состояния формируются 5p-, 5d- и 6s-орбиталями  $Gd^{3+}$ . В этом случае на спектре полной DOS отсутствуют узкие 4f-пики, а минимальная энергия зоны проводимости определяется состояниями 5d-орбиталей Ga и Gd, расположенных выше по энергии. В результате вычисляемое значение ширины запрещённой зоны оказывается завышенным.

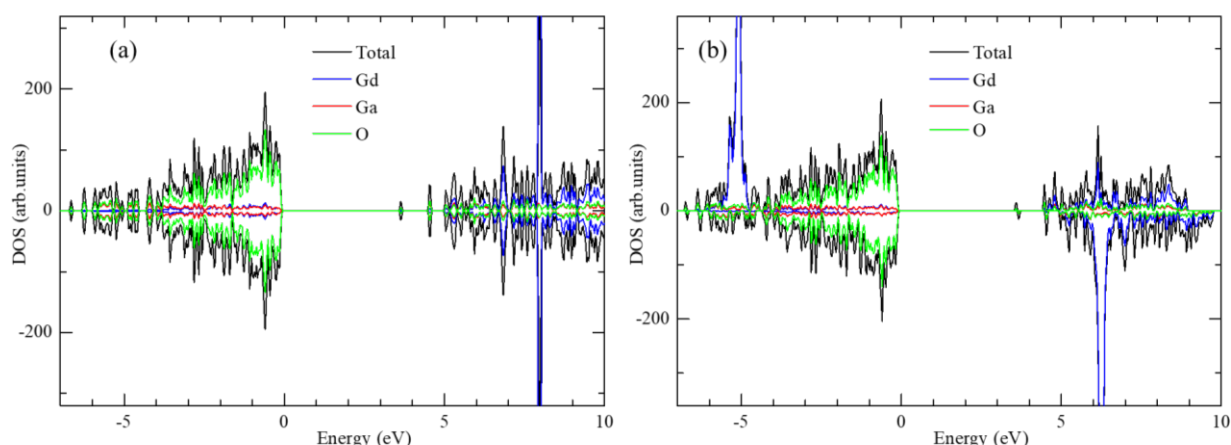
Иными словами, исключение 4f-электронов позволяет моделировать GGG как гранат с непересекающимися зонами, аналогичный  $Y_3Ga_5O_{12}$  (YGG), не содержащему внутренних f-уровней гадолиния. Таким образом, включение f-электронов  $Gd^{3+}$  без применения специальных поправок (типа +U) приводит к сужению теоретической ширины запрещённой зоны и появлению в DOS локализованных уровней, в то время как их исключение искусственно расширяет запрещённую зону, полностью устраняя влияние узких f-полос. В реальном кристалле 4f-уровни  $Gd^{3+}$ , будучи сильно локализованными, располагаются в области запрещённой зоны или вблизи её границ и слабо гибридизуются с широкими зонными состояниями кристаллической решётки.



**Рисунок 4.** Полная плотность состояний (DOS) GGG без учёта (a) и с учёта (b) f-электронов атома  $Gd^{3+}$  в рамках GGA-PBE расчётов

Однако особенности электронной структуры GGG в значительной степени определяются присутствием локализованных 4f-электронов ионов  $Gd^{3+}$  и возможных дефектов. При этом в рамках стандартных DFT-аппроксимаций (LDA/GGA) возникают трудности с описанием сильно коррелированных d- и f-электронов. Поэтому для моделирования таких систем обычно применяют метод GGA+U, позволяющий учесть электронные корреляции. Как было отмечено выше в разделе методологии, поправка Хаббарда U применялась в наших расчётах в двух вариантах. В первой модели, где 4f-электроны ионов  $Gd^{3+}$  не рассматривались как валентные, параметр U применялся

к 5d-электронам  $Gd^{3+}$ . Во второй модели параметр U учитывался непосредственно для 4f-электронов ионов  $Gd^{3+}$ . На рис. 5 представлены картины полной плотности состояний (ППС) GGG, рассчитанные в рамках метода GGA+U. Спектры плотности состояний с учётом параметра Хаббарда -U для первой модели (рис. 5a) остаются практически неизменными по сравнению с ППС, полученной в рамках GGA (рис. 4a). Однако наблюдается сильное влияние параметра U в расчётах с учётом 4f-электронов ионов  $Gd^{3+}$  (рис. 5(b)): 4f-пики существенно меняют своё положение. Спин-поляризованный пик с направлением спин-вверх смещается в нижнюю часть валентной зоны, а пик с направлением спин-вниз смещается в верхнюю часть зоны проводимости, занимая положение в её середине.



**Рисунок 5. Полная плотность состояний (DOS) GGG в рамках GGA+U расчетов.**

**(a) без учёта f-электронов, параметр U равно 2 эВ для d-электронов иона  $Gd^{3+}$  и с учётом (b) f-электронов иона  $Gd^{3+}$  параметр U равно 6 эВ для 4f-электронов**

Влияние кислородные вакансии на электронную структуру GGG, что представлены на рис. 6 для  $[GGG]Vo^{2+}$  и на рис. 7. для  $[GGG]Vo_0$ . Удаление иона  $O^{2-}$  из кристаллической решётки создаёт дефект, способный существовать в различных зарядовых состояниях. В частности, сравниваются случаи  $[GGG]Vo^{2+}$  и  $[GGG]Vo^0$ , соответствующие разным сценариям компенсации двух электронов, отсутствующих после удаления кислородного иона. В состоянии  $[GGG]Vo^{2+}$  (двойной положительный заряд дефекта) предполагается, что оба электрона, ранее связанные с удалённым атомом кислорода, покинули область дефекта – либо перешли в зону проводимости, либо были компенсированы положительным фоном. Такая заряженная вакансия (аналог  $F^{2+}$ -центра) не содержит связанных электронов и выступает в качестве донорного дефекта. В рассчитанной плотности состояний (DOS) для  $[GGG]Vo^{2+}$  не появляется заполненных состояний внутри запрещённой зоны – её ширина по-прежнему определяется расстоянием от максимума валентной зоны до дна зоны проводимости. Однако сама зона проводимости может оказаться частично заполненной due to donated electrons.

При наличии дефекта  $[GGG]Vo^{2+}$  полная плотность состояний практически совпадает с DOS чистого GGG в области валентной зоны, однако вблизи дна зоны проводимости

появляются новые незанятые уровни, ассоциированные с вакансией. Эти уровни могут располагаться несколько ниже нижней границы зоны проводимости чистого кристалла. С оптической точки зрения такой дефект создаёт потенциально разрешённые переходы из валентной зоны на уровень вакансии, что эффективно сокращает оптическую ширину запрещённой зоны. Однако, поскольку в состоянии  $[GGG]Vo^{2+}$  сам дефект не содержит электронов, прямая абсорбция за счёт  $F^{2+}$ -центра отсутствует до тех пор, пока фотон не вызовет переход электрона из валентной зоны на этот уровень. В целом, влияние  $[GGG]Vo^{2+}$  на оптические свойства проявляется слабо – основной эффект сводится к незначительному снижению прозрачности в коротковолновой УФ-области и появлению слабоинтенсивных примесных полос поглощения.

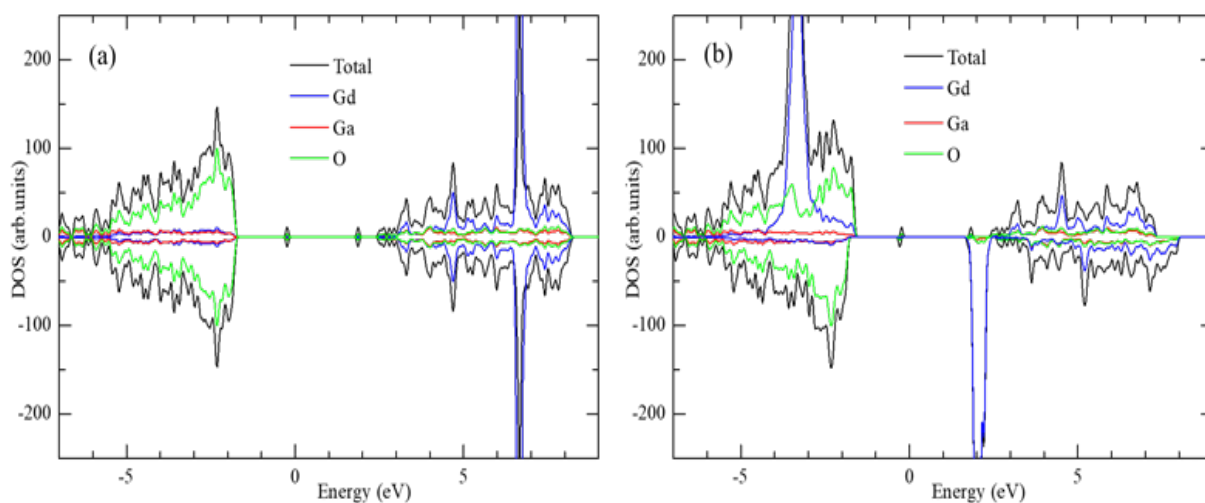


Рисунок 6. Полная плотность состояний (DOS) GGG с кислородными вакансиями  $[GGG]Vo^{2+}$ , рассчитанная в рамках метода GGA-PBE: (a) без учёта и (b) с учёта f-электронов иона  $Gd^{3+}$

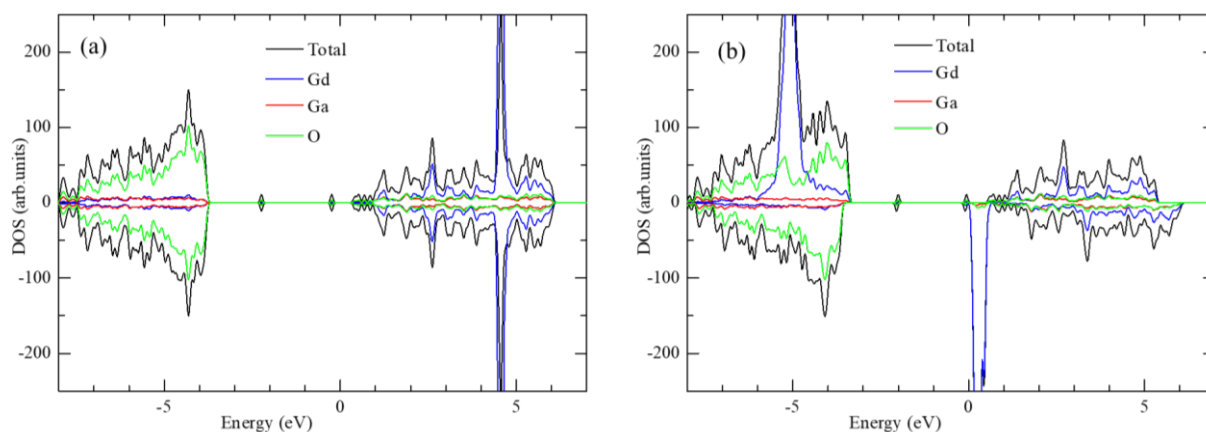


Рисунок 7. Полная плотность состояний (DOS) GGG с кислородными вакансиями  $[GGG]Vo_0$ , рассчитанная в рамках метода GGA-PBE: (a) без учёта и (b) с учётом f-электронов иона  $Gd^{2+}$

Важно отметить, что учёт f-электронов Gd при наличии дефекта тоже вносит нюансы. Когда в расчётах  $[GGG]Vo^0$  учитываются 4f-орбитали  $Gd^{3+}$ , возникает возможность частичной локализации дефектных электронов на ближайших  $Gd^{3+}$  (например, переход  $Gd^{3+}$  в  $Gd^{2+}$  с заполнением дополнительного 4f-уровня). В полном DOS такой перенос заряда может слегка изменять положение и форму дефектного пика. Если же f-электроны искусственно исключены, модель не позволяет электрону дефекта занять 4f-оболочку Gd, и он остаётся распределённым в основном по окрестным Ga-орбиталям или в полости вакансии. Согласно рис. 6 и 7, разница между случаями с и без f-электронов проявляется в деталях: при учёте 4f уровни дефекта могут быть несколько более локализованы и смещены, тогда как без 4f они ближе напоминают проводимостные состояния Ga.

В целом проведённые расчёты показали, что гадолиний-галлиевый гранат является широкозонным диэлектриком с преобладающим ионно-ковалентным характером связей. Основные электронные переходы связаны с переносом заряда  $O-2p \rightarrow Ga/Gd-5d$ , а присутствие 4f-уровней гадолиния определяет специфику спектральных свойств. Правильное включение 4f-электронов в расчёт дефектных структур даёт более реалистичную картину перераспределения плотности: это важно для понимания, как вакансии может захватывать электрон на Gd или оставлять его в полости. В контексте оптических свойств разница может означать разные энергоположения F-центровых полос: с учётом f-электронов они могут сместиться, отражая взаимодействие дефектного электрона с 4f-оболочкой Gd. Кислородные вакансии существенно влияют на электронную структуру, создавая новые уровни в запрещённой зоне и снижая прозрачность материала, что необходимо учитывать при практическом использовании GGG в лазерной и радиационно-стойкой оптике.

## Заключение

В данной работе выполнено детальное моделирование электронной структуры гадолиний-галлиевого граната (GGG) методом теории функционала плотности (DFT) с использованием функционалов GGA-PBE, SCAN, mBJ и HSE06. Проведённый анализ показал, что учёт 4f-электронов атома Gd существенно влияет на распределение плотности состояний: включение этих электронов приводит к появлению локализованных уровней у края валентной зоны и снижает рассчитанную ширину запрещённой зоны, в то время как их исключение упрощает электронный спектр, увеличивает ширину щели, но снижает точность описания локализованных состояний.

Исследование влияния кислородных вакансий показало их значительное воздействие на электронные и оптические свойства GGG. Заряженные вакансии  $[GGG]Vo^{2+}$  не формируют заполненных уровней в запрещённой зоне и лишь смещают уровень Ферми в сторону зоны проводимости, тогда как нейтральные вакансии  $[GGG]Vo^0$  создают локализованные состояния внутри запрещённой зоны и уменьшают её, что приводит к снижению прозрачности кристалла.

Таким образом, полученные результаты подтверждают ключевую роль 4f-электронов  $Gd^{3+}$  и дефектов кислорода в формировании электронной структуры и оптических характеристик GGG. Работа вносит вклад в понимание корреляционных эффектов и влияния вакансий кислорода в редкоземельных гранатах и открывает возможности

для дальнейших исследований по точному моделированию оптических свойств и дефектной химии подобных материалов. Заряженные дефекты  $[GGG]Vo^{2+}$  не формируют заполненных уровней в запрещенной зоне и лишь смещают уровень Ферми к зоне проводимости, тогда как нейтральные вакансии  $[GGG]Vo^0$  создают локализованные состояния внутри запрещенной зоны и уменьшают её.

### Благодарность

Данное исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP19680626)

### Вклад авторов

**Ж.Т. Карипбаев** – разработка концепции исследования, постановка целей и задач работы, контроль выполнения всех этапов моделирования и анализа результатов, участие в написании введения и заключения.

**З. Умар** – сбор и систематизация литературных источников, подготовка материалов для методологии, критический пересмотр текста статьи.

**Г.М. Аралбаева** – анализ литературных источников, написание разделов «Введение», «Результаты и обсуждение», «Заключение», интерпретация полученных данных.

**А.Б. Бақытқызы** – подготовка графиков, схем и рисунков, оформление таблиц, участие в анализе результатов моделирования.

**А.М. Жунусбеков** – выполнение расчетов, обработка данных DFT, проверка корректности расчетных параметров.

**К.К. Кумарбеков** – анализ электронных структур и плотности состояний, обсуждение влияния 4f-электронов и дефектов, подготовка раздела «Результаты и обсуждение».

**А.И. Попов** – участие в интерпретации данных, подготовка и редактирование текста статьи, утверждение окончательной версии статьи, обеспечение достоверности всех частей работы.

### Список литературы

1. D.F. O'Kane, R.J. Kennedy, D.M. DeMeo, W.S. Eames, Electrical properties of gadolinium gallium garnet, J. Electrochem. Soc. 120, 1272–1278 (1973).
2. O.A. Petrenko, C. Ritter, M. Yethiraj, D. McK. Paul, Spin-liquid behavior of the gadolinium gallium garnet, Physica B 241–243, 727–729 (1998), [https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(97\)00705-9](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(97)00705-9)
3. A.M. Zhunusbekov, Z.T. Karipbayev, A. Tulegenova, K.K. Kumarbekov, E.E. Nurmoldin, M.M. Baizhumanov, A. Kotlov, A.I. Popov, Comparative VUV Synchrotron Excitation Study of YAG:Eu and YAG:Cr Ceramics, Crystals 14, 897 (2024).
4. Z.T. Karipbayev, V.M. Lisitsyn, M.G. Golkovski, Z.S. Zhilgildinov, A.I. Popov, A.M. Zhunusbekov, E. Polisadova, A. Tulegenova, D.A. Mussakhanov, G. Alpyssova et al., Electron Beam-Assisted Synthesis of YAG:Ce Ceramics, Materials 16, 4102 (2023).
5. K.K. Kumarbekov, Z.S. Zhilgildinov, Z.T. Karipbayev, A.M. Zhunusbekov, E.E. Nurmoldin, M.G. Brik, Y. Suchikova, M. Kemere, A.I. Popov, M.T. Kassymzhanov, A novel method of preparation of  $Y_3Al_5O_{12}:Cr^{3+}$  ceramics and its structural and optical characterization, Optical Materials 159, 116535 (2025).

6. G.M. Aralbayeva, I. Manika, Z. Karipbayev, Y. Suchikova, S. Kovachov, D. Sugak, A.I. Popov, Micromechanical properties of  $Gd_3Ga_5O_{12}$  crystals irradiated with swift heavy ions, *Journal of Nano- and Electronic Physics* 15(5), 05020 (2023).
7. P.P. Deen, O. Florea, E. Lhotel, H. Jacobsen, Updating the phase diagram of the archetypal frustrated magnet  $Gd_3Ga_5O_{12}$ , *Phys. Rev. B* 91(1), 014419 (2015), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.014419>
8. K. Ghimire, H.F. Haneef, R.W. Collins, N. Podraza, Optical properties of single-crystal  $Gd_3Ga_5O_{12}$  from the infrared to ultraviolet, *Physica Status Solidi B* 252(10), 2191–2198 (2015).
9. C. Freysoldt, B. Grabowski, T. Hickel, J. Neugebauer, G. Kresse, A. Janotti, C.G. Van de Walle, First-principles calculations for point defects in solids, *Rev. Mod. Phys.* 86(1), 253–305 (2014).
10. P.E. Blöchl, Projector augmented-wave method, *Phys. Rev. B* 50(24), 17953–17979 (1994), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.17953>
11. L. Wang, T. Maxisch, G. Ceder, Oxidation energies of transition metal oxides within the GGA+U framework, *Phys. Rev. B* 73(19), 195107 (2006), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.195107>
12. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, *Phys. Rev. Lett.* 77(18), 3865–3868 (1996), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
13. J. Sun, A. Ruzsinszky, J.P. Perdew, Strongly constrained and appropriately normed semilocal density functional, *Phys. Rev. Lett.* 115(3), 036402 (2015), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.036402>
14. H.J. Monkhorst, J.D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B* 13(12), 5188–5192 (1976), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
15. C. Freysoldt, B. Grabowski, T. Hickel, J. Neugebauer, G. Kresse, A. Janotti, C.G. Van de Walle, First-principles calculations for point defects in solids, *Rev. Mod. Phys.* 86(1), 253–305 (2014), <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.86.253>
16. Z. Umar, O. Khyzhun, T. Yamamoto, P. Brągiel, Optical and electronic properties of novel oxide materials, *Optical Materials* 149, 115057 (2024), <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2023.115057>
17. R. M. Burganova, Z. Umar, O. V. Nedopekin, I. V. Chepkasov, I. I. Piyanzina. Complex investigation of  $XF_3$  (X = Gd, Tb, Dy, Ho and Er) fluorides under pressure: An ab-initio perspective. *Computational Materials Science*, V. 246, (2025), 113428, <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2024.113428>
18. F.Z. Jarý, J. P. Boháček, Z. Umar, M Piasecki, et al. A fast GGAG: Ce (Mg) single crystal scintillator: LDFZM growth, characterization and electronic band structure calculation. *Materials Advances* 6 (2), (2025), pp. 777-787, DOI: 10.1039/D4MA00976B



Ж.Т. Карипбаев<sup>1</sup>, З. Умар<sup>2,3</sup>, Г.М.Аралбаева<sup>\*1</sup>,

А. Бақытқызы<sup>1</sup>, А.М. Жунусбеков<sup>1</sup>, К.К. Кумарбеков<sup>1</sup>, А.И. Попов<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

<sup>2</sup>Тәжікстан мемлекеттік педагогикалық университеті им. С. Айни, Душанбе, Тәжікстан

<sup>3</sup>Ғылым мен жаңа технологияларды инновациялық дамыту орталығы, Тәжікстан Ұлттық ғылым академиясы, Душанбе, Тәжікстан

<sup>4</sup>Латвия университетінің Қатты дененің физикасы институты, Рига, Латвия

(E-mail: aralbayevagulnara@gmail.com)

### **Gd<sub>3</sub>Ga<sub>5</sub>O<sub>12</sub>-дағы дефект жағдайларын және 4f-электрондардың рөлін әдістермен модельдеу**

**Аңдатпа.** Гадолиний галлий гранатасы (Gd<sub>3</sub>Ga<sub>5</sub>O<sub>12</sub>, GGG) лазерлік жүйелерде, магниттік-оптикада және радиациямен шыңдалған электроникада қолданудың кең ауқымы бар маңызды синтетикалық кристалл болып табылады. Оның оптикалық және функционалдық қасиеттерін оңтайландыру үшін оның электрондық құрылымы мен ақаулық күйлерін түбегейлі түсіну қажет. Бұл жұмыстың мақсаты заманауи теориялық әдіс – тығыздық функционалдық теориясының (ТҚТ) көмегімен Gd<sup>3+</sup> ионының 4f электрондарының жолақ құрылымы мен GGG оптикалық реакциясының қалыптасуына әртүрлі ақау түрлерінің әсерін және рөлін зерттеу. Кванттық-механикалық есептеулер VASP бағдарламасы мен әртүрлі алмасу-корреляциялық функцияларды қолдану арқылы орындалды: GGA-PBE, SCAN, mBJ және гибриді HSE06. Салыстырмалы талдау Gd<sup>3+</sup> 4f электрондарын модельдеуге қосу GGG электрондық құрылымына айтарлықтай әсер ететінін анықтады: олардың қосылуы валенттілік және өткізгіштік жолақтарында локализацияланған деңгейлердің пайда болуына әкеледі. Зарядталған [GGG]Vo<sup>2+</sup> бос орындары ақаулық деңгейлерін жасамай-ақ Ферми деңгейін ауыстыратыны анықталды, ал бейтарап [GGG]Vo0 бос орындар диапозондағы локализацияланған күйлерді құрайды, бұл мөлдірлікті төмендетеді және кристалдың оптикалық қасиеттерін нашарлатады.

Бұл нәтижелердің іргелі және қолданбалы маңызы бар. Ғылыми тұрғыдан олар гранаттардағы күшті корреляцияланған 4f электрондарының рөлін және оттегі ақауларының оларға әсер ету механизмін түсіндіреді. Практикалық тұрғыдан алғанда, олар радиацияның қаттылығын болжауға және келесі ұрпақтың оптикалық материалдарын әзірлеуге негіз береді. Бұл жұмыс ақаулық күйлер физикасын дамытуға және функционалдық кристалдардың теориялық модельдеуіне ықпал етеді.

**Түйін сөздер:** гадолиний-галлий гранаты, DFT, 4f-электрондар, зоналық құрылым, оттекті вакансийлар, тығыздық, оптикалық қасиеттер



Z.T. Karipbayev<sup>1</sup>, Z. Umar<sup>2,3</sup>, G.M. Aralbayeva<sup>1\*</sup>, A. Bakytzyzy<sup>1</sup>, A.M. Zhunusbekov<sup>1</sup>,  
K.K. Kumarbekov<sup>1</sup>, A.I. Popov<sup>1, 4</sup>

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

<sup>2</sup>S. Aini Tajik State Pedagogical University, Dushanbe, Tajikistan

<sup>3</sup>Center for Innovative Development of Science and New Technologies,  
National Academy of Sciences of Tajikistan, Dushanbe, Tajikistan

<sup>4</sup>Institute of Solid State Physics, University of Latvia, Riga, Latvia  
(E-mail: aralbayevagulnara@gmail.com)

## Modeling defect states and the role of 4F electrons in $Gd_3Ga_5O_{12}$ using DFT methods

**Abstract.** Gadolinium gallium garnet ( $Gd_3Ga_5O_{12}$ , GGG) is an important synthetic crystal with a wide range of applications in laser systems, magneto-optics, and radiation-hardened electronics. A fundamental understanding of its electronic structure and defect states is necessary for optimizing its optical and functional properties. The aim of this work is to investigate the influence of various defect types and the role of 4f electrons of the  $Gd^{3+}$  ion on the formation of the band structure and optical response of GGG using a modern theoretical method-density functional theory (DFT). Quantum-mechanical calculations were performed using the VASP program and various exchange-correlation functionals: GGA-PBE, SCAN, mBJ, and the hybrid HSE06. A comparative analysis revealed that including the 4f electrons of  $Gd^{3+}$  in the modeling significantly affects the electronic structure of GGG: their inclusion leads to the formation of localized levels in both the valence and conduction bands. It was found that charged  $[GGG]Vo^{2+}$  vacancies shift the Fermi level without creating defect levels, while neutral  $[GGG]Vo^0$  vacancies form localized states within the band gap, which reduces transparency and degrades the optical properties of the crystal.

These results are of fundamental and applied significance. From a scientific perspective, they clarify the role of strongly correlated 4f electrons in garnets and the mechanism by which oxygen defects influence them. From a practical perspective, they provide a basis for predicting radiation hardness and developing next-generation optical materials. This work contributes to the development of the physics of defect states and the theoretical modeling of functional crystals.

**Keywords:** gadolinium gallium garnet, DFT, 4f electrons, band structure, oxygen vacancies, density of states, optical properties

## References

1. D.F. O'Kane, R.J. Kennedy, D.M. DeMeo, W.S. Eames, Electrical properties of gadolinium gallium garnet, J. Electrochem. Soc. 120, 1272–1278 (1973).
2. O.A. Petrenko, C. Ritter, M. Yethiraj, D. McK. Paul, Spin-liquid behavior of the gadolinium gallium garnet, Physica B 241–243, 727–729 (1998), [https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(97\)00705-9](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(97)00705-9)
3. A.M. Zhunusbekov, Z.T. Karipbayev, A. Tolegenova, K.K. Kumarbekov, E.E. Nurmoldin, M.M. Baizhumanov, A. Kotlov, A.I. Popov, Comparative VUV Synchrotron Excitation Study of YAG:Eu and YAG:Cr Ceramics, Crystals 14, 897 (2024).
4. Z.T. Karipbayev, V.M. Lisitsyn, M.G. Golkovski, Z.S. Zhilgildinov, A.I. Popov, A.M. Zhunusbekov, E. Polisadova, A. Tulegenova, D.A. Mussakhanov, G. Alpysova et al., Electron Beam-Assisted Synthesis of YAG:Ce Ceramics, Materials 16, 4102 (2023).
5. K.K. Kumarbekov, Z.S. Zhilgildinov, Z.T. Karipbayev, A.M. Zhunusbekov, E.E. Nurmoldin, M.G. Brik, Y. Suchikova, M. Kemere, A.I. Popov, M.T. Kassymzhanov, A novel method of preparation of  $Y_3Al_5O_{12}:Cr^{3+}$  ceramics and its structural and optical characterization, Optical Materials 159, 116535 (2025).

6. G.M. Aralbayeva, I. Manika, Z. Karipbayev, Y. Suchikova, S. Kovachov, D. Sugak, A.I. Popov, Micromechanical properties of  $Gd_3Ga_5O_{12}$  crystals irradiated with swift heavy ions, *Journal of Nano- and Electronic Physics* 15(5), 05020 (2023).
7. P.P. Deen, O. Florea, E. Lhotel, H. Jacobsen, Updating the phase diagram of the archetypal frustrated magnet  $Gd_3Ga_5O_{12}$ , *Phys. Rev. B* 91(1), 014419 (2015), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.014419>
8. K. Ghimire, H.F. Haneef, R.W. Collins, N. Podraza, Optical properties of single-crystal  $Gd_3Ga_5O_{12}$  from the infrared to ultraviolet, *Physica Status Solidi B* 252(10), 2191–2198 (2015).
9. C. Freysoldt, B. Grabowski, T. Hickel, J. Neugebauer, G. Kresse, A. Janotti, C.G. Van de Walle, First-principles calculations for point defects in solids, *Rev. Mod. Phys.* 86(1), 253–305 (2014).
10. P.E. Blöchl, Projector augmented-wave method, *Phys. Rev. B* 50(24), 17953–17979 (1994), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.17953>
11. L. Wang, T. Maxisch, G. Ceder, Oxidation energies of transition metal oxides within the GGA+U framework, *Phys. Rev. B* 73(19), 195107 (2006), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.195107>
12. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, *Phys. Rev. Lett.* 77(18), 3865–3868 (1996), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
13. J. Sun, A. Ruzsinszky, J.P. Perdew, Strongly constrained and appropriately normed semilocal density functional, *Phys. Rev. Lett.* 115(3), 036402 (2015), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.036402>
14. H.J. Monkhorst, J.D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B* 13(12), 5188–5192 (1976), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
15. C. Freysoldt, B. Grabowski, T. Hickel, J. Neugebauer, G. Kresse, A. Janotti, C.G. Van de Walle, First-principles calculations for point defects in solids, *Rev. Mod. Phys.* 86(1), 253–305 (2014), <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.86.253>
16. Z. Umar, O. Khyzhun, T. Yamamoto, P. Brągiel, Optical and electronic properties of novel oxide materials, *Optical Materials* 149, 115057 (2024), <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2023.115057>
17. R. M. Burganova, Z. Umar, O. V. Nedopekin, I. V. Chepkasov, I. I. Piyanzina. Complex investigation of  $XF_3$  (X = Gd, Tb, Dy, Ho and Er) fluorides under pressure: An ab-initio perspective, *Computational Materials Science*, V. 246, (2025), 113428, <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2024.113428>
18. F.Z. Jarý, J. P. Boháček, Z. Umar, M. Piasecki, et al. A fast GGAG: Ce (Mg) single crystal scintillator: LDFZM growth, characterization and electronic band structure calculation, *Materials Advances* 6 (2), (2025), pp. 777-787, DOI: 10.1039/D4MA00976B

#### Сведения об авторах:

**Карипбаев Жакып** – PhD, ассоциированный профессор, Институт физико-технических наук, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

**Умар Зафар** – Кандидат физико-математических наук, Таджикский государственный педагогический университет им. С. Айни, Душанбе

**Аралбаева Гульнара** – автор для корреспонденции, PhD, ассоциированный профессор, Институт физико-технических наук, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

**Бақытқызы Айзат** – Научный сотрудник, Институт физико-технических наук, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

**Жунусбеков Амангелди** – Кандидат физико-математических наук, PhD, ассоциированный профессор, Институт физико-технических наук, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

**Кумарбеков Куат** – PhD, научный сотрудник, Институт физико-технических наук, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

**Попов Анатолий** – Доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт физики твёрдого тела, Латвийский университет, Рига, Латвия

**Karipbayev Zhakyp** – PhD, Associate professor, Institute of Physical and Technical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

**Umar Zafari** – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, S. Aini Tajik State Pedagogical University, Dushanbe

**Aralbayeva Gulnara** – corresponding author, PhD, Associate professor, Institute of Physical and Technical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

**Bakytқызы Aizat** – Research Scientist, Institute of Physical and Technical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

**Zhunosbekov Amangeldy** – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate professor, Institute of Physical and Technical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

**Kumarbekov Kuat** – PhD, Research Scientist, Institute of Physical and Technical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

**Popov Anatoli I.** – Doctor of Physics, Senior Researcher, Institute of Solid State Physics, University of Latvia, Riga, Latvia

**Карипбаев Жакып** – PhD, қауымдастырылған профессор, Физикалық және техникалық ғылымдар институты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

**Умар Зафари** – Физика-математика ғылымдарының кандидаты, С. Айни атындағы Тәжік мемлекеттік педагогикалық университеті, Душанбе

**Аралбаева Гульнара** – хат-хабар авторы, PhD, қауымдастырылған профессор, Физикалық және техникалық ғылымдар институты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

**Бақытқызы Айзат** – Ғылыми қызметкер, Физикалық және техникалық ғылымдар институты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

**Жунусбеков Амангелді** – Физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Физикалық және техникалық ғылымдар институты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

**Құмарбеков Куат** – PhD, ғылыми қызметкер, Физикалық және техникалық ғылымдар институты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

**Попов Анатолий** – Физика ғылымдарының докторы, аға ғылыми қызметкер, Қатты денелер физикасы институты, Латвия университеті, Рига, Латвия



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).