

## Defektu procesu modelēšana itrija ortosilikāta kristālos

Rostislavs Rostovskis<sup>1</sup>, Aleksandrs Platonenko<sup>1</sup>, Anatolijs Popovs<sup>1</sup>

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

Scintilatoru materiālos starojuma ietekmē rodas radiācijas defekti, kuri ietekmē luminiscences procesus, traucējot scintilatora detektora darbībai. Starojuma daļiņas enerģijas pietiek, lai, izraisīt materiālā defektu kaskādi.  $Y_2SiO_5$  ir daudzsološs un pieejams scintilatora materiāls ar universālām īpašībām, kura defekti iepriekš bija vāji pētīti.

Darba pirmā posmā veikti aprēķini no pirmajiem principiem blīvuma funkcionāla teorijā, modelējot izolētus skābekļa defektus un nosakot to elektronisko un telpisko struktūru, kā arī veidošanas enerģijas. Tika apskatīti skābekļa vakances un skābekļa iespiešanas defekti dažādos lādiņa stāvokļos. Iegūtie rezultāti tālāk tiek izmantoti molekulāras dinamikas klasisko potenciālu pielāgošanai. Modeļa funkcijas tika izvēlētas, lai pēc iespējas precīzāk aprakstīt starpatomu mijiedarbības kristāliskā struktūrā. Modeļa parametri bija atrasti pēc Levenberga-Markvardta algoritma, panākot labāku iespējamo sakritību starp kvantu mehānisko un klasiskā modeļa enerģiju daudzu  $Y_2SiO_5$  struktūras fragmentu kopā.

Darba otrā posmā veikti radiācijas kaskāžu modelēšana izmantojot klasisko molekulāro dinamiku. Rezultātā tiks iegūti sliekšņa nobīdes enerģijas, kā arī būs izpētīts radiācijas ietekmes kumulatīvais efekts, defektu skaita atkarība no starojuma devas.

## Modelling of defect processes in yttrium orthosilicate crystals

Rostislavs Rostovskis<sup>1</sup>, Aleksandrs Platonenko<sup>1</sup>, Anatoli Popov<sup>1</sup>

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

In scintillator materials, radiation-induced defects emerge under the influence of ionizing radiation, affecting luminescence processes and thereby impairing the performance of scintillator detectors. The energies of the incident radiation particles are sufficient to trigger a cascade of defects within the material.  $Y_2SiO_5$  is a promising and readily available scintillator material with universal properties, yet its defects have hitherto been scarcely investigated.

In the first phase of this work, ab initio calculations within the framework of density functional theory were performed to model isolated oxygen defects, determining their electronic and spatial structures as well as their formation energies. Both oxygen vacancies and oxygen interstitial defects were examined in various charge states. The results obtained were subsequently employed to fit classical potentials for molecular dynamics simulations. Model functions were chosen to describe interatomic interactions within the crystalline structure as accurately as possible, and the model parameters were determined using the Levenberg–Marquardt algorithm to achieve optimal agreement between the quantum mechanical calculations and the classical model energies across numerous  $Y_2SiO_5$  structural fragments. In the second phase, radiation cascades were modelled using classical molecular dynamics. This approach will yield threshold displacement energies and facilitate an investigation of the cumulative effects of radiation, specifically the dependence of the defect count on the radiation dose.

This research is supported by Latvian Research Program “High-energy physics and 230 accelerator technologies” (Agreement No: VPP-IZM-CERN-2020/1-0002).