

Kristālisko scintilatoru materiālu modelēšana no pirmajiem principiem

Anna Ivanova, Aleksandrs Platonenko, Andrejs Česnokovs, Dmitrijs Bočarovs un Anatolijs Popovs

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

$\text{Y}_2\text{Si}_2\text{O}_5$ (YSO) ir viens no materiāliem, kuru sekmīgi pielieto kompakta mionu solenoīdā (angļu: Compact Muon Solenoid, CMS) detektoros vienā no Lielā hadronu kolaidera līnijām. To var modificēt, aizvietojot Y^{3+} metāla jonu(s) elementārformulā ar Lu^{3+} joniem ($\text{Lu}_x\text{Y}_{1-x}\text{SiO}_5$, Lu_2SiO_5), ka arī papildus dopējot kristālus ar Ce^{3+} joniem dažādās koncentrācijās.

Šajā pētījumā blīvuma funkcionāla teorijas (DFT) ietvaros tika izstrādāta aprēķinu shēma YSO ideālai kristāliskai struktūrai. Aprēķinos tika iegūta periodiskā YSO kristāla atomārā un elektroniskā struktūra, kā arī aprēķināti YSO infrasarkanie (IR) un Ramana spektri. Modelēšana veikta ar CRYSTAL17 programmatūras palīdzību. Iegūtie dati tika salīdzināti ar literatūrā nopublicētiem eksperimentāliem datiem. Apkopojot rezultātus, tika secināts, ka izveidotais YSO skaitļošanas modelis adekvāti reprezentē kristāla strukturālās un elektroniskās īpašības, respektīvi, to turpmāk var izmantot modelējot YSO kristālus ar defektiem.

Šis pētījums ir veikts Valsts Pētījumu Programmas "Augstas enerģijas fizika un paātrinātāju tehnoloģijas" ietvaros (Projekta numurs: VPP-IZM-CERN-2020/1-0002).

Modelling of the crystalline scintillating materials from the first principles

Anna Ivanova, Aleksander Platonenko, Andrew Chesnokov, Dmitry Bocharov and Anatoli I. Popov

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

$\text{Y}_2\text{Si}_2\text{O}_5$ (YSO) is one of the scintillator materials that were already successfully used in Compact Muon Solenoid (CMS) detectors in the Large Hadron Collider. YSO can be modified by substituting Y^{3+} metal ion(s) of elementary formula with Lu^{3+} ions ($\text{Lu}_x\text{Y}_{1-x}\text{SiO}_5$, Lu_2SiO_5), also adding Ce^{3+} impurity to a crystalline lattice in various concentrations.

In this work, density functional theory (DFT) methods were applied to develop a computational model of the ideal crystalline structure of YSO, to describe and predict the structural and electronic properties of this scintillator material. The corresponding periodic crystalline structure of YSO was described in detail on atomic and electronic levels; infra-red (IR) and Raman spectra were calculated also. Modelling was performed using CRYSTAL17 code. Obtained data was compared to the data available in the literature. As a conclusion, the developed computational model well reproduces structural and electronic properties of YSO and is in a good agreement with the literature. Further, this model can be used to research YSO structure with a various defects incorporated.

This research is a part of the State Research Program "High-energy physics and accelerator technologies" (Agreement No: VPP-IZM-CERN-2020/1-0002).