

ОСНОВАННОЕ НА ПАКЕТЕ GEANT4.11 МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА КОМПОЗИТНЫЕ СИЛИКАТНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ

В.В. АРУТЮНЯН¹, Г.Г. ОВСЕПЯН^{1*}, Э.М. АЛЕКСАНИЯН¹, А.О. БАДАЛЯН¹,
Н.Н. БАРСЕГЯН¹, А.О. ОГАНЕСЯН¹, В.В. БАГРАМЯН², А.А. САРГСЯН²,
И.И. ЗИНЬКОВСКАЯ³, Д.С. ГРОЗДОВ³, В.М. БУЛАВИН³

¹Национальная научная лаборатория им. А.И. Алиханяна, Ереван, Армения

²Институт общей и неорганической химии им. Манвеляна НАН, Ереван, Армения

³Лаборатория нейтронной физики им. Франка ОИЯИ, Дубна, Россия

*e-mail: hgg@yerphi.am

(Поступила в редакцию 1 апреля 2026 г.)

Исследования в области синтеза высокочистых материалов показали, что нанопорошки силикатов цинка и циркония, легированные оксидом церия, могут применяться в качестве пигментов для солнечных отражателей космических аппаратов. В связи с этим возникает проблема исследования их радиационной стойкости. Описан процесс гидротермально-микроволнового синтеза чистого и легированного церием ортосиликатов цинка и циркония. Элементный состав материалов определяли методом инструментального нейтронно-активационного анализа. Приводятся результаты моделирования радиационного воздействия на модифицированные композитные терморегулирующие покрытия ортосиликата цинка (виллемита) и циркония, легированные церием ($\text{Zn}_2\text{SiO}_4\text{:Ce}$ и $\text{ZrSiO}_4\text{:Ce}$). Теоретическое предсказание степенной зависимости энергетического спектра атомов (ионов), получивших избыточную кинетическую энергию, совпадает с моделированием при учете только кулоновского рассеяния при радиационном воздействии. В результате моделирования получены вероятности образования дефектов в кристаллах. Наиболее разрушительным для кристаллов является воздействие протонов. Воздействие электронов в 4–7 раз, а нейтронов – более чем в 70 раз слабее. Программа моделирования основана на пакете GEANT4.11.

1. Введение

Композитные терморегулирующие покрытия (ТРП) предназначены для поддержания необходимого теплового режима объектов за счет установления баланса между поглощаемой извне энергией и энергией, излучаемой в окружающую среду. Основным внешним источником энергии является солнечное излучение, однако могут быть и другие источники нагрева. Идеальные покрытия должны иметь высокие температуры плавления, низкую теплопроводность, превосходную химическую стабильность, отсутствие фазовых переходов при рабочих температурах.

Однако и в этих покрытиях при длительных сроках эксплуатации под воздействием космических лучей, как в глубине атмосферы, так и вне ее образуются

достаточно большое количество дефектов и центров поглощения. Поэтому разработка способов повышения фото- и радиационной стойкости ТРП пигментов является актуальной проблемой.

Исследования в области синтеза высокочистых материалов показали, что нанопорошки силикатов цинка и циркония, легированные церием, могут применяться в качестве пигментов для этих покрытий. Спектр применения пигментов крайне широк и охватывает область ядерных исследований, в связи с чем эти материалы должны обладать повышенной радиационной стойкостью.

Исследования влияния ионизирующего излучения на материалы проводятся изучением физических характеристик (теплопроводность, электропроводность, магнитные и оптические свойства и т. д.) до и после облучения. Однако эти исследования не проясняют какие конкретно процессы происходят в материалах при облучении высокоэнергичными частицами.

Многообразие радиационных процессов, протекающих в материалах под действием ионизирующего излучения, не позволяет установить единую для всех случаев методику моделирования. Выбор методики испытания радиационной надежности проводится с учетом индивидуальных свойств исследуемых объектов [1–2] и физических характеристик излучения – интенсивности, типа и энергии частиц радиационного воздействия.

Оценка радиационной стойкости материалов и элементов из силикатных покрытий осложняется тем, что на эти материалы одновременно с ионизирующими излучениями действуют многие другие факторы, которые могут приводить к различным фотохимическим и плазмохимическим явлениям. Дополнительные факторы возникают при их применении в различных отраслях – таких, как строительство, медицина, аэрокосмическая промышленность, а также при изготовлении приборов и деталей, выдерживающих высокотемпературную и агрессивную окружающую среду.

Цель данной работы – изучение влияния радиационного воздействия на модифицированные терморегулирующие покрытия – ортосиликаты цинка (виллемита) и циркония, а также на образцы, легированные церием, с использованием пакета GEANT4.11 и оценка их радиационной стойкости.

2. Методика синтеза, измерений и обработки

Синтез силиката циркония ZrSiO_4 проводили в микроволновой печи марки «CE1073AR» компании «Samsung» в открытой стеклянной колбе, снабженной обратным холодильником и мешалкой. Условия синтеза: частота микроволнового излучения – 2.45 ГГц, мощность микроволнового излучения – 600 Вт. Концентрации исходных водных растворов $\text{Zr}(\text{OH})_2\text{SO}_4$ и $\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{SiO}_2$ составляли 0.5 моль/л. Синтез проводили реакцией растворов сульфата циркония и силиката натрия, поддерживая pH среды на уровне 7.0 [3]. Легирование силиката циркония проводилось также как и ортосиликата цинка путём добавления в исходный раствор нитрата церия (см. ниже).

Водные растворы хлорида цинка (ZnCl_2 , 99.5%) и Na_2SiO_3 с концентрацией 1.0 моль/л смешивали и облучали в микроволновой печи MS-6 «VOLTA» (частота 2.45 ГГц) в течение 1.5–3.5 часов. Максимальная температура во время синтеза составляла $\sim 240^\circ\text{C}$. Нитрат церия гексагидрат ($\text{Ce}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (99.0%)

добавляли к исходным растворам для получения 3 масс% пигментов $Zn_2SiO_4:Ce$. Эта концентрация была выбрана для обеспечения легирования материала, а не для образования второй фазы. После микроволнового облучения осадки фильтровали и промывали теплой деионизированной водой для удаления ионов Na^+ , Cl^- , $(NO_3)^-$, $(SO_4)^{2-}$, а затем сушили при $110^\circ C$ [1]. Для полного удаления связанной воды образцы ортосиликата цинка $Zn_2SiO_4:Ce$ ($1050^\circ C$) и циркония $ZrSiO_4:Ce$ ($1200^\circ C$) подвергали термической обработке и определяли элементный состав.

Элементный состав материалов определяли методом инструментального нейтронно-активационного анализа (ИНАА) на установке «Регата» реактора ИБР-2 (Дубна, Россия). Для определения элементов с короткоживущими радионуклидами (Al, Si, V и Mn) образцы облучали в течение 1 минуты при потоке тепловых нейтронов 1.1×10^{12} н/(см²×сек), после чего проводили измерения в течение 15 минут. Для элементов с долгоживущими изотопами (Na, Sc, Zn, As, Zr, Sb, La, Ce, Sm и Hf) облучение длилось 4 дня при потоке нейтронов 1.2×10^{11} н/(см²×сек). Гамма-спектры индуцированной активности были получены через 4 и 20 дней, соответственно, с использованием детекторов Canberra HPGe с эффективностью 70–100% и разрешением 1.8–2.0 кэВ при пике полного поглощения ^{60}Co на уровне 1332 кэВ. Анализ спектров проводился с использованием программного обеспечения Genie2000 (версия 4.0) производства Canberra, а массовые доли элементов рассчитывались с помощью программного обеспечения, разработанного в ЛНФ [4]. Набор эталонных материалов, включая NIST 2709a – почва Сан-Хоакин, NIST 2711a – почва Монтана II, NIST 1515 – листья яблони, NIST 1547 – листья персика, NIST 2710 – почва Монтана, NIST 1633b – зола от сжигания битуминозного угля, BCR-667 – эстуарный осадок, СТА-FFA-1 – мелкая зола от сжигания, был облучен с образцами для создания группового стандарта и обеспечения контроля качества анализа. Разница между экспериментальными и сертифицированными значениями не превышала 10%.

В публикациях [1–3] представлены результаты по радиационной стойкости композитных силикатных покрытий – образцов, но нет количественных оценок образовавшихся в результате облучения радиационных дефектов в терморегулирующих образцах.

3. Моделирование радиационных процессов

Известно, что при радиационном воздействии дефекты образуются при непосредственном воздействии излучения на атомы в узлах решетки. При этом атомы (ионы) получают некую кинетическую энергию E_d и при превышении порогового значения E_{tr} покидают кристаллическую решетку с образованием пустого узла кристаллической решетки со смещением атомов(ионов) в междоузлие (дефект Френкеля). Естественно, что при больших кинетических энергиях и условии их образования в тонком граничном слое мишени, эти атомы (ионы) выбиваются из исследуемого образца. Но если атомы (ионы) остаются в образце, они, при остановке захватив свободный электрон, превращаются в смещенный в междоузлие атом или дефект по Френкелю [5]. Если при моделировании прохождения частиц через образец проследить за пробегом и значением кинетической энергии с последующим обнулением (остановкой) этих атомов (ионов) в преде-

лах объема образца, это будет означать образование дефекта Френкеля или радиационное нарушение в кристалле. В качестве вероятного значения E_d принято считать 25 эВ для кристаллов с энергией связи $E_{tr} \sim 10$ эВ [5].

Теоретическое рассмотрение процессов возникновения дефектов Френкеля под действием заряженных частиц предсказывает степенную форму энергетического спектра атомов, получивших избыточную кинетическую энергию. Энергетический спектр атомов, с точностью до принятых в [5] приближений в расчетах, равен:

$$dN(E_A^i)/dE_A^i = \text{const} \times E_A^{-2}, \quad (1)$$

где $dN(E_A^i)/dE_A^i$ – число атомов типа А с кинетической энергией в интервале $(E_A^i, E_A^i + dE_A^i)$, константа – величина, включающая максимально переданную атому А энергию при лобовом столкновении, резерфордское поперечное сечение и т. д.

Моделированием реальной экспериментальной ситуации можно количественно оценить число образовавшихся дефектов при радиационном воздействии на материалы и выяснить критический уровень дефектов, при котором нарушаются физические свойства материалов, а также сравнить справедливость выражения (1) для наблюдаемых в моделировании спектров, выбитых из узлов решетки атомов (ионов).

3.1. Алгоритм моделирования

Алгоритм и программа моделирования основаны на пакете GEANT4.11 [6–8]. Физические процессы, включённые в моделирование, учитывают упругое и неупругое рассеяние ионов и адронов (FTFP_BERT_HP), фото-ядерные процессы, распад, радиационные эффекты, а также электромагнитные процессы, включенные в G4EmStandardPhysicsWVI [9]. Моделирование облучения образца проведено для высокоэнергетических частиц протонов, электронов и нейтронов с энергиями 18 МэВ, 20 МэВ и 2 МэВ, соответственно. Моделирование максимально приближенно к реальной экспериментальной ситуации.

Конфигурация экспериментальной установки на циклотроне С-18 МэВ, включенная в моделирование, следующая: установка размещена в материнском объеме (World) с размерами $20 \times 20 \times 31$ см³, заполненном атмосферой (см. рис.1). Вакуумная система ускорителя протонов, вырабатывающего пучок частиц с энергией 18 МэВ, изолирована от атмосферы пластиной из нержавеющей стали толщиной 100 мкм. Мишенью служат чистые ортосиликат цинка и циркония, а также легированные 3% церием. Геометрические размеры образцов – толщина

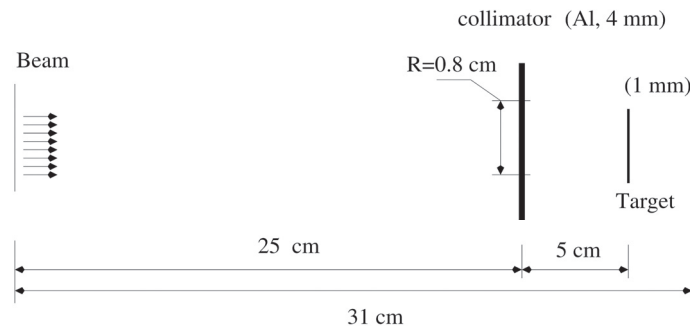


Рис.1. Схема экспериментальной установки на циклотроне С-18 при облучении образцов протонами.

1.0 мм и площадь – 2×2 см², и они установлены в 30 см от выхода ускорителя. Рассеянные в металлической пластине и атмосфере протоны отсекаются алюминиевым коллиматором с площадью окна около 2 см² и толщиной 4 мм, расположенным в 5 см от мишени.

Прохождение протонов через атмосферу сопровождается рассеянием пучка, и после коллиматора до мишени доходит около 50% протонов. Остальные отсекаются коллиматором.

Воздействие электронов на мишени проведено на инжекторе ЭКУ ЕрФИ при энергиях 20 МэВ. Конфигурация установки практически не отличалась от приведенной на рис.1. Выход вакуумной системы изолирован от атмосферы бериллиевой пластиной толщиной 100 мкм. Свинцовый коллиматор, расположенный на выходе, отсекает пучок электронов диаметром 10 мм. Расстояние от выхода инжектора до мишени 30 см. Рассеяние электронов в атмосфере приводит к тому, что только 35–40% от потока бомбардируют мишень.

Исследование воздействия быстрых нейтронов (2 МэВ) на мишени проведено на импульсном реакторе ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна, РФ) на канале № 3 на расстоянии 1500 мм от вакуумной защиты [2, 4]. Как показывает моделирование только 1% нейтронов выбивает из пучка, провозаимодействовав в атмосфере.

Для протонов и электронов число сгенерированных частиц равно $N_0 = 2 \times 10^5$. Нейтронов сгенерировано на порядок больше ($N_0 = 2 \times 10^6$), чтобы при моделировании наблюдать сравнимые статистические ошибки с протонами и электронами.

3.2. Результаты моделирования

Влияние ионизирующего излучения на вещество характеризуется энерговыделением, приводящем к обратимым и необратимым последствиям. Процессы радиационного воздействия на вещество, при их многообразии, в конечном счете сводятся к ионизационным потерям. Расчеты показывают, что при конфигурации установки, представленной на рис.1, до мишени долетают протоны со средними энергиями $E_p = 15.5$, электроны – $E_e = 19.8$ и нейтроны – $E_n = 2$ МэВ, практически без изменений энергии.

На рис.2 показаны распределения энергетических потерь на ионизацию в образцах мишени для протонов, электронов и нейтронов. Для нейтронов (кривая 1, рис.2а) ярко выраженного максимума нет и около 0.4 МэВ наблюдается слабый пик. Это следствие того, что нейтроны ионизацию создают опосредованно, через вторичные заряженные частицы, и только около 2% нейтронов дают вклад в ионизационные потери. Электроны с энергиями ~20 МэВ являются релятивистскими, и их средние ионизационные потери в образцах составляют ~0.5 МэВ (кривая 2, рис.2а). Потери протонов составляют 12.9 для Zn_2SiO_4 и 15.5 МэВ для $ZrSiO_4$ (рис.2в, кривые 2 и 1, соответственно). В распределении потерь протонов в ортосиликате цинка в области энергий 15.5 МэВ наблюдается слабый пик, что объясняется полностью поглощенными протонами. Они составляют около 2% от всех протонов, попавших на мишень. В ортосиликате циркония все попавшие на мишень протоны поглощаются.

3.3. Моделирование дефектов Френкеля под ионизирующим излучением

При радиационном облучении дефекты образуются при непосредственном воздействии излучения на атомы в узлах решетки. При этом атомы (ионы)

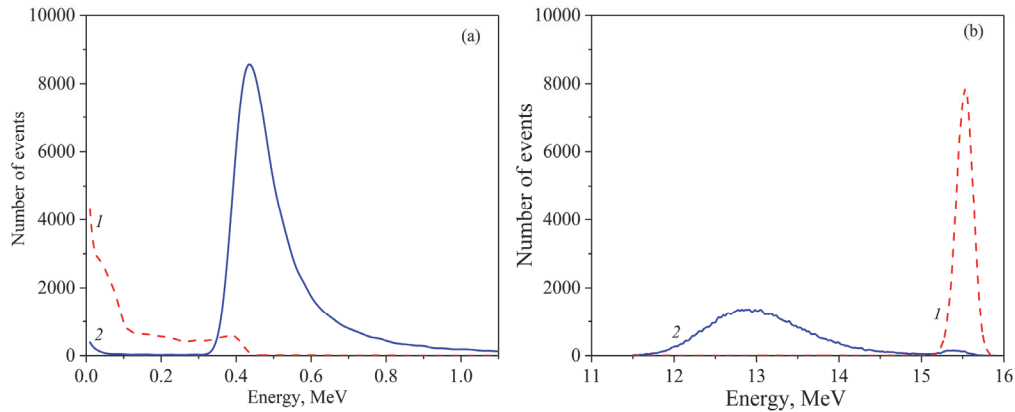


Рис.2. Распределения энергетических потерь в облученных образцах (а) для электронов и нейтронов и (b) – для протонов. Кривые на (а): 1 – нейтроны, 2 – электроны. Кривые на (b): 1 – протоны в ортосиликате циркония и 2 – в ортосиликате цинка.

получают некую кинетическую энергию и при превышении порогового значения $E_{tr} \sim 10$ эВ [5] покидают кристаллическую решетку. При этом, чем меньше энергии передается атому (иону), тем больше вероятность восстановления периодичности кристалла. Чем на большем расстоянии будет находиться атом (ион) от своего узла в кристаллической решетке, тем более высока будет вероятность образования точечного дефекта по Френкелю. Линейные размеры кристалла Zn_2SiO_4 составляют порядка $d \approx 14$ Å [10] или ~ 1.5 нм. В моделировании можно проследить за пробегом образованных в результате радиационного воздействия атомов (ионов) в мишени. Аналогично [12], нами рассматривались случаи, когда кинетическая энергия атомов (ионов) пятикратно превышала пороговое значение $E_{tr} \sim 10$ эВ. При этом средние пробеги для ионов с энергиями ≥ 50 эВ составили около 19, 12, 7 и 4 нм для O, Si, Zn и Ce, соответственно. Линейные размеры кристалла $ZrSiO_4$ составляют $\sim 6-7$ Å [11]. Средние пробеги для ионов с энергиями ≥ 50 эВ составляют 11.2, 9.8, 6.3 и 5.1 нм для O, Si, Zr и Ce, соответственно. В обоих случаях пробеги превышают линейные размеры кристаллов, что обеспечивает перемещение атомов (ионов) вне решетки, образуя дефекты по Френкелю.

В табл.1 представлены вероятности выхода компонентов ортосиликатов цинка и циркония, а также легированного 3% церием состава с кинетическими энергиями $E_d \geq 50$ эВ при радиационном воздействии потоками протонов, электронов и нейтронов. Результаты в табл.1 нормированы на число первичных частиц, бомбардировавших единичную поверхность (1 см^2) мишени. Подобная нормировка упрощает использование данных при воздействии на мишень разными дозами (флюенсами – число частиц/ см^2) облучения. Например, при известном флюенсе протонов 10^{15} п/ см^2 [2] для мишени Zn_2SiO_4 ожидается около 6.3×10^{13} дефектов по Френкелю. Как видно из таблицы, при радиационном воздействии наиболее разрушительным для кристаллов является поток протонов. Воздействие электронов от 4 до 7 раз, а нейтронов более чем в 70 раз слабее.

Моделирование влияния радиации позволяет исследовать энергетические спектры выбитых атомов(ионов) из кристаллической решетки образцов. На рис.3 и рис.4 представлены энергетические спектры выбитых ионов из кристаллов

Табл.1. Вероятности выхода атомов с кинетической энергией $E_d \geq 50$ эВ при облучении Zn_2SiO_4 и $ZrSiO_4$ и легированных церием образцов толщиной 1 мм протонами, электронами и нейтронами

Zn_2SiO_4	протоны	электроны	нейтроны
O	$9.48 \cdot 10^{-3}$	$2.21 \cdot 10^{-3}$	$2.99 \cdot 10^{-4}$
Si	$5.45 \cdot 10^{-3}$	$1.60 \cdot 10^{-3}$	$1.39 \cdot 10^{-4}$
Zn	$4.81 \cdot 10^{-2}$	$1.48 \cdot 10^{-2}$	$6.51 \cdot 10^{-4}$
сумма	$6.30 \cdot 10^{-2}$	$1.86 \cdot 10^{-2}$	$1.09 \cdot 10^{-3}$
$ZrSiO_4$			
O	$3.46 \cdot 10^{-2}$	$3.43 \cdot 10^{-3}$	$2.87 \cdot 10^{-4}$
Si	$2.34 \cdot 10^{-2}$	$2.64 \cdot 10^{-3}$	$1.50 \cdot 10^{-4}$
Zr	$1.14 \cdot 10^{-1}$	$1.65 \cdot 10^{-2}$	$3.28 \cdot 10^{-4}$
сумма	$1.72 \cdot 10^{-1}$	$2.26 \cdot 10^{-2}$	$7.65 \cdot 10^{-4}$
$Zn_2SiO_4:Ce$			
O	$1.12 \cdot 10^{-2}$	$2.19 \cdot 10^{-3}$	$3.09 \cdot 10^{-4}$
Si	$6.65 \cdot 10^{-3}$	$1.55 \cdot 10^{-3}$	$1.37 \cdot 10^{-4}$
Zn	$5.68 \cdot 10^{-2}$	$1.45 \cdot 10^{-2}$	$6.49 \cdot 10^{-4}$
Ce	$3.64 \cdot 10^{-3}$	$9.73 \cdot 10^{-4}$	$1.55 \cdot 10^{-5}$
сумма	$7.83 \cdot 10^{-2}$	$1.92 \cdot 10^{-2}$	$1.11 \cdot 10^{-3}$
$ZrSiO_4:Ce$			
O	$6.23 \cdot 10^{-2}$	$3.48 \cdot 10^{-3}$	$3.09 \cdot 10^{-4}$
Si	$3.99 \cdot 10^{-2}$	$2.35 \cdot 10^{-3}$	$1.58 \cdot 10^{-4}$
Zr	$2.03 \cdot 10^{-1}$	$1.58 \cdot 10^{-2}$	$3.13 \cdot 10^{-4}$
Ce	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.13 \cdot 10^{-3}$	$1.53 \cdot 10^{-5}$
сумма	$3.20 \cdot 10^{-1}$	$2.28 \cdot 10^{-2}$	$7.95 \cdot 10^{-4}$

силикатов Zn и Zr, получивших избыточную кинетическую энергию, начиная с 1 эВ. Данные нормированы на число первичных частиц, попавших на мишень. Площадь S радиационного воздействия на мишень составляет 2 см^2 для протонов (из-за коллиматора, см. рис 1) и 4 см^2 для электронов и нейтронов.

Интенсивность атомов (ионов) с энергиями E_A^i вычислялась по формуле:

$$dN(E_A^i)/dE_A^i = dN_A^i / (N_{\text{tot}} \times S \times dE_A^i),$$

где dN_A^i – число атомов типа А, попавших в i – ый интервал энергий ($E_A^i, E_A^i + dE_A^i$), N_{tot} – полное число протонов, электронов и нейтронов, попавших на поверхность S мишени.

В полученных энергетических спектрах компонентов из ортосиликата цинка $Zn_2SiO_4:Ce$ (3% Ce) (рис.3) наблюдаются пики при радиационном воздействии электронами в области ~ 70 эВ и в случае с протонами в области $\sim 1\text{--}2$ кэВ, соответственно. Видно, что спектры протонов и электронов описывают суперпозицию двух процессов: со степенным распределением при малых энергиях и колоколообразным распределением при больших, с пиковыми значениями в указанных областях. В спектрах компонентов силиката циркония $ZrSiO_4:Ce$ (3% Ce) (рис.4) наблюдаемые пики от воздействия электронами сохраняются, однако при протонном воздействии пики в области $1\text{--}2$ кэВ нивелируются из-за большого количества малоэнергичных атомов (ионов). По сравнению с ортосиликатом

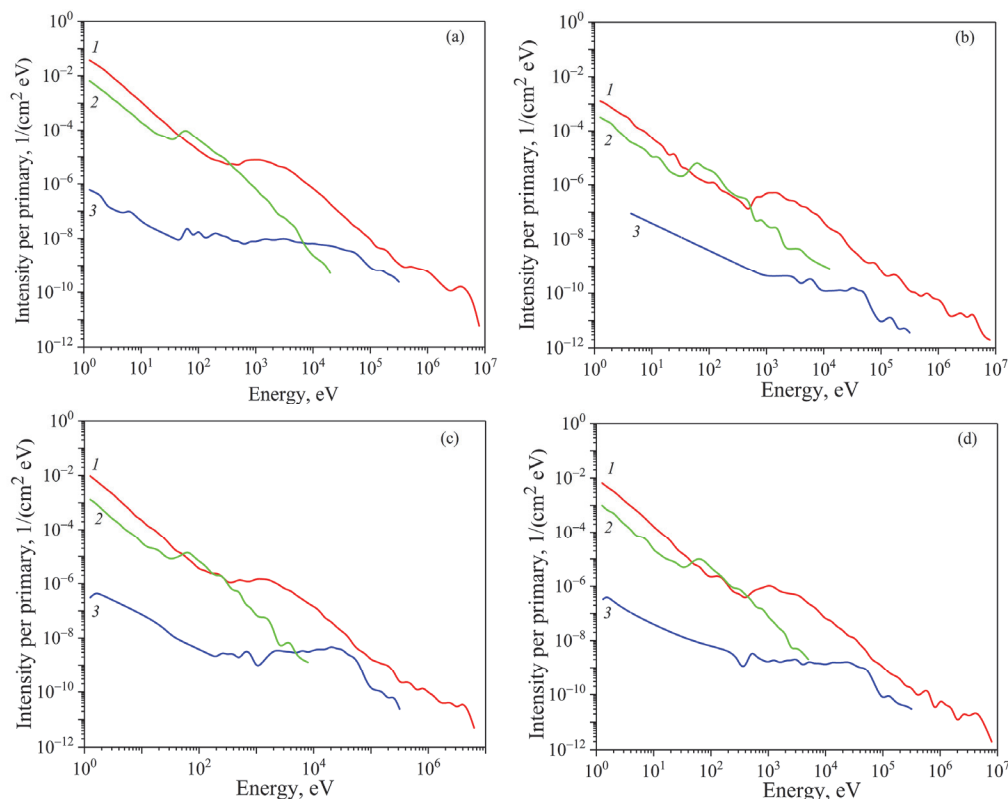


Рис.3. Спектры ионов (а) цинка, (б) церия, (с) кислорода и (д) кремния при радиационном воздействии на $\text{Zn}_2\text{SiO}_4\text{:Ce}$ (3% Ce) протонами (кривая 1), электронами (кривая 2) и нейтронами (кривая 3).

цинка в области энергий 1–100 эВ наблюдается 10 кратное превышение. При радиационном воздействии нейтронами спектры компонентов практически идентичны.

Аппроксимация моделированных спектров степенной функцией (power law) до минимума перед наблюдаемым пиком в спектрах (см. рис.3) показала отличие от теоретически ожидаемого показателя спектра (1) из [9] на ~20–30%. Выполяживание наклонов спектров (уменьшение абсолютного значения показателя) происходит из-за суммирования данных двух процессов, за счет чего спектр выполаживается. В оценках [9] учитывается только кулоновское рассеяние, в то время как в моделировании учитываются все известные процессы для этих энергий.

Какие физические процессы ответственны за поведение спектров для выбитых ионов, проведённых на рис.3 и 4? В моделировании возможно варьирование физическими процессами, и исключением тех или иных процессов можно выявить их влияние на наблюдаемые спектры.

Последовательное исключение всех нуклонных процессов показало, что наблюдаемые на рис.3 и рис.4 пики при воздействии электронами и протонами формируются только электромагнитными процессами. При исследовании

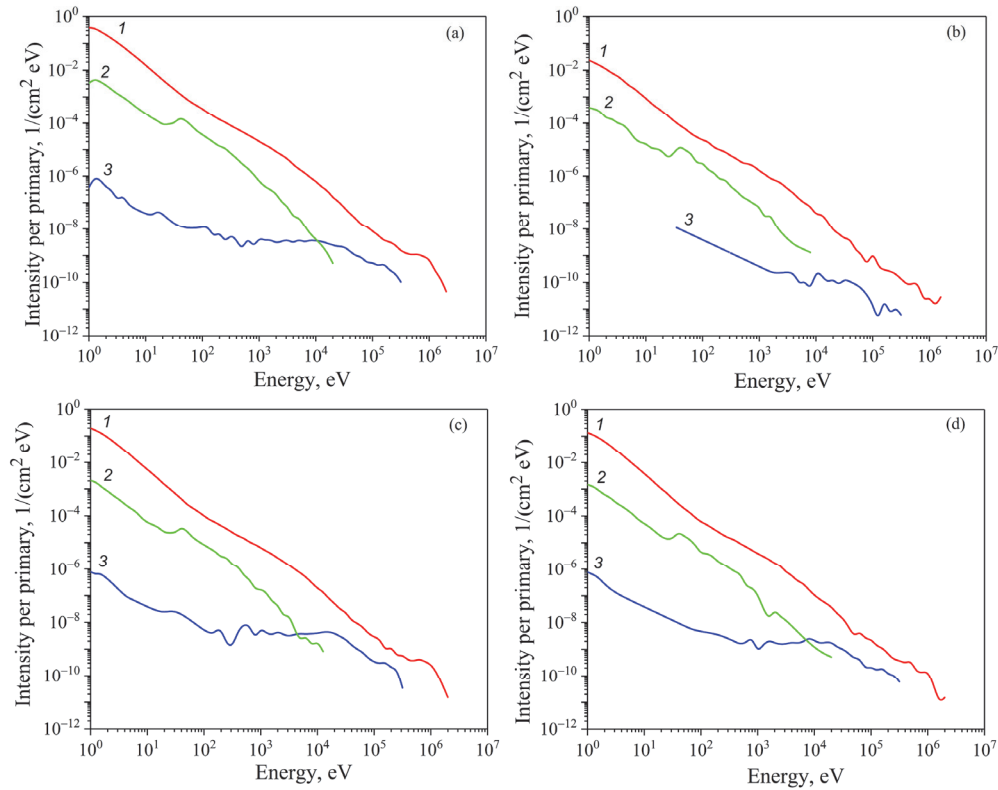


Рис.4. Спектры ионов (а) циркония, (b) церия, (с) кислорода и (d) кремния при радиационном воздействии на $\text{ZrSiO}_4:\text{Ce}$ (3% Ce) протонами (кривая 1), электронами (кривая 2) и нейтронами (кривая 3).

рассмотрен весь список моделей электромагнитных взаимодействий, включенных в GEANT4.11 [13]. Выделены используемая WVI (Wentzel VI) мода и SS (Single Scattering) мода кулоновского рассеяния. В модели WentzelVI используется «стандартная» электромагнитная физика. Для e^- и e^+ при всех энергиях используется модель многократного рассеяния в сочетании с однократным упругим рассеянием под большими углами. Для ионной ионизации используется модель Линдхарда–Соренсена [13]. SS мода также использует «стандартную» электромагнитную физику, за исключением многократного рассеяния, которое не используется, и для всех частиц применяется только процесс упругого рассеяния [13].

В случае SS моды для пучка электронов вообще не наблюдались выбитые атомы (ионы) из молекул мишени. Для протонного пучка пики в спектре не наблюдаются. Аппроксимация энергетического спектра выбитых ионов в пределах нескольких процентов согласуется с аналитически ожидаемой оценкой.

Таким образом, в приведенных на рис.3 и рис.4 спектрах процесс упругого рассеяния формирует спектр со степенным распределением, а многократное рассеяние в сочетании с рассеянием на большие углы формируют наблюдаемые пики.

Спектры атомов (ионов), выбитых нейтронами при малых энергиях в пределах до 100 эВ, формируются упругими процессами, а остальная часть спектра – неупругим рассеянием.

4. Заключение

Создана программа на основе пакета GEANT4.11 для исследований процессов ионизирующего воздействия на кристаллы силикатов Zn и Zr и их легированного 3%Ce состава протонами с энергиями 15.5 МэВ, электронами с энергиями 20 МэВ и нейтронами с энергиями 2 МэВ.

Моделирование физических процессов показало, что в среднем при попадании одного протона на поверхность кристаллов, толщиной 1 мм, образуется около 6.30×10^{-2} ионов с энергиями более 50 эВ. Для легированного церием кристалла – 7.82×10^{-2} ионов с энергиями более 50 эВ. Таким образом, при флюенсе 10^{15} п/см² суммарно в образце из Zn₂SiO₄ образуется более 6.3×10^{13} дефектов по Френкелю. Для легированного церием кристалла дефекты по Френкелю составляют 7.82×10^{13} .

Для флюенса электронов 10^{17} э/см² [2] дефекты по Френкелю составляют около 1.86×10^{15} для кристалла Zn₂SiO₄ и 1.92×10^{15} для легированного церием кристалла. Для флюенса нейтронов 10^{13} н/см² [2] дефекты по Френкелю составляют около 1.09×10^{10} для кристалла Zn₂SiO₄ и 1.11×10^{10} для легированного церием кристалла.

Исследование дифрактограмм [2] показывает, что изменение параметров решетки невелико и образование до 10^{15} дефектов по Френкелю в исследуемых образцах не критично для их радиационной стойкости.

В результате радиационного воздействия выбитые из кристаллов оксидов силикатов Zn и Zr компоненты с кинетическими энергиями ≥ 50 эВ, средние пробеги которых превышают геометрические размеры исследуемых кристаллов, с большой вероятностью создают дефекты по Френкелю. Моделирование позволило определить, что наиболее разрушительным для кристаллов является воздействие протонов. Воздействие электронов от 4 до 7 раз, а нейтронов более, чем в 70 раз слабее.

Теоретическое предсказание степенной зависимости энергетического спектра атомов (ионов), получивших избыточную кинетическую энергию, совпадает с моделированием при учете только кулоновского рассеяния при радиационном воздействии. Наблюдаемые в моделировании спектры имеют сложную форму из-за суперпозиции разных механизмов воздействия на кристаллы при образовании дефектов Френкеля.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке МОНКС РА в рамках научных проектов 24LCG-1C025, 21AG-1C012.

ЛИТЕРАТУРА

1. V.V. Baghramyan, A.A. Sargsyan, N.B. Knyazyan, V.V. Harutyunyan, A.H. Badalyan, N.E. Grigoryan, A. Aprahamian, K.V. Manukyan. *Ceramics International*, **46**, 4 (2020).

2. V.V. Harutyunyan, E.M. Aleksanyan, A.H. Badalyan, A.G. Arestakyan, V.V. Arzumanyan, N.E. Grigoryan, A.H. Hovhannesian, V.V. Baghranyan, A.A. Sargsyan, K. V. Manukyan. *J. Contemp. Phys.*, **57**, 3 (2022).
3. J. Chen, Y. Yu, A. Feng, L. Mi, H. Xiu, Y. Yu. *Ceramics International*, **48**, 1 (2022).
4. D. Grozdov, V. Galustov, I. Zinicovskaia. *J. Radioanalyt. and Nucl. Chem.*, **334**, 10 (2025).
5. В.С. Вавилов, Н.А. Ухин. Радиационные эффекты в полупроводниках и полупроводниковых приборах. Москва, Атомиздат, 1969.
6. J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, P. Arce, M. Asai, T. Aso, H. Yoshida, Recent developments in Geant4., *Nuclear instruments and methods in physics research section A*, **835**, 186 (2016).
7. J. Allison, K. Amako, J.E.A. Apostolakis, H.A.A.H. Araujo, P.A. Dubois, M.A.A.M. Asai, H.A.Y.H. Yoshida, Geant4 developments and applications. *IEEE Transactions on nuclear science*, **53**, 270 (2006).
8. S. Agostinelli, J. Allison, K.A. Amako, J. Apostolakis, H. Araujo, P. Arce, Geant4—a simulation toolkit. *Nuclear instruments and methods in physics research section A*, **506**, 250 (2003).
9. https://geant4.web.cern.ch/documentation/dev/plg_pdf/PhysicsListGuide.pdf.
10. <https://next-gen.materialsproject.org/materials/mp-3789> (2025).
11. <https://next-gen.materialsproject.org/materials/mp-4820> (2025).
12. А.Н. Дудина, В.В. Нешименко, В.Ю. Юрина. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **8**, 78 (2020).

GEANT4.11-BASED SIMULATION OF THE EFFECTS OF IONIZING RADIATION ON COMPOSITE SILICATE COMPOUNDS

V.V. HARUTYUNYAN, G.G. HOVSEPYAN, E.M. ALEKSANYAN, A.H. BADALYAN,
N.N. BARSEGHYAN, A.H. HOVHANNISYAN, V.V. BAGHRAMYAN,
A.A. SARGSYAN, I.I. ZINICOVSKAYA, D.S. GROZDOV, V.M. BULAVIN

Research in the synthesis of high-purity materials has shown that zinc and zirconium silicate nanopowders doped with cerium can be used as pigments for solar reflectors on spacecraft. This raises the question of their radiation resistance. The hydrothermal-microwave synthesis of pure and cerium-doped zinc and zirconium silicates is described. The elemental composition of the materials was determined using instrumental neutron activation analysis. The results of modeling the radiation effects on modified composite temperature-control coatings of zinc orthosilicate (willemite) and zirconium silicate doped with cerium ($\text{Zn}_2\text{SiO}_4\text{:Ce}$ and $\text{ZrSiO}_4\text{:Ce}$) are presented. The theoretical prediction of power-law dependence for the energy spectrum of atoms (ions) that have acquired excess kinetic energy agrees with the modeling results when only Coulomb scattering under radiation exposure is taken into account. The simulation yielded the probabilities of defect formation in crystals. Protons are the most damaging to crystals. Electrons are 4–7 times weaker, and neutrons are more than 70 times weaker. The simulation program is based on the GEANT4.11 package.