

Стругов Е.Д., Ширманов И.А., Аладаилах М.В.,
Таилыков О.Л., Аль-Буриахи М.С.

ОЦЕНКА ЭКРАНИРУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ СТЕКЛЯННОЙ СИСТЕМЫ $\text{Na}_2\text{O}-\text{B}_2\text{O}_3-\text{V}_2\text{O}_5-\text{MoO}_3$ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОДА GEANT4 И БАЗЫ ДАННЫХ ХСОМ

Аннотация. Представлены результаты оценки экранирующих способностей стёкол по отношению к γ -излучению, содержащих различные соотношения оксида натрия Na_2O , с помощью базы данных ХСОМ и инструментария для моделирования прохождения элементарных частиц через вещество Geant 4 (с использованием методов Монте-Карло) в диапазоне энергий 0,03-6 МэВ. Массовый коэффициент ослабления и слой половинного ослабления были рассчитаны для определения способности ослабления фотонного излучения в стекле.

Ключевые слова: массовый коэффициент ослабления, слой половинного ослабления, имитационный код Geant 4, метод Монте – Карло

Abstract. The results of the evaluation of the shielding glasses from photon and neutron radiation containing different ratios of sodium oxide Na_2O using the Phy-X software and tools for modeling the passage of elementary particles through matter using the Geant 4 Monte Carlo methods in the energy range of 0.03-6 MeV are presented. The mass attenuation coefficient and the half-attenuation layer were calculated to determine the attenuation ability of photon radiation in glass.

Keywords: mass attenuation coefficient, half value layer, Geant 4 simulation code, Monte Carlo method

Введение

В основе системы радиологической защиты лежат три основных принципа – обоснования, нормирования и оптимизации [1]. Дозовые затраты при проведении радиационно-опасных работ снижают посредством воздействия на радиационный параметр, факторы времени, расстояния. При этом принцип оптимизации может быть реализован несколькими путями [2].

Стоимость защиты современных ядерно-технических установок может достигать 20-30% общей стоимости сооружения [3]. В связи с этим особую актуальность приобретает реализация одного из основных принципов радиационной безопасности – принципа оптимизации – применительно к составу биологической защиты. Возможность реализации принципа оптимизации при проектировании состава радиационно-защитных материалов определяется зависимостью поглощающей способности материалов от энергии γ -квантов, испускаемых изотопами, входящими в состав радиоактивного загрязнения. В свою очередь, изотопный состав зависит от многих факторов (типа реакторной установки, режима эксплуатации и т.п.) [4, 5].

Композитные материалы могут являться эффективным средством для защиты от гамма-излучения и позволяют проектировать оптимальный химический состав применительно к планируемым условиям облучения (для конкретного изотопного состава радиоактивных загрязнений) [6]. При этом большое внимание уделяется стеклам. В настоящее время в мире активно ведутся работы по изучению различных стеклянных систем в качестве защиты от гамма-излучения.

Данная работа направлена на исследование радиационно-защитной способности стекол системы $\text{Na}_2\text{O}-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Bi}_2\text{O}_3-\text{MoO}_3$ при различных массовых содержаниях оксида натрия Na_2O и оксида бора B_2O_3 с использованием имитационного кода Geant4 и базы данных NIST XCOM [7]. Для этого были рассчитаны параметры экранирования излучения, такие как массовый коэффициент ослабления μ_m (MAC – mass attenuation coefficient), линейный коэффициент ослабления μ (LAC – linear attenuation coefficient), слой половинного ослабления $\Delta_{0,5}$ (HVT – half value thickness), длина свободного пробега (MFP – mean free path), эффективный атомный номер (Z_{eff} – effective atomic number) в диапазоне энергий 0,03–6 МэВ.

Материалы и методы

Упругие и синтезирующие свойства образцов стекла системы $\text{Na}_2\text{O}-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Bi}_2\text{O}_3-\text{MoO}_3$ были изучены Саддиком [8]. Химический состав каждого элемента и плотность стекла приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Химический состав исследуемых образцов

Образец	Химический состав каждого элемента (вес%)					Плотность (г/см ³)
	Na	B	Bi	Mo	O	
G0	0,228267	0,215009	0	0	0,556724	2,377
G1	0,188186	0,171785	0,132403	0,030392	0,477234	2,7
G2	0,154928	0,141425	0,230117	0,052822	0,420709	3
G3	0,129373	0,118098	0,305196	0,070056	0,377277	3,2
G4	0,109124	0,099613	0,364689	0,083712	0,342862	3,52
G5	0,092683	0,084605	0,412992	0,0948	0,31492	3,7
G6	0,079469	0,070972	0,455282	0,104507	0,28977	3,93
G7	0,06761	0,061717	0,486659	0,111709	0,272305	4,12
G8	0,057831	0,052791	0,515388	0,118304	0,255686	4,38

Geant4 – это широко используемый в мире инструмент моделирования, который предоставляет пользователю огромный набор различных компонентов для моделирования прохождения различных частиц через различные экранирующие

материалы [9]. Он используется во многих областях, связанных с использованием ядерной энергии, радиоактивных частиц и т. д. [10, 11].

Для достижения поставленной задачи потребовалось построить точную трехмерную установку. Геометрия, используемая для моделирования приведена на рис. 1.

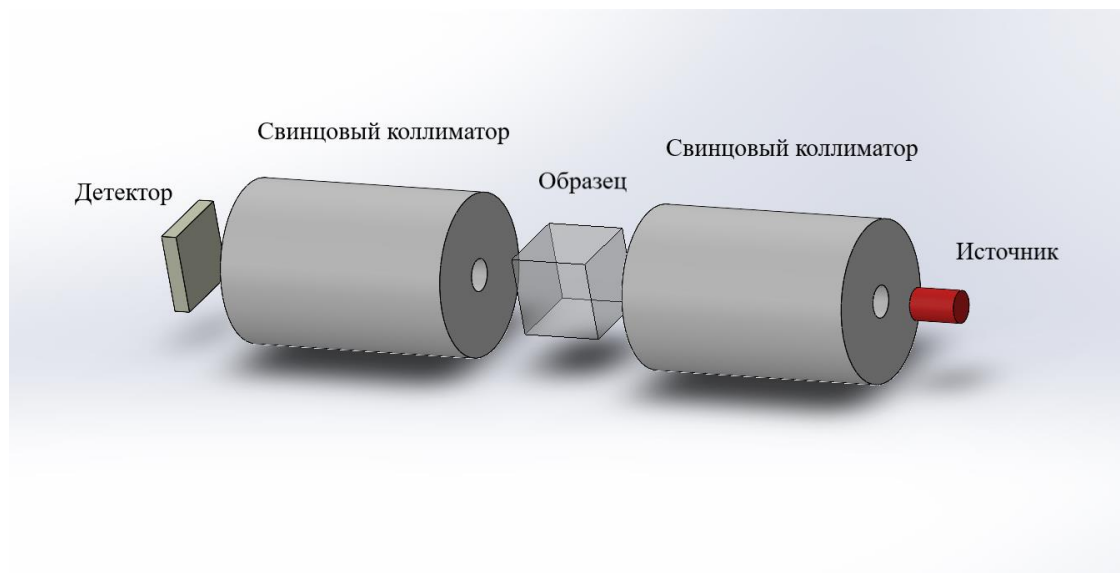


Рисунок 1 – Геометрия, используемая для моделирования

В настоящей работе Geant4 был использован для моделирования свойств экранирования стеклянных образцов (таблица 1) при энергиях фотонов 0,03-6,0 МэВ.

База данных ХСОМ

База данных, определяет сечения и коэффициенты ослабления для следующих процессов: некогерентное рассеяние, когерентное рассеяние, фотоэлектрическое поглощение и образование пар в поле атомного ядра и в поле электронов для любого элемента или соединений при энергиях от 1 кэВ до 100 ГэВ [12, 13]. Обратные же величины этих коэффициентов ослабления являются средними свободными путями между рассеяниями, фотоэлектрическими взаимодействиями или временем между образованиями пар.

Следует отметить некоторые ограничения. Поперечные сечения элементов в базе данных ХСОМ относятся к изолированным нейтральным атомам и не учитывают молекулярные и твердотельные эффекты, которые изменяют поперечные сечения, особенно вблизи краев поглощения. Относительно небольшие поперечные сечения, такие как сечения рассеяния Дельбрюка, двухфотонного комптоновского рассеяния или фотомезонного производства, не учитываются.

Теоретические расчеты основных параметров экранирования

Для определения защитных характеристик выбранных стекол необходимо рассчитать параметры радиационной защиты. Массовый коэффициент ослабления (μ_m) и линейный коэффициент ослабления (μ) вычисляются согласно уравнению (1) и (2) и используется для оценки способности исследуемых образцов стекол ослаблять падающее гамма-излучение [14, 15].

$$\mu_m = \frac{\mu}{\rho} = \sum_i w_i \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i \quad (1)$$

где $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i$ – массовый коэффициент ослабления (МАС) i -го составного элемента, w_i – массовая доля i -го составного элемента.

$$\mu = -\frac{1}{x} \ln\left(\frac{I}{I_0}\right) \quad (2)$$

где I_0 – интенсивность радиоактивного источника без экранирующего материала, I – интенсивность радиоактивного источника с экранирующим материалом, x – толщина экранирующего поглотителя (см) [16].

Слой половинного ослабления ($\Delta_{0,5}$) представляет собой необходимую толщину экранирующего материала, при которой уменьшается интенсивность излучения до половины от начального значения. Длина свободного пробега (MFP) – это среднее расстояние, которое пролетает частица за время между двумя последовательными столкновениями. Образец с наибольшими показателями слоя половинного ослабления $\Delta_{0,5}$ и MFP является наиболее эффективным против излучения. $\Delta_{0,5}$ и MFP рассчитываются с помощью следующих уравнений:

$$\Delta_{0,5} = \frac{\ln 2}{\mu}, \quad (3)$$

$$\text{MFP} = \frac{1}{\mu}, \quad (4)$$

где μ – линейный коэффициент ослабления.

Эффективный атомный номер – атомный номер такого условного простого вещества, для которого передача энергии излучения, рассчитанная на один электрон среды, является такой же, и его можно оценить с помощью следующего соотношения (5) [17].

$$Z_{eff} = \frac{\sum_i f_i A_i (\mu_m)_i}{\sum_j \frac{A_j}{Z_j} (\mu_m)_j} \quad (5)$$

где A_i – атомная масса i -го составного элемента, f_i – массовую долю i -го элемента, Z_i – атомный номер i -го элемента, $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i$ – массовый коэффициент ослабления i -го составного элемента образца стекла соответственно.

Аналогично, эффективная электронная плотность вычисляется с помощью уравнения (6), основанного на уравнении (5) [18].

$$N_{eff} = N_a \frac{Z_{eff}}{\langle A \rangle} \quad (6)$$

где $\langle A \rangle = \sum_i A_i f_i$ – средняя атомная масса, N_a – число Авогадро.

Результаты и их обсуждение

Для всех образцов стёкол были рассчитаны характеристики экранирования от гамма-излучения в диапазоне энергий от 0,03 до 6,0 МэВ. Значения массового коэффициента ослабления и другие экранирующие свойства были смоделированы имитационным кодом Geant4 и рассчитаны теоретически с использованием базы данных ХСОМ (см. рис. 2). Из графиков видно, что моделируемые и теоретические значения близки друг к другу.

Значения (μ_m) для всех образцов стекла G0-G8 уменьшаются с увеличением энергии излучения и с увеличением (моль%) доли Bi_2O_3 - MoO_3 . Массовый коэффициент ослабления (см. рис. 2 *а, б*) достигает своего максимума при низких значениях энергий гамма-фотонов (0,03 МэВ) и варьируются в диапазоне 0,415 и 19,372 ($см^2/г$) для образцов G0 и G8, соответственно. Дальнейший рост энергии излучения приводит к быстрому снижению массового коэффициента ослабления μ_m из-за фотоэлектрического взаимодействия, у которого поперечное сечение изменяется пропорционально $E^{-3.5}$ [19]. При низких энергиях от 0,05 до 3,00 МэВ значения μ_m уменьшаются по мере увеличения энергии излучения, что связано с преобладанием взаимодействия комптоновского рассеяния [29][20]. При энергиях падающего гамма-излучения больше 3,0 МэВ значения (μ_m) уменьшаются очень медленно, что связано с преобладанием процесса образования пар [21]. Как видно из рисунка 2 (*а, б*) образец стекла G8 имеет самые высокие значения (μ_m), это связано с тем, что он содержит концентрацию 20 Bi_2O_3 -20 MoO_3 (моль%).

Также рисунке 2 (*в, г*) показаны значения (μ) для выбранных стекол с энергией падающего гамма-излучения 0,03-6,00 МэВ. Видно, что значения линейного коэффициента ослабления ведут себя так же, как и значения μ_m .

Важно знать оптимальную толщину стекол, которые поглощают и уменьшают интенсивность падающего гамма-излучения. Чтобы это узнать, были рассчитаны значения слоя половинного ослабления $\Delta_{0,5}$ и длины свободного пробега с использованием полученных ранее значений линейного коэффициента ослабления (рис. 3 *а, б*). Эти данные являются важными параметрами для оценки защитных свойств материалов от гамма-излучения.

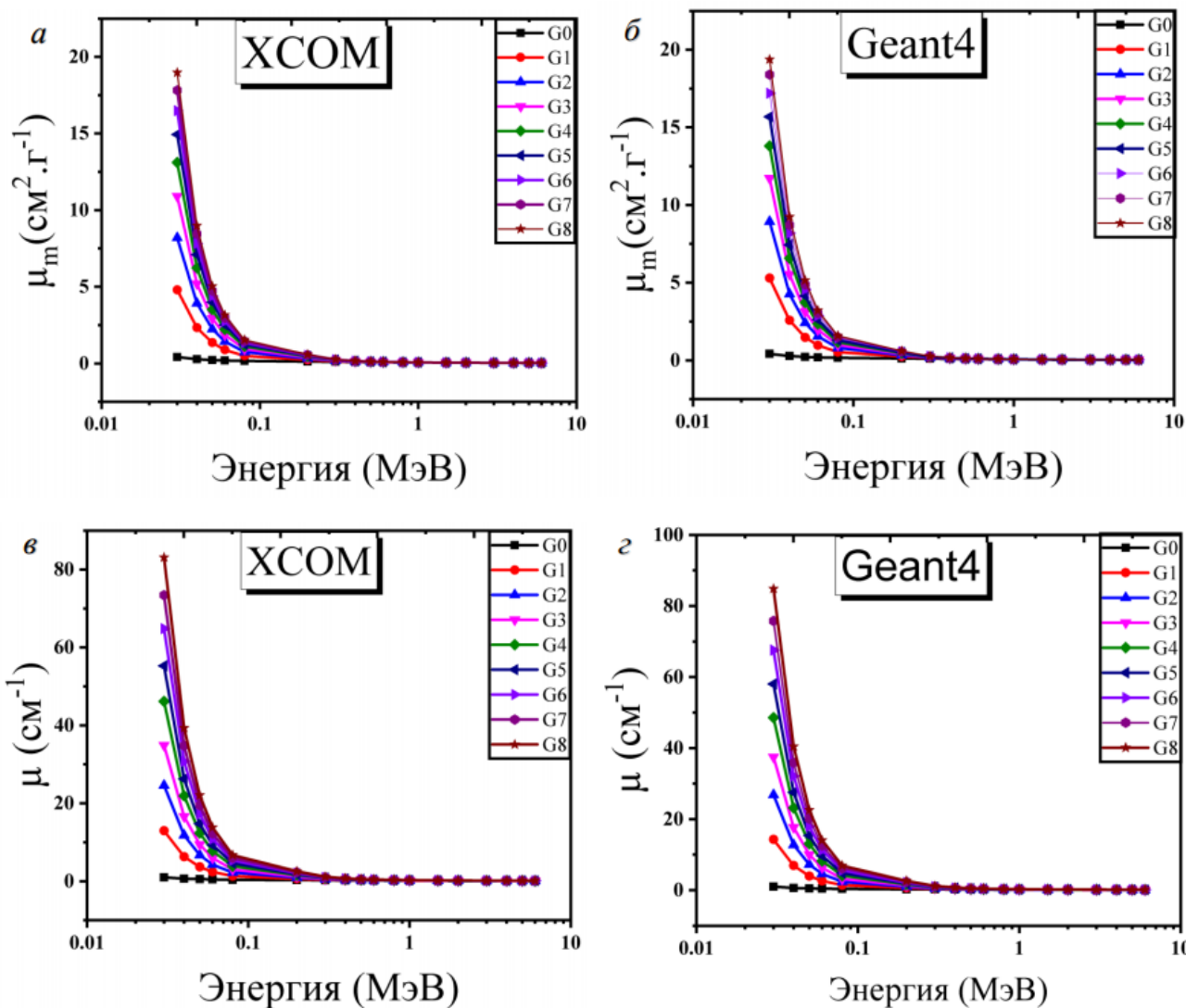


Рисунок 2 – Результаты расчета коэффициентов массового ослабления (μ_m) с помощью XCOM (а) и Geant4 (б) и линейного коэффициента ослабления (μ) с помощью XCOM (в) и Geant4 (г);

На рисунке 3 (а, б) видно, что оба значения увеличиваются по мере роста энергии излучения. Самые высокие значения слоя половинного ослабления $\Delta_{0,5}$ получены при 6,0 МэВ и варьировались между 4,394977 (см) и 11,67577 (см), а значения длина свободного пробега, полученные при 6,0 МэВ, варьировались между 6,341958 (см) и 16,84815(см). Результаты показывают, что $\Delta_{0,5}$ и длина свободного пробега являются самыми низкими для образца стекла с самым высоким содержанием $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-MoO}_3$.

Значения Z_{eff} и N_{eff} с представлены на рисунке 3 (в, г) . Из рисунка 3г видно, что Z_{eff} обладает более высокими значениями при низкой энергии для всех образцов. Такие значения Z_{eff} при низкой энергии обусловлены фотоэлектрическим взаимодействием, которое преобладает в низкоэнергетической области. После этого Z_{eff} резко уменьшается с увеличением энергии гамма-фотона до энергии 2,0 МэВ. Это

резкое уменьшение обусловлено взаимодействием комптоновского рассеяния, которое доминирует в энергетическом поле среды. От 2,0 до 6,0 МэВ значения Z_{eff} начинают увеличиваться, но очень медленно, что связано с образованием пар, а его сечение изменяется с увеличением энергии падающего излучения как $\log(E)$, так и Z^2 [22]. Согласно рис. 3г, самые высокие значения Z_{eff} получены около 0,03 МэВ и варьировались между 8,32 и 66,93, в то время как самые низкие значения Z_{eff} получены при 6,0 МэВ и варьировались между 7,65 и 22,01. Высокая вариация значений Z_{eff} между стеклами $\text{Na}_2\text{O-B}_2\text{O}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3\text{-MoO}_3$ обусловлена изменением химического состава. На рис. 3в показаны значения N_{eff} для выбранных стекол с энергией падающего фотона 0,03-6,00 МэВ, из этого рисунка видно, что эффективная электронная плотность (N_{eff}) ведет себя так же, как и эффективный атомный номер (Z_{eff}).

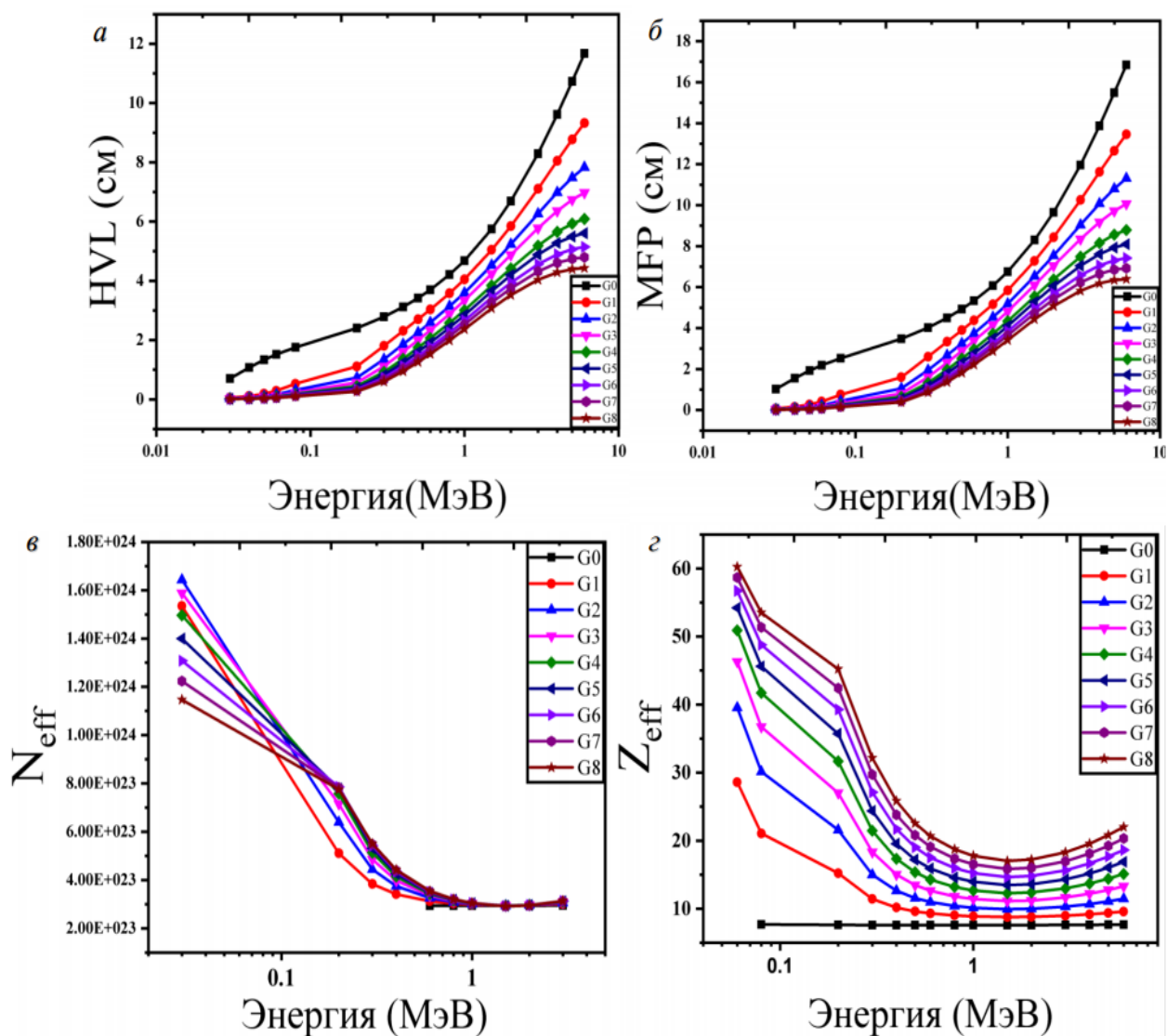


Рисунок 3 – Результаты расчета HVL (а) и MFP (б), эффективного атомного числа (Z_{eff}) (в) и эффективной электронной плотности (N_{eff}) (г)

Заключение

Были рассчитаны экранирующие способности девяти образцов стекол системы $\text{Na}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3\text{-MoO}_3$ с составом компонентов $\text{Na}_{2-2x}\text{B}_{4-4x}\text{Bi}_x\text{Mo}_{0.5x}\text{O}_{7-4x}$ при ($0 \leq x \leq 0,4$ моль%). Массовый коэффициент ослабления моделировался с помощью имитационного кода Geant4 в области энергий гамма-излучения от 0,03 до 6,0 МэВ и достигает максимальных значений для образца G8 с содержанием 20 $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-20MoO}_3$ моль% и колеблется от 0,036 до 19,372 $\text{см}^2/\text{г}$ и энергия гамма-излучения колеблется от 0,03 до 6,0 МэВ. Также линейный коэффициент ослабления был теоретически рассчитан с помощью программы ХСОМ и сравнен со значениями, полученными с помощью кода Geant4 для выбранных стекол. Сравнение показало точное соответствие между моделируемыми и расчетными результатами. Кроме того, для стекол $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3\text{-MoO}_3$ были рассчитаны $\Delta_{0,5}$, длина свободного пробега, Z_{eff} и N_{eff} .

Библиографический список

1. Новиков Г. А. Обеспечение безопасности в области использования атомной энергии : учебник / Г. А. Новиков, О. Л. Ташлыков, С. Е. Щеклеин. – Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2017. – 552 с. – ISBN 978-5-7996-2125-4.
2. Михайлова А. Ф. Пути реализации принципа оптимизации в радиологической защите персонала / А. Ф. Михайлова, О. Л. Ташлыков // Ядерная физика и инжиниринг. – 2018. – Т. 9, № 4. – С. 393–401.
3. Машкович В. П. Защита от ионизирующих излучений / В. П. Машкович, А. В. Кудрявцева. – Москва : Энергоатомиздат, 1995. – 450 с.
4. Оптимизация состава радиационной защиты / О. Л. Ташлыков, С. Е. Щеклеин, В. Ю. Лукьяненко [и др.] // Известия высших учебных заведений. Ядерная энергетика. – 2015. – № 4. – С. 36–42.
5. Экспериментально-теоретическое исследование органометаллических радиационно-защитных материалов, адаптированных к источникам излучения со сложным изотопным составом / И. М. Русских, Е. Н. Селезнев, О. Л. Ташлыков, С. Е. Щеклеин // Ядерная физика и инжиниринг. – 2014. – Т. 5, № 5. – С. 449–455.
6. Оптимизация состава гомогенных радиационно-защитных материалов применительно к планируемым условиям облучения / О. Л. Ташлыков, С. Е. Щеклеин, И. М. Русских [и др.] // Атомная энергия. – 2016. – Т. 121, № 4. – С. 233–236.
7. ZnO–PbO–B₂O₃ glasses as gamma-ray shielding materials. Nuclear Instruments and Methods / Н. Singh, К. Singh, L. Gerward [et al.] // Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2003. – Vol. 207, Iss. 3. – P. 257–262.
8. Saddeek Y. B. Synthesis and several features of the Na₂O–B₂O₃–Bi₂O₃–MoO₃ glasses / Y. B. Saddeek, A. M. Abousehly, S. I. Hussien // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2007. – Vol. 40, Iss. 15. – P. 4674.
9. GEANT4-a simulation toolkit / S. Agostinelli, J. R. Allison, K. Amako [et al.] // Nuclear instruments and methods in physics research section A: Accelerators, Spectrometers,

- Detectors and Associated Equipment. – 2003. – Vol. 506, Iss. 3. – P. 250–303. – URL: <https://geant4.web.cern.ch/> (date of access: 06/03/2021).
10. GEANT4 hadronic physics for space radiation environment / A. V. Ivantchenko, V. N. Ivanchenko, J. M. Q. Molina, S. Incerti // International journal of radiation biology. – 2012. – Vol. 88, Iss. 1/2. – P. 171–175.
 11. Paganini M. CaloGAN: Simulating 3D high energy particle showers in multilayer electromagnetic calorimeters with generative adversarial networks / M. Paganini, L. de Oliveira, B. Nachman // Physical Review D. – 2018. – Vol. 97, Iss. 1. – P. 014021.
 12. Berger M. J. XCOM: Photon cross sections database personal computer. Web Version 1.2 on a personal computer : NBSIR-87-3597 / M. J. Berger, J. H. Hubbell. – 1987. – URL: <http://physics.nist.gov/xcm> (date of access: 30.08.2021).
 13. Shielding features of concrete types containing sepiolite mineral: comprehensive study on experimental, XCOM and MCNPX results / M. I. Sayyed, H. O. Tekin, O. Killcoglu [et al.] // Results in Physics. – 2018. – Vol. 11. – P. 40–45.
 14. Akyildirim H. Radiation shielding features of zirconolite silicate glasses using XCOM and FLUKA simulation code / H. Akyildirim, E. Kavaz, F. I. El-Agawany [et al.] // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2020. – Vol. 545. – P. 120245.
 15. Assessment of gamma-rays and fast neutron beam attenuation features of Er₂O₃-doped B₂O₃-ZnO-Bi₂O₃ glasses using XCOM and simulation codes (MCNP5 and Geant4) / G. Lakshminarayana, M. G. Dong, A. Kumar [et al.] // Applied Physics A. – 2019. – Vol. 125, Iss. 11. – P. 1–14.
 16. Xingcai L. Effectively predict the solar radiation transmittance of dusty photovoltaic panels through Lambert-Beer law / L. Xingcai, N. Kun // Renewable energy. – 2018. – Vol. 123. – P. 634–638.
 17. Radiation shielding parameters of BaO-Nb₂O₅-P₂O₅ glass system using MCNP₅ code and XCOM software / M. I. Sayyed, Z. Y. Khattari, A. Kumar [et al.] // Materials Research Express. – 2018. – Vol. 5, Iss. 11. – P. 115203.
 18. Exploration of gamma radiation shielding features for titanate bismuth borotellurite glasses using relevant software program and Monte Carlo simulation code / G. Lakshminarayana, A. Kumar, M. Dong [et al.] // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2018. – Vol. 481. – P. 65–73.
 19. Issa S. A. Effective atomic number and mass attenuation coefficient of PbO-BaO-B₂O₃ glass system / S. A. Issa // Radiation Physics and Chemistry. – 2016. – Vol. 120. – P. 33–37.
 20. Comparative studies of different concretes on the basis of some photon interaction parameters / U. Kaur, J. K. Sharma, P. S. Singh, T. Singh // Applied Radiation and Isotopes. – 2012. – Vol. 70, Iss. 1. – P. 233–240.
 21. Investigations of radiation shielding using Monte Carlo method and elastic properties of PbO-SiO₂-B₂O₃-Na₂O glasses / S. A. Issa, Y. B. Saddeek, H. O. Tekin [et al.] // Current Applied Physics. – 2018. – Vol. 18, Iss. 6. – P. 717–727.
 22. Effective atomic numbers for some calcium-strontium-borate glasses / R. Sharma, J. Sharma, T. Singh // Annals of Nuclear Energy. – 2012. – Vol. 45. – P. 144–149.