



ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ/CONDENSED MATTER PHYSICS

DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2025.162.76> EDN: QQNRWE

МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТА ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ В ГИБРИДНЫХ ПЕРОВСКИТАХ, ДОПИРОВАННЫХ ЕВРОПИЕМ

Научная статья

Новоселов И.Э.^{1,*}, Жидков И.С.²¹ORCID : 0009-0005-7078-2663;²ORCID : 0000-0001-8727-4730;^{1,2}Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Российская Федерация²Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Российская Федерация

* Корреспондирующий автор (i.e.novoselov[at]urfu.ru)

Предложена: 02.12.2025; Принята: 08.12.2025; Опубликовано: 17.12.2025

Аннотация

В работе исследовано взаимодействие ускоренных электронов, протонов и нейтронов с двухкатионным гибридным перовскитом CsFAPbI₃, содержащим частичное замещение свинца на Eu. С использованием пакета GEANT4 выполнено моделирование транспорта частиц и распределения энерговыделения в образцах толщиной 1 см. Показано, что электроны с энергией 10 МэВ и протоны с энергией 18 МэВ полностью тормозятся в материале, формируя выраженные области поглощённой энергии, тогда как нейтроны 5 МэВ демонстрируют слабое взаимодействие с образцом. Изменение концентрации Eu в диапазоне 1–10% не оказывает существенного влияния на макроскопические характеристики процессов. Полученные результаты дают оценку распределения и величины энергетических потерь.

Ключевые слова: гибридные галидные перовскиты, Монте-Карло моделирование, GEANT4, взаимодействие излучения с веществом, частичное замещение катиона.

MONTE CARLO SIMULATION OF HIGH-ENERGY PARTICLE TRANSPORT IN HYBRID PEROVSKITES DOPED WITH EUROPIUM

Research article

Novoselov I.E.^{1,*}, Zhidkov I.S.²¹ORCID : 0009-0005-7078-2663;²ORCID : 0000-0001-8727-4730;^{1,2}Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russian Federation²Institute of Metal Physics, Ural Branch of the RAS, Ekaterinburg, Russian Federation

* Corresponding author (i.e.novoselov[at]urfu.ru)

Suggested: 02.12.2025; Accepted: 08.12.2025; Published: 17.12.2025

Abstract

The work studies the interaction of accelerated electrons, protons, and neutrons with the double-cation hybrid perovskite CsFAPbI₃, containing partial substitution of lead with Eu. Using the GEANT4 package, particle transport and energy release distribution were simulated in 1 cm thick samples. It is shown that electrons with an energy of 10 MeV and protons with an energy of 18 MeV are completely decelerated in the material, forming pronounced areas of absorbed energy, while 5 MeV neutrons show weak interaction with the sample. A change in Eu concentration in the range of 1–10% does not significantly affect the macroscopic characteristics of the processes. The obtained results provide an evaluation of the distribution and magnitude of energy losses.

Keywords: hybrid halide perovskites, Monte Carlo modelling, GEANT4, radiation-matter interaction, partial cation substitution.

Введение

В последние годы перовскитные соединения оказались в центре внимания оптоэлектронного сообщества благодаря набору характеристик, который редко встречается у других классов полупроводниковых материалов. Они эффективно поглощают свет, позволяют гибко регулировать ширину запрещённой зоны, отличаются высокой фотoluminesцентной отдачей и одновременно остаются технологически простыми и химически адаптивными системами [1], [2]. Такой баланс свойств ускорил прогресс в создании перовскитных фотопреобразователей, светодиодов и сенсоров, причём достигнутая эффективность перовскитных солнечных модулей уже превысила 26% [3]. Благодаря малой массе, высокой энергоотдаче и низким производственным затратам эти материалы рассматриваются и как потенциальная основа для энергетики космических аппаратов, где требования к удельным параметрам особенно жёсткие [4], [5].

Однако эксплуатация перовскитов в космосе сопряжена с рядом факторов, которые могут резко ограничивать их ресурс. Помимо перепадов температуры и жёсткого ультрафиолета, ключевым деструктивным агентом остаются

потоки ионизирующих частиц — электронов, протонов, нейтронов и тяжёлых ядер. Их взаимодействие с материалом инициирует образование вакансий и смещения атомов, вызывает локальные электронные возбуждения, а продукты вторичных процессов дополнительно усиливают радиационные повреждения. Это приводит к падению фотоэлектрических характеристик, увеличению токов утечки и возникновению стабильных дефектных областей [6], [7], [8], [9]. В результате даже при всех технологических преимуществах гибридные галидные перовскиты часто оказываются недостаточно устойчивыми к высокоэнергетическому облучению.

В настоящем исследовании с применением метода Монте-Карло и программного комплекса GEANT4 [10], [11] выполнено моделирование проникновения и энерговыделения ускоренных электронов, протонов и нейтронов в двухкатионном перовските CsFAPbI₃, в котором часть ионов свинца замещена европием. Данная модификация ранее демонстрировала повышенную стабильность при воздействии потоков электронов [12], что делает её перспективным объектом анализа в контексте радиационной стойкости.

Методы и принципы исследования

Для оценки радиационных эффектов, возникающих при воздействии ускоренных электронов, нейтронов и протонов на двухкатионный гибридный галидный перовскит с частичным замещением В-катиона на Eu, была использована вычислительная среда GEANT4. Расчёты выполнялись для объёмных образцов толщиной 1 см. Реальные перовскитные слои в солнечных элементах имеют толщину порядка 200–500 нм, однако моделирование таких малых толщин требует либо экстремально больших потоков частиц, либо недостижимо длительного расчётного времени. GEANT4 допускает моделирование потоков вплоть до $9,9 \cdot 10^9$ частиц/см², но использование такого значения приводит к резкому росту вычислительной нагрузки. Увеличение толщины материала на четыре порядка — от сотен нанометров до сантиметра — позволяет повысить вероятность взаимодействий примерно в $2 \cdot 10^6$ раз. Поэтому выбор толщины 1 см при потоке 10^5 частиц/см² обеспечивает статистическую эквивалентность облучению тонкого ($\approx 0,5$ мкм) активного слоя при потоке порядка 10^{11} частиц/см².

Состав материала задавался на основе элементных характеристик: атомного номера и массы, массовых долей компонентов, плотности и геометрических размеров образцов.

Для корректного описания взаимодействий использовался расширенный перечень электромагнитных и адронных процессов, рассчитанных на высокоточные задачи в широком диапазоне энергий. Комптоновское рассеяние моделировалось в соответствии с формализмом Клейна–Нишины, переходящим при низких энергиях в томсоновский предел и учитывающим релятивистские поправки на высоких энергиях. Для множественного рассеяния использовалась модель G4UrbanMscModel, обеспечивающая более реалистичное описание отклонений траекторий в плотных средах.

В модуле GammaNuclearPhysics были определены гамма-ядерные реакции и энергетические границы, при превышении которых выбор модели переключался с G4LowGammaNuclearModel ($E = 0 - E_{\max 1}$) на G4CascadeInterface ($E = E_{\max 1} - E_{\max 2}$). В HadronElasticPhysicsHP задавались параметры упругого взаимодействия нейтронов.

PhysicsList включал:

- набор электромагнитных процессов G4EmStandardPhysicsWVI, предназначенный для высокоточного описания прохождения заряженных частиц и фотонов; модель G4WentzelVIModel применялась для множественного и одиночного рассеяния e^+/e^- при любых энергиях; ионная ионизация рассчитывалась по модели Линдхарда–Соренсена;
- ограничение минимального шага генерации вторичных частиц;
- процессы переноса и распада частиц (G4Decay и G4RadioactiveDecayBase);
- включённый расчёт CSDARange, позволяющий определять средний пробег заряженной частицы без учёта рассеяния;
- адронные процессы: упругое и неупругое взаимодействие (G4HadronElasticPhysicsHP, G4HadronInelasticQBBC), аналогичные процессы для ионов (G4IonElasticPhysics и G4IonPhysicsXS), высокоточное описание нейтронов (G4NeutronCrossSectionXS, G4HadronPhysicsShieldingLEND), остановка адронов (G4StoppingPhysics), гамма-ядерные реакции (GammaNuclearPhysics).

Дополнительно подключались процессы переноса и распада частиц (G4Decay, G4RadioactiveDecayBase).

В классе SteppingAction рассчитывались полная поглощённая энергия и неионизационные потери с использованием функций GetTotalEnergyDeposit и GetNonIonizingEnergyDeposit. При необходимости для NIEL можно применять fNIELCalculator с данными по тормозным способностям различных материалов или класс G4ScreenedNuclearRecoil с функцией NIELPartitionFunction (модель Линхарда–Робинсона), что важно для высокоэнергетических частиц — протонов, α -частиц, тяжёлых ионов.

Используемые энергии электронов (10 МэВ) и протонов (18 МэВ) соответствовали доступным экспериментальным параметрам. Нейтронная энергия 5 МэВ выбрана как характерная для Pu-Be источников и попадает в наиболее вероятный для околоземных орбит диапазон 0,1–15 МэВ [13], [14].

На рис. 1 и 2 приведены распределения энергии и глубины проникновения 10-МэВ электронов в CsFAPbI₃ с содержанием Eu 1–10%. Варьирование доли европия практически не отражается на характеристиках пробега частиц. Длина трека большинства электронов превышает 10 см — они способны пройти материал насквозь, многократно рассеиваясь и увеличивая общий путь. Тем не менее распределение по глубине (рис. 2а) показывает, что значительная часть электронов полностью теряет энергию и не покидает пределы образца. Длина свободного хода может достигать сотен микрон (рис. 1b), количество актов рассеяния обычно составляет 30–100 (рис. 1с). Частицы, проходящие через образец, теряют не менее 4 МэВ (рис. 1е), при этом неионизационные потери остаются ниже ~ 1 кэВ (рис. 1d). Максимум энерговыделения приходится на глубину 2–5 см (рис. 2b,c). Энергии вторичных частиц — как нейтральных (преимущественно γ -квантов), так и заряженных — не превышают нескольких сотен кэВ (рис. 1f,g).



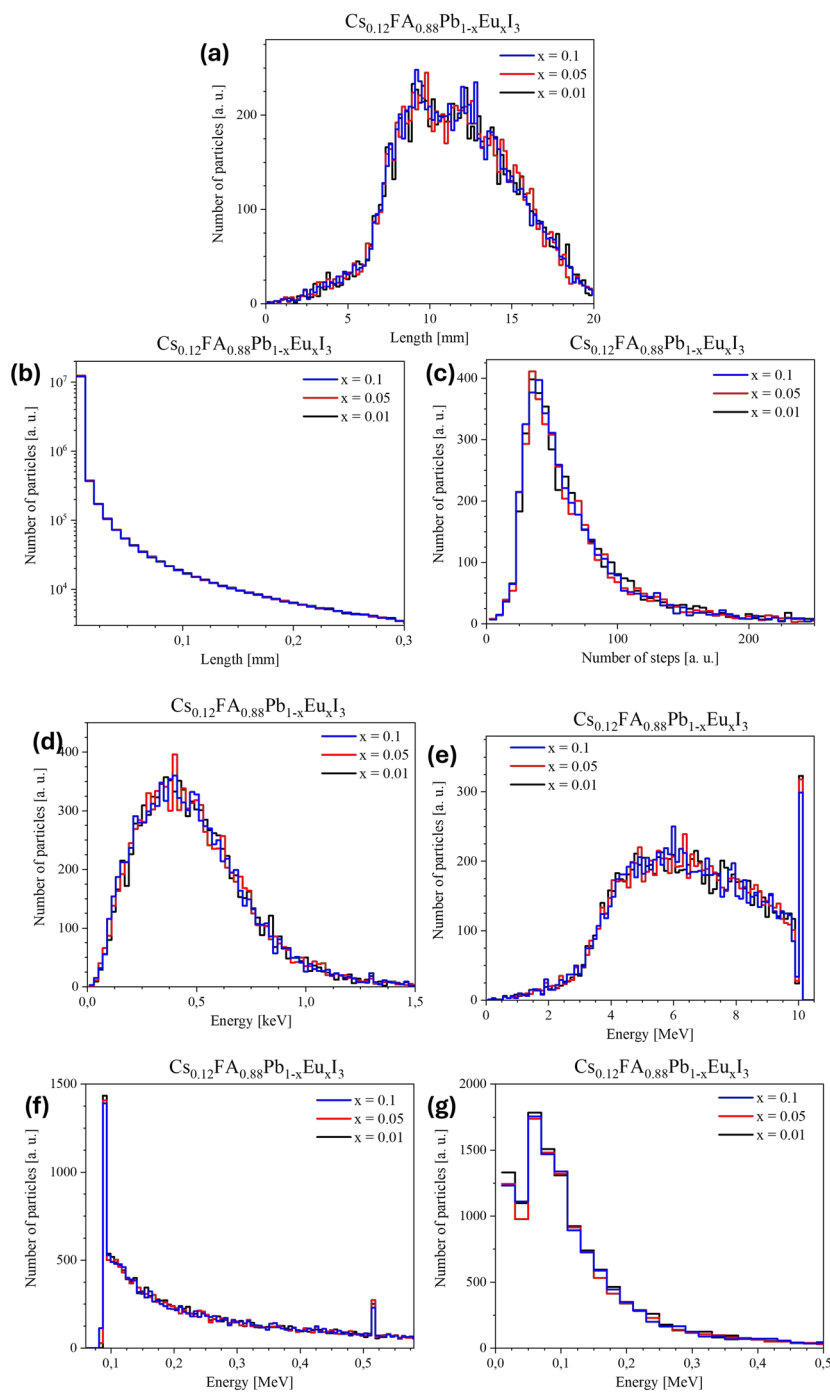


Рисунок 1 - Результаты воздействия электронов с энергией 10 МэВ на гибридный перовскит $\text{Cs}_{0.12}\text{FA}_{0.88}\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{I}_3$ ($x = 0,01, 0,05, 0,1$):

а – длина треков электронов; б – длина шага моделирования; в – число шагов моделирования; д – неионизационные потери; е – общие потери энергии электронами; ф – энергия вторичных нейтральных частиц; г – энергия вторичных заряженных частиц

DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2025.162.76.1>

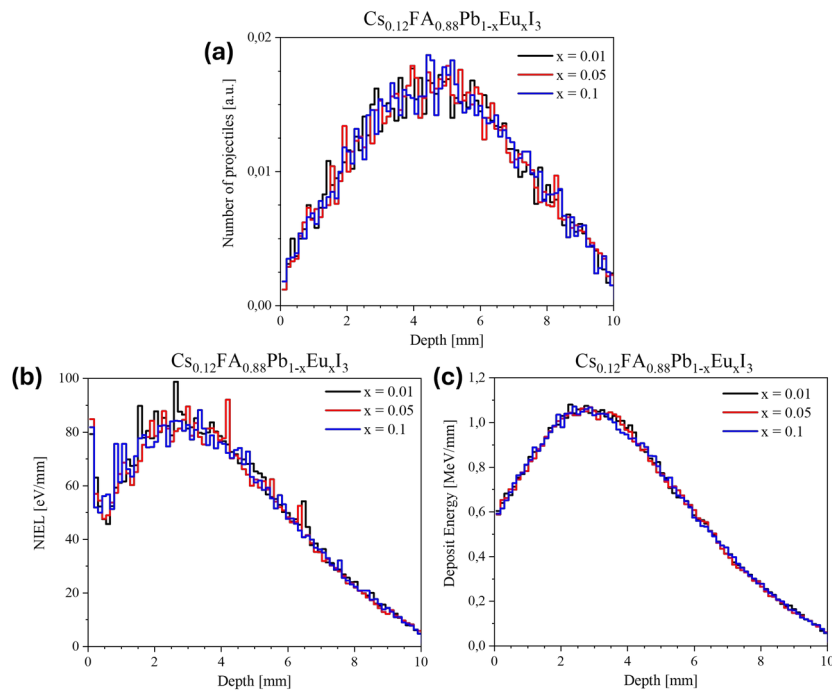


Рисунок 2 - Результаты воздействия электронов с энергией 10 МэВ на гибридный перовскит $\text{Cs}_{0.12}\text{FA}_{0.88}\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{I}_3$ ($x = 0.01, 0.05, 0.1$):

a – глубина пробега электронов; b – распределение неионизационных потерь энергии электронами по глубине; c – распределение потерь энергии электронами по глубине

DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2025.162.76.2>

Аналогичная картина наблюдается и для протонов: частицы с энергией 18 МэВ полностью останавливаются в материале, причём их пробег не превышает ~2 см; максимум поглощённой энергии локализован в области около 1,65 см (рис. 3).

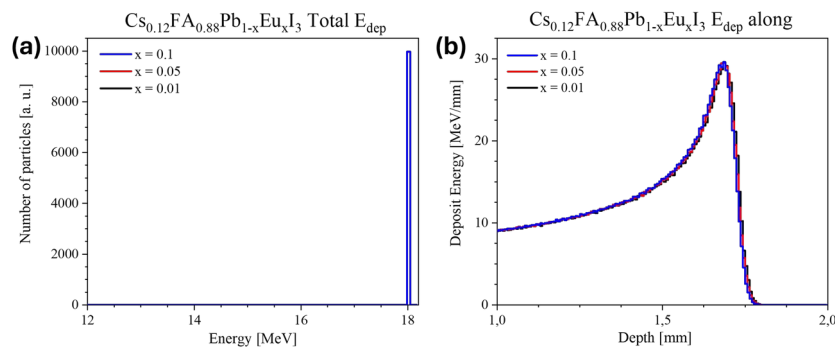


Рисунок 3 - Результаты воздействия протонов с энергией 18 МэВ на гибридный перовскит $\text{Cs}_{0.12}\text{FA}_{0.88}\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{I}_3$ ($x = 0.01, 0.05, 0.1$):

a – общие потери энергии протонами; b – распределение потерь энергии протонами по глубине

DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2025.162.76.3>

Рассмотрим теперь воздействие нейтронов. Несмотря на наличие в составе образцов лёгких элементов с большим сечением рассеяния нейтронов (H, C), в рассматриваемом случае нейтроны практически не претерпевают рассеяния (рис. 4–5).

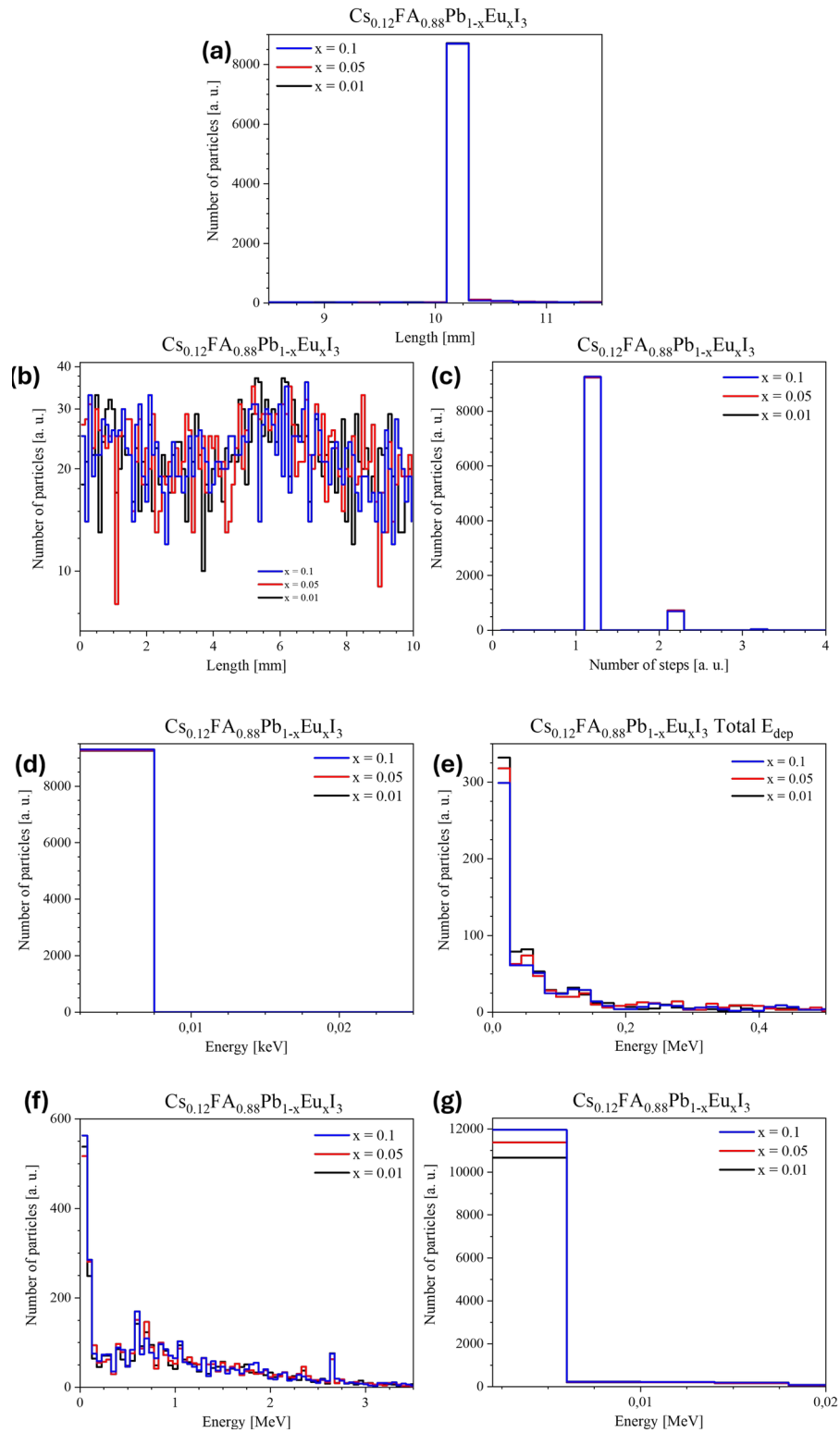


Рисунок 4 - Результаты воздействия нейтронов с энергией 5 МэВ на гибридный перовскит $\text{Cs}_{0.12}\text{FA}_{0.88}\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{I}_3$ ($x = 0.01, 0.05, 0.1$):

a – длина треков нейтронов; b – длина шага моделирования; c – число шагов моделирования; d – неионизационные потери; e – общие потери энергии нейтронами; f – энергия вторичных нейтральных частиц; g – энергия вторичных заряженных частиц

DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2025.162.76.4>

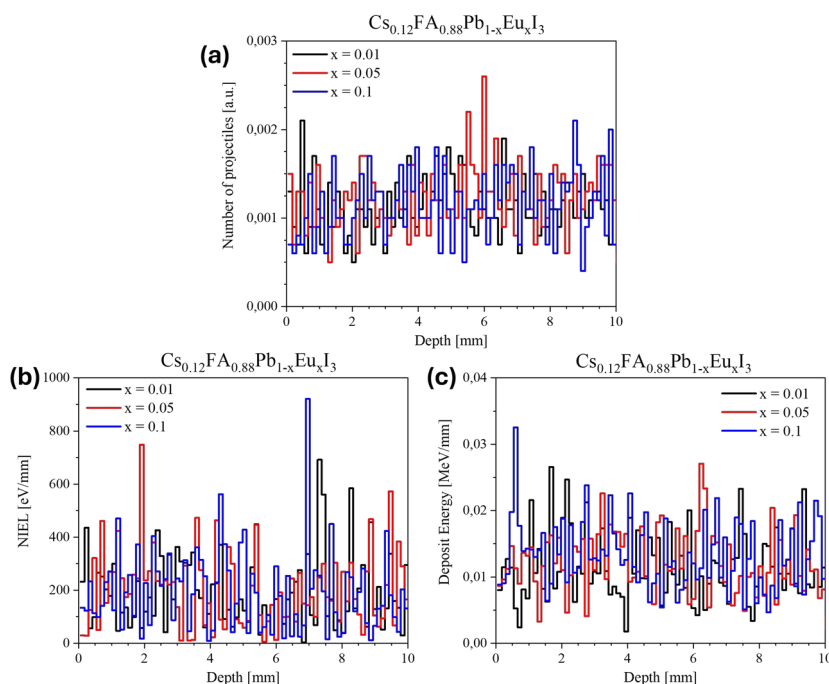


Рисунок 5 - Результаты воздействия нейтронов с энергией 5 МэВ на гибридный перовскит $\text{Cs}_{0.12}\text{FA}_{0.88}\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{I}_3$ ($x = 0.01, 0.05, 0.1$):

a – глубина пробега нейтронов; b – распределение неионизационных потерь энергии нейтронами по глубине; c – распределение потерь энергии нейтронами по глубине

DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2025.162.76.5>

Все нейтроны полностью покидают образец практически не испытывая столкновений, выделяемая энергия равномерно распределена по глубине и не превышает 200 кэВ на одну частицу. Отметим, что в отличие от предыдущих случаев могут образовываться высокоэнергетические гамма-кванты (до 2 МэВ), однако их число невелико. Энергия же вторичных заряженных частиц оказывает меньше 10 кэВ, что явно недостаточно для создания радиационных повреждений.

Заключение

Проведённое моделирование позволило количественно оценить характер энергетических потерь электронов, протонов и нейтронов в двухкатионном перовските CsFAPbI_3 с частичным замещением свинца на Eu. Результаты показывают, что при энергиях электроны 10 МэВ и протонов 18 МэВ полностью теряют энергию в материале, формируя выраженные области энерговыделения в глубине образца, тогда как нейтроны с энергией 5 МэВ практически не взаимодействуют с веществом. Изменение концентрации Eu в изученном диапазоне не оказывает заметного влияния на макроскопические параметры взаимодействия частиц.

Однако расчёты в GEANT4 описывают только транспорт частиц, энерговыделение и виды радиационных эффектов взаимодействия излучения с веществом и не позволяют напрямую определить образование точечных дефектов, динамику решётки и эволюцию повреждений. Поэтому полученные данные необходимо рассматривать как первый уровень анализа радиационной стойкости. Для оценки микроскопических последствий облучения требуется дополнить работу методами атомистического моделирования — расчётами DFT для определения энергий дефектообразования и миграции, а также молекулярно-динамическими симуляциями каскадов смещений.

Финансирование

Исследование выполнено при поддержке РФФ (грант 22-61-00047).

Конфликт интересов

Не указан.

Рецензия

Все статьи проходят рецензирование. Но рецензент или автор статьи предпочли не публиковать рецензию к этой статье в открытом доступе. Рецензия может быть предоставлена компетентным органам по запросу.

Funding

The study was supported by the Russian Science Foundation (grant 22-61-00047).

Conflict of Interest

None declared.

Review

All articles are peer-reviewed. But the reviewer or the author of the article chose not to publish a review of this article in the public domain. The review can be provided to the competent authorities upon request.

**Список литературы на английском языке / References in English**

1. Zhang L. Advances in the application of perovskite materials / L. Zhang, L. Mei, K. Wang et al. // Nano-Micro Letters. — 2023. — 15. — P. 177.
2. Bati A.S. Next-generation applications for integrated perovskite solar cells / A.S. Bati, Y.L. Zhong, P.L. Burn et al. // Communications Materials. — 2023. — 4. — P. 2.
3. Shen W. Highlights of mainstream solar cell efficiencies in 2024 / W. Shen, Y. Zhao, F. Liu // Frontiers in Energy. — 2025. — 19. — P. 1–10.
4. Tu Y. Perovskite solar cells for space applications: progress and challenges / Y. Tu, J. Wu, G. Xu et al. // Advanced Materials. — 2021. — 33. — P. 2006545.
5. Romano V. Advances in perovskites for photovoltaic applications in space / V. Romano, A. Agresti, R. Verduci et al. // ACS Energy Letters. — 2022. — 7. — P. 2490–2514.
6. Aguiar Y.Q.D. Radiation Environment and Their Effects on Electronics / Y.Q.D. Aguiar, F. Wrobel, J.L. Autran et al. — Cham: Springer International Publishing, 2024. — 141 p.
7. Zhang B. Chemical Stability of Metal Halide Perovskite Detectors / B. Zhang, B. Xue, S. Xiao et al. // Inorganics. — 2024. — 12. — P. 52.
8. Lang F. Influence of radiation on the properties and the stability of hybrid perovskites / F. Lang, O. Shargaieva, V.V. Brus et al. // Advanced Materials. — 2018. — 30. — P. 1702905.
9. Dang Z. Transformation and degradation of metal halide perovskites induced by energetic electrons and their practical implications / Z. Dang, Y. Luo, Y. Xu et al. // Nano Futures. — 2021. — 5. — P. 032001.
10. Allison J. Recent developments in Geant4 / J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2016. — 835. — P. 186–225.
11. Agostinelli S. GEANT4—a simulation toolkit / S. Agostinelli, J. Allison, K. Amako et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2003. — 506. — P. 250–303.
12. Ustinova M.I. A europium shuttle for launching perovskites to space: using $\text{Eu}^{2+}/\text{Eu}^{3+}$ redox chemistry to boost photostability and radiation hardness of complex lead halides / M.I. Ustinova, L.A. Frolova, A.V. Rasmetyeva et al. // Journal of Materials Chemistry A. — 2024. — 12. — P. 13219–13230.
13. Morris D.J. Neutron measurements in near-Earth orbit with COMPTEL / D.J. Morris, H. Aarts, K. Bennett et al. // J. Geophys. Res. Space Phys. — 1995. — 100. — P. 12243–12249.
14. Claret A. FLUKA calculation of the neutron albedo encountered at low Earth orbits / A. Claret, M. Brugger, N. Combier et al. // IEEE Trans. Nucl. Sci. — 2014. — 61. — P. 3363–3370.