

AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI

Əlyazma hüququnda

NANO-Si+H₂O SİSTEMİNDƏ GEDƏN RADİASİON- HETEROGEN PROSESLƏRİN TƏDQIQI

İxtisas: 2225.01- Radiasiya materialşünaslığı

Elm sahəsi: Fizika

İddiaçı: **Sevinc Məmməd həsən qızı Bəşirova**

Fəlsəfə doktoru elmi dərəcəsi
almaq üçün təqdim edilmiş dissertasiyanın

AVTOREFERATI

Bakı – 2021

Dissertasiya işi, Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Radiasiya Problemləri İnstitutunun “Heterogen proseslərin radiasiya kimyası” laboratoriyası və Azərbaycan Müdafiə Sənayesi Nazirliyi Milli Aerokosmik Agentliyin “Radioaktiv-çirklənmələrə nəzarət ölçü cihazları” şöbəsində yerinə yetirilmişdir.

Elmi rəhbərlər:

Fizika elmləri doktoru, professor
Adil Polad oğlu Abdullayev

Kimya elmləri namizədi, dosent
Yadigar Dövlət oğlu Cəfərov

Rəsmi opponentlər:

Əməkdar elm xadimi, Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor

Eldar Mehralı oğlu Qocayev

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor

Namiq Abduləvvəl oğlu Əhmədov

Fizika elmləri doktoru, dosent

Nüşabə Nübarək qızı Hacıyeva

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Ali Attestasiya Komissiyasının AMEA Radiasiya Problemləri İnstitutu nəzdində fəaliyyət göstərən **FD 1.21** Dissertasiya Şurası

Dissertasiya şurasının sədri: AMEA-nın müxbir üzvü,

Fizika-riyaziyyat elmlər doktoru, professor

_____ **Oqtay Əbil oğlu Səmədov**

Dissertasiya şurasının elmi katibi:

fizika üzrə fəlsəfə doktoru

_____ **Müslüm Əhməd oğlu Məmmədov**

Elmi seminarın sədri:

fizika üzrə elmlər doktoru, dosent

_____ **Mətanət Əhməd qızı Mehrabova**

İŞİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKASI

Mövzunun aktuallığı. Son zamanlar sənayenin sürətli inkişafı ilə əlaqədar olaraq təbii enerji ehtiyatlarından neftə və qaza olan tələbat günü-gündən artmaqdadır. Neft və qazdan istifadə həm iqtisadi, həm də ekoloji cəhətdən müasir dövrün tələblərinə cavab vermədiyinə görə, yeni növ enerjiyə keçid günün aktual problemlərdən biri olaraq qalmaqdadır. Bu problemlərin həll yollarından biri də alternativ enerjiden (su, külək, günəş, bio, hidrotermal, nüvə və s.) istifadədir. Alternativ enerji mənbələrindən ən böyük ehtiyata malik olanı və ekoloji təmiz hesab ediləni nüvə enerjisidir. Nüvə enerjisinin alınması və ondan səmərəli istifadə yollarından biri də hidrogen enerjisinə keçiddir.

Bu məqsədlə də ionlaşdırıcı şüaların təsiri ilə müxtəlif hissəcik ölçülü və məsələli materialların (metallar, metal oksidləri və s.) su ilə təmasda yaradılan sistemlərinə suyun radiasiya-heterogen parçalanmasından molekulyar hidrogenin alınması üsulundan istifadə edilmişdir. Qeyd olunan sistem üçün optimal rejimin seçilməsi istiqamətində həm Respublikamızda, həm də digər ölkələrdə aparılan elmi tədqiqat işlərinin nəticələrinin təhlili onu deməyə imkan verir ki, bu sahə son zamanlar tədqiqatçıların diqqət mərkəzindədir. Bununla yanaşı həmin sistemlərdə ionlaşdırıcı şüaların təsiri ilə gedən proseslərin fiziki, fiziki-kimyəvi və kimyəvi mərhələlərində hər iki fazada əmələ gələn aralıq məhsulların və məhsulların alınması mexanizminin öyrənilməsi zərurəti yaranır.

Suyun radiasiya-heterogen parçalanmasının elmi əsasını hazırlamaqla onun termiki və radiasiya-termiki parçalanmasından alınan H_2 , O_2 və H_2O_2 molekulyar məhsulların öyrənilməsiylə soyuducu, ləngidici və enerji daşıyıcı kimi sudan istifadə olunan nüvə reaktorlarının təhlükəsizliyi təmin olunur. Nüvə yanacağı tullantılarının saxlanması üçün istifadə olunan konteyner daxilində nüvə çevrilməsindən alınan ionlaşdırıcı şüaların və temperaturun birgə təsiri ilə verilmiş sistem üçün təhlükəli sayılan molekulyar H_2 , O_2 və H_2O_2 məhsulları alınır. Bu sistemlərin təhlükəsizliyi günümüzün aktual məsələlərindəndir.

Tədqiqatın məqsəd və vəzifələri. Təqdim olunan dissertasiya işinin əsas məqsədi $d=50, 100$ və $300\div 500$ nm hissəcik ölçülü - Si/H₂O yaradılan sistemlərdə suyun radiasiya-heterogen parçalanmasından molekulyar hidrogenin alınma qanunauyğunluğunun müəyyən edilməsindən ibarətdir.

Bu məqsədə çatmaq üçün aşağıdakı məsələlər həll edilmişdir:

- Birqat toqquşma, addımlama və Monte-Karlo metodlarından istifadə edərək, Mathcad proqramı əsasında model qurularaq kiçik enerjili elektronlarla silisium atomları arasında qeyri-elastiki toqquşmada prosesinin fiziki mərhələlərində - müxtəlif molekulyar orbitalların (MO) birbaşa birqat ionlaşmasından alınan elektron-deşik cütü və müxtəlif elektron-həyacanlanma halları kimi suyun parçalanmasında rolunu oynayan aktiv aralıq məhsulların energetik çıxımları riyazi model əsasında hesablanması;

- Həmin model əsasında, γ -kvantların təsiri ilə nanohissəcik daxilində əmələ gələn müxtəlif enerjili elektronların hissəcik səthindən maye fazaya (su daxilində) emissiya faizinin hissəcik ölçüsündən və onun kinetik enerjisindən asılılığı;

- γ -kvantların təsiri ilə 50, 100 və 300÷500 nm hissəcik ölçülü - Si/H₂O adsorbsiyalı sistemlərdə suyun radiasiya-heterogen parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürəti və energetik çıxımının hissəcik ölçüsündən və hissəcik səthində adsorbsiya olunan suyun dolma dərəcəsindən asılılığı;

- γ -kvantların təsiri ilə $V=5$ ml su daxilində vibrator vasitəsilə suspenziya etdirilən $d=50, 100$ və $300\div 500$ nm hissəcik ölçülü Si-un əlavəsilə yaradılan sistemlərdə suyun radiasiya-heterogen parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürəti və energetik çıxımına Si-un kütləsi və hissəcik ölçüsünün təsiri;

- $d=50$ nm hissəcik ölçülü nano - Si/H₂O yaradılan sistemdə suyun termiki və γ -kvantların təsiri ilə radiasiya-termiki parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürəti və energetik çıxımının sistemin temperaturu və reaksiya mühitində su buxarının sıxlığından asılılığı müəyyən edilmişdir.

Tədqiqat metodları. Dissertasiya işinin nəticələri yüksək dəqiqlik və həssaslığa malik “Agilent-7890” və “ЦБЕТ-102” qaz

xromatoqraflarından, infraqırmızı (İQ)- spektrometri, atom qüvvə mikroskopu (AQM), fiziki-kimyəvi və kimyəvi analiz metodlarından istifadə edilməklə aparılmışdır. Nəzəri hesablamalar (kinetik təhlil, riyazi modelləşdirmə) müasir tələblərə cavab verən Mathcad kompüter proqramı vasitəsilə aparılmışdır. Fiziki kəmiyyətlərin təcrübə və model əsasında hesablamadan alındığı qiymətlərinin uyğunluğu riyazi modelləşmənin yetərli olduğunu sübut etmişdir.

Müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar:

1. Kiçik enerjili elektronlarla Si atomları arasında qeyri-elastiki toqquşmadan alınan, nano - Si/H₂O sistemlərində suyun radiasiya-heterogen parçalanmasından molekulyar hidrogenin alınmasında rolunu olan qeyri-tarazlıqlı enerji daşıyıcılarının (elektronlar, dəşiklər və eksitonlar) müəyyənləşdirilməsi;

2. γ -kvantların təsiri ilə nano - Si/H₂O yaradılan suspenziyalı sistemlərdə hissəcik daxilində əmələ gələn və onun səthindən su daxilinə emissiya olunan elektronların suyun parçalanmasından molekulyar hidrogenin alınmasında rolunun müəyyənləşdirilməsi;

3. γ -kvantların təsiri ilə, nano-Si/H₂O yaradılan sistemlərdə suyun parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin energetik çıxımına kütlə, ölçü, hissəcik səthində suyun dolma dərəcəsi və temperatur effektlərinin təsirinin müəyyənləşdirilməsidir.

Tədqiqatın elmi yeniliyi:

1. Addımlama, birqat toqquşma və Monte-Karlo metodlarından istifadə edərək, kiçik enerjili elektronlarla Si atomları arasında qeyri-elastiki toqquşmada prosesin fiziki mərhələlərində əmələ gələn və suyun radiasiya-heterogen parçalanmasında rolunu olan müxtəlif MO-ların birbaşa birqat ionlaşmasından əmələ gələn elektron-dəşik cütü və elektron-həyəcanlanma halları kimi qeyri-tarazlıqlı enerji daşıyıcıların energetik çıxımları riyazi model qurularaq Mathcad proqramı əsasında hesablanmışdır.

2. Həmin model əsasında, γ -kvantların təsiri ilə nano-Si daxilində əmələ gələn elektronların hissəcik səthindən emissiya faizinin hissəcik ölçüsündən və onun kinetik enerjisindən asılılığı müəyyən edilmişdir.

3. γ -kvantların təsiri ilə $d=50$ nm hissəcik ölçülü nano-Si/H₂O sistemində suyun radiasiya-heterogen parçalanmasından alınan

molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürəti və energetik çıxımı hissəcik səthində suyun dolma dərəcəsilə (θ) düz mütənasib olaraq artması və müəyyən qiymətlərdən sonra meyl bucağının azalması müəyyən edilmişdir.

4. γ -kvantların təsiri ilə $d=50, 100$ və $300\div 500$ nm hissəcik ölçülü nano-Si/H₂O yaradılan sistemlərində ($\theta=4$) suyun radiasiya - heterogen parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürətinin və energetik çıxımının onun hissəcik ölçülərindən asılılığı aşkar edilmişdir.

5. γ -kvantların təsiri ilə $V=5$ ml su daxilində vibrator vasitəsilə suspenziya etdirilən $d=50, 100$ və $300\div 500$ nm hissəcik ölçülü Si-un əlavəsilə yaradılan sistemlərdə suyun parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürəti və energetik çıxımının hissəcik ölçülərindən asılı olaraq Si-un kütləsinin müəyyən qiymətlərinə qədər onunla düz mütənasib olaraq artması və sonradan meyl bucağının azalması müəyyən edilmişdir.

6. $d=50$ nm hissəcik ölçülü nano-Si/H₂O yaradılan sistemində suyun termiki və γ -kvantların təsiri ilə radiasiya-termiki parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürəti və energetik çıxımının sistemin temperaturu və reaksiya mühitində su buxarının sıxlığından asılılığı müəyyən edilmişdir.

Tədqiqatın nəzəri və praktiki əhəmiyyəti. Dissertasiya işi üzrə alınmış nəticələr aerokosmik tədqiqat işlərində, aerokosmik texnologiyalarda, yavaşıcı, soyuducu və enerji daşıyıcısı kimi yüngül sudan istifadə olunan nüvə reaktorlarında, yüksək enerjilər fizikası və kimyasında, nüvə yanacağı tullantılarından istifadə və onun saxlanılmasında, radiasiya-heterogen proseslərdən alınan ekoloji təmiz enerji mənbəyi olan hidrogen energetikasında istifadə oluna bilər.

Aprobasiyası və tətbiqi. Dissertasiya işinin əsas nəticələri, aşağıdakı Respublika və Beynəlxalq səviyyəli tədbirlərdə məruzə edilmişdir:

- “Akademik Elm Həftəliyi - 2015”- Beynəlxalq Multidissiplinar Forumu, AMEA, 2-5 noyabr 2015, Bakı;

- Dedicated to the 93rd Anniversary of the National leader of Azerbaijan, Heydar Aliyev IV International Scientific Conference of Young Researchers, 29-30 April 2016, Baku;
- “XƏZƏRNEFTQAZYATAQ - 2016” elmi-praktiki konfransın materialları, ANSU, 2016, Bakı;
- Azərbaycan xalqının ümummilli lideri Heydər Əliyevin anadan olmasının 94-cü ildönümünə həsr olunmuş tələbə və gənc tədqiqatçıların “Gənclər və elmi innovasiyalar” mövzusunda respublika elmi texniki konfransı, AzTU, 3-5 may 2017, Bakı;
- “Koordinasion birləşmələr kimyası: Analitik kimyanın aktual problemləri” mövzusunda beynəlxalq elmi konfrans, BDU, 16-17 noyabr 2017, Bakı;
- “Ekologiya: təbiət və cəmiyyət problemləri” mövzusunda III Beynəlxalq Elmi konfrans, BDU, 7-8 dekabr 2017, Bakı;
- Dedicated to the 95th Anniversary of the National leader of Azerbaijan, Heydar Aliyev II International Scientific Conference of Young Researchers, BEU, 27-28 April 2018, Baku;
- “Radiation processes and their applications” international conference dedicated to the 70th Anniversary of Academician M.K. Karimov, Institute of Radiation Problems ANAS, November 13-14, 2018, Baku;
- “EurasiaScience” XXV Международная научно-практическая конференция, Научно-издательский центр “Актуальность.РФ”, 2019, Москва.

Nəşr olunmuş elmi işlər: Dissertasiya işinin mövzusunə aid Respublika və xarici jurnallarda 19 elmi iş, o cümlədən 10 məqalə, 9 tezis nəşr edilmişdir. Məqalələrdən 2-si xaricdə Beynəlxalq bazalara daxil olan jurnallarda, 3-ü isə təkmüəllifli çap edilmişdir.

Dissertasiya işinin quruluşu, həcmi və əsas məzmunu.

Dissertasiya işi giriş, dörd fəsil, nəticələr və istinad olunmuş 157 adda ədəbiyyat siyahısından ibarətdir. İşin ümumi həcmi 137 səhifədən, o cümlədən: 41 şəkil və 20 cədvəldən ibarətdir.

Dissertasiya işinin yerinə yetirildiyi təşkilatın adı:

Dissertasiya işi, Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Radiasiya Problemləri İnstitutunun “Heterogen proseslərin radiasiya

kimyası” laboratoriyası və Azərbaycan Müdafiə Sənayesi Nazirliyi Milli Aerokosmik Agentliyin “Radioaktiv-çirkənlərə nəzarət ölçü cihazları” şöbəsində yerinə yetirilmişdir.

İŞİN MƏZMUNU

Girişdə mövzunun aktuallığı əsaslandırılmış və tədqiqat üsulları haqqında məlumat verilmiş, işin elmi yeniliyi və praktiki əhəmiyyəti göstərilmiş, işin məqsədi, strukturu və məzmunu barədə məlumat verilmiş, müdafiəyə çıxarılacaq əsas müddəalar və işin aprobeasiyası göstərilmişdir.

Birinci fəsilə dissertasiya mövzusu üzrə mövcud ədəbiyyat məlumatları və onların təhlili verilmişdir. İonlaşdırıcı şüalar (γ -kvantlar, elektronlar, protonlar, neytronlar, α -zərrəciklər, yüksək enerjili ionlar və s.) maddə daxilindən keçərkən, onu təşkil edən atom və ya molekullarla qarşılıqlı təsirdən qeyri-tarazlıqlı enerji daşıyıcıları (elektron-deşik cütləri, elektron-həyacanlanma halları və müxtəlif tipli radiasiya defektləri) kimi aktiv aralıq hissəciklər əmələ gəlir. Bu hissəciklər $Me(MeO)/H_2O$ yaradılan adsorbsiyalı və suspenziyalı sistemlərdə suyun parçalanmasından molekulyar hidrogenin alınması proseslərində mühüm rol oynayırlar. Hal-hazırda bu aktiv aralıq hissəciklərin suyun homogen və heterogen sistemlərdə parçalanmasından alınan məhsullarda rolu axıra qədər həm təcrübi, həm də nəzəri olaraq öyrənilməmişdir. Belə ki, radiasiya-heterogen proseslərdən alınan məhsulların energetik çıxımının: istifadə olunan Me və ya Me_xO_y -in kütləsi, hissəcik ölçüsü, hissəcik səthində adsorbsiya olunan suyun səthinin dolma dərəcəsi, sistemin temperaturu və yuxarı temperaturlarda reaksiya mühitində su buxarının sıxlığından asılılığı kifayət qədər tədqiq edilməmişdir.

İkinci fəsilə dissertasiya işinin təcrübi hissəsi verilmişdir. Bu fəsilə istifadə olunan müxtəlif ölçülü Si-un termiki işlənmə yolu ilə səthinin təmizlənməsi, suyun havadan təmizlənməsi və silisium səthinə suyun qovulma yolu ilə nano-Si/ H_2O sisteminin hazırlanması üsulları verilmişdir. Tədqiqat işində γ -şüalanma mənbəyi kimi ^{60}Co izotopundan istifadə edilmişdir. Mənbəyin doza gücünü təyin etmək üçün ferrosulfat dozimetrik, təmiz metanın parçalanmasından

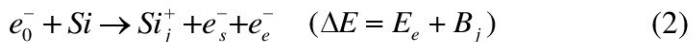
molekulyar hidrogenin alınması və nəzəri hesablama metodlarından istifadə olunmuşdur. Şüalanmadan sonra alınan məhsullar və aralıq məhsullar Qaz Xromatoqrafiya, İQ – spektroskopiya və AQM-dan istifadə etməklə aparılmışdır. Nəzəri hesablamalar (kinetik təhlil, riyazi modelləşdirmə) Mathcad kompüter proqramı əsasında həyata keçirilmişdir.

Üçüncü fəsilə γ -kvantların təsiri ilə nano-Si, H₂O, nano-Si/H₂O sistemləri daxilində prosesin fiziki mərhələsində trek daxilində əsasən kiçik enerjili elektronlar əmələ gəlir. Riyazi model qurularaq kiçik enerjili elektronlarla (E=0,1-10,0 keV) Si atomları arasında qeyri-elastiki toqquşma məhsulları: -müxtəlif elektron-həyəcanlanma halları (L_{1v}, Γ_2 , L₃, Γ_{15} , L_{1c}, X_{1c}) və MO-ların (K-(1s), L-I (2s), L-II (2p 1/2), L-III (2p 3/2), M-I (3s), M-II (3p)) birbaşa birqat ionlaşmasından əmələ gələn elektron-deşik cütlərinin energetik çıxımları birqat toqquşma, addımlama və Monte-Karlo metodlarından istifadə edərək, Mathcad proqramı əsasında hesablanmışdır. Hesablamada, ilkin elektronlar və onların yaratdıqları hər bir yeni növ δ -elektronlar qeyri-elastiki toqquşmada özlərinin kinetik enerjilərinin müəyyən hissəsini itirirlər ki, bu proses elektronun kinetik enerjisinin yenidən qeyri-elastiki toqquşma yarada bilənə kimi davam etdirilmişdir. Alınan qeyri-tarazlıqlı enerji daşıyıcıları: -elektronlar, deşiklər və elektron-həyəcanlanma halları (eksitonlar) suyun heterogen parçalanmasından molekulyar hidrogenin alınması proseslərində birbaşa rol oynayırlar.

Əgər toqquşmadan əvvəl və sonra Si atomunu sükunətdə qəbul etsək, onda ilkin elektronlarla Si atomları arasında qeyri-elastiki toqquşmada enerji balansını ən sadə halda aşağıdakı (1) şəklidə:

$$E = E_K + \Delta E \quad (1)$$

yazmaq olar ki, burada, E -ilkin və E_K -səpilən elektronların kinetik enerjiləri, ΔE isə toqquşma zamanı ilkin elektron tərəfindən Si atomuna ötürülən enerjidir. İonlaşma prosesində ötürülən enerji müxtəlif MO-ların birbaşa birqat ionlaşmasından əmələ gələn (2) elektron-deşik cütünün:



yanarına sərf olunur ki, burada, e_0^-, e_s^-, e_e^- – uyğun olaraq ilkin, səpilən və təpilən elektronlar, Si_j^+ – Si atomunun j -cı MO-nun birbaşa birqat ionlaşma halıdır. Bu proses (2) zamanı ötürülən enerji ΔE - j -cı orbitaldən təpilən elektronun kinetik – E_e və həmin MO-a uyğun rabitə enerjilərinin - B_j (cədvəl 1) cəminə bərabər olur. Enerji və impulsun saxlanma qanunlarına görə, ionlaşma prosesində ΔE ötürülən enerji $\Delta E_{\min} = B_j$, $\Delta E_{\max} = \frac{E + B_j}{2}$ aralığında dəyişə bilər.

Kiçik enerjili elektronlarla Si atomları arasında qeyri-elastiki toqquşmada MO-ların birbaşa birqat ionlaşması proseslərinin effektiv en kəsiyini hesablamq üçün Qrizinskinin təklif etdiyi:

$$\frac{d\sigma_j(\Delta E, E, B_j)}{d\Delta E} = \frac{\pi e^4 B_j}{\Delta E^3 E} \left(\frac{E}{E + B_j} \right)^2 \left(1 - \frac{\Delta E}{E} \right)^{\frac{B_j}{B_j + \Delta E}} \left\{ \frac{\Delta E}{B_j} \left(1 - \frac{B_j}{E} \right) + \frac{4}{3} \ln \left[2.7 + \left(\frac{E - \Delta E}{B_j} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \right\} \quad (3)$$

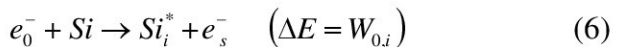
differensial tənlikdən (3) istifadə edilmişdir ki, burada, e -elektronun yüküdür. Əgər (3) ifadəsini, j -cı MO-a uyğun differensial tənliyi, ötürülən enerjinin bütün mümkün qiymətlərinə görə, yəni ΔE_{\min} -dan ΔE_{\max} -a qədər inteqrallayıb, alınan nəticəni MO-da elektronların sayına (n_j) vursaq (cədvəl 1), qeyri-elastiki toqquşmada həmin MO-nun ionlaşmasının effektiv en kəsiyinin ilkin elektronun kinetik enerjisindən (4) asılılığını alarıq:

$$\sigma_j(E, B_j) = n_j \int_{\Delta E_{\min}}^{\Delta E_{\max}} \frac{d\sigma_j(\Delta E, E, B_j)}{d\Delta E} d\Delta E \quad (4)$$

Müxtəlif MO-lara uyğun ionlaşmanın effektiv en kəsiklərini (4) cəmi ionlaşmanın (şəkil 1 (2)) tam effektiv (5) en kəsiklərini verir:

$$\sigma_{ion}(E) = \sum_j \sigma_j(E, B_j) \quad (5)$$

İlkin elektronlarla Si atomları arasında qeyri-elastiki toqquşmada elektron-həyəcanlanma proseslərini simvolik olaraq aşağıdakı şəkildə (6) yazmaq olar:



Bu proses zamanı elektronun əsas haldan (0), i -ci həyəcanlanma halına keçidin effektiv en kəsiyin differensial qiyməti üçün Kutcher

və Green tərəfindən təklif olunmuş tənliyin, Cobut tərəfindən təkmilləşdirilmiş (7) formasından istifadə edilmişdir ki:

$$\frac{d\sigma_{0,i}(E,W)}{dW} = \rho(W)Wf_i(W)\ln\left[\frac{4E}{Q_{\min}}\right] \quad (7)$$

burada, Q_{\min} – elektron-elektron qarşılıqlı təsirdə elektron - həyəcanlanmada minimal enerji itk $\rho(W) = \frac{4\pi a_0^2}{E} \left(\frac{R}{W}\right)^2 f_i(W)$ assilyatorun

gücü, $R=13,6$ eV Ridberq enerjisi, a_0 -Bor radiusudur. Bu zaman elektronun əsas haldan $0 \rightarrow i$ -ci elektron-həyəcanlanma halına keçidin ($L_{1v}, \Gamma_2, L_3, \Gamma_{15}, L_{1c}, X_{1c}$) effektiv en kəsiyini təyin etmək üçün (7) ifadəsini həmin elektron-həyəcanlanmaya uyğun pikin eninə görə inteqrallamaq (8) lazımdır:

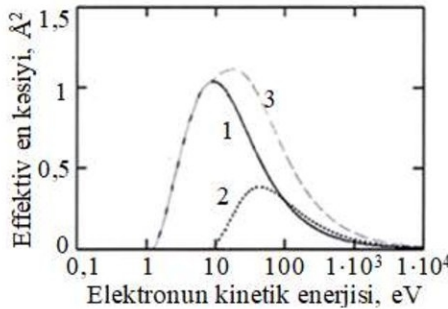
$$\sigma_{0,i}(E) = \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} \frac{d\sigma_{0,i}(E,W)}{dW} dW \quad (8)$$

Müxtəlif elektron-həyəcanlanmanın (eksitonlar) effektiv en kəsiyini cəmi isə elektron-həyəcanlanma hallarının (şəkil 1 (1)) tam effektiv (9) en kəsiklərini verir:

$$\sigma_{exc}(E) = \sum_i \sigma_{0,i}(E) \quad (9)$$

Qeyri-elastiki toqquşmada ionlaşma (5) və elektron-həyəcanlanma (9) hallarının tam effektiv en kəsiklərinin cəmi isə tam effektiv (10):

$$\sigma_{tot}(E) = \sigma_{ion}(E) + \sigma_{exc}(E) \quad (10)$$



Şəkil 1. Kiçik enerjili elektronlarla Si atomları arasında qeyri-elastiki toqquşma məhsullarının: elektron-həyəcanlanma- $\sigma_{exc}(E)$ (1), ionlaşma- $\sigma_{ion}(E)$ (2) hallarının və tam effektiv en kəsiklərinin- $\sigma_{tot}(E)$ (3) elektronun kinetik enerjisindən asılılığı

en kəsiyini (şəkil 1(3)) verir. Şəkil 1-də elektron-həyəcanlaşmanın (əyri 1) və MO-ların birbaşa birqat ionlaşmasının (əyri 2) və tam effektiv en kəsiyin (əyri 3) elektronun kinetik enerjisindən asılılıq qrafiki verilmişdir.

Kiçik enerjili elektronlarla Si atomunun arasında qeyri-elastiki toqquşma məhsulların energetik çıxımları üçün model əsasında hesablamadan alınan qiymətlər: -müxtəlif MO-larının birbaşa birqat ionlaşmasından əmələ gələn elektron-deşik cütü cədvəl 1-də və elektron-həyəcanlanma hallarının cədvəl 2-də verilmişdir.

Cədvəl 1.

Kiçik enerjili elektronlarla Si atomları arasında qeyri-elastiki toqquşmadan alınan müxtəlif MO-larının (*K (1s)*, *L-I (2s)*, *L-II (2p 1/2)*, *L-III (2p 3/2)*, *M-I (3s)*, *M-II (3p)*) birbaşa birqat ionlaşmasından əmələ gələn elektron-deşik cütlərinin ($S_j^+ - e^-$) energetik çıxımları

Səviyələr	İşarələmə	Elektronların sayı, n_e	Rabitə enerjisi, B_j , eV	Elektronun kinetik enerjisi, keV				
				0,1	0,5	1	5	10
K	1s	2	1844	0	0	0	0	0,01
L-I	2s	2	154	0	0,01	0,03	0,06	0,07
L-II	2p 1/2	3	104	0	0,06	0,1	0,15	0,16
L-III	2p 3/2	3	104	0	0,06	0,1	0,15	0,16
M-I	3s	2	13,46	2,28	1,62	1,48	1,25	1,18
M-II	3p	2	8,15	3,69	3,21	2,81	2,23	2,08

Model əsasında hesablamada kiçik enerjili elektronlarla Si atomları arasında qeyri-elastiki toqquşmada prosesin fiziki (10^{-15} - 10^{-12} san) mərhələsində elektron-deşik cütünün energetik çıxımı $G(h^+ - e^-) = 6,06 \div 3,66$ elektron-deşik cütü/(100 eV), elektron-həyəcanlanma halının energetik çıxımı isə $G(exc) = 18,9 \div 9,55$ elektron-həyəcanlanma halı/(100 eV) qiymətlərini almışdır. Sonradan prosesin fiziki-kimyəvi (10^{-11} - 10^{-6} san) mərhələsində elektron-həyəcanlanma enerjisi Si atomunun qadağan olunmuş zonasının enindən böyük olan

atomlar dissosiasiya olunaraq ($Si^* \rightarrow Si^+(h^+) + e^-$) yenidən elektron-deşik cütü əmələ gətirir ki, bu halda elektron-deşik cütünün energetik çıxımı $G(h^+-e^-)=24,97-13,21$ elektron-deşik cütü/(100 eV) alınmışdır.

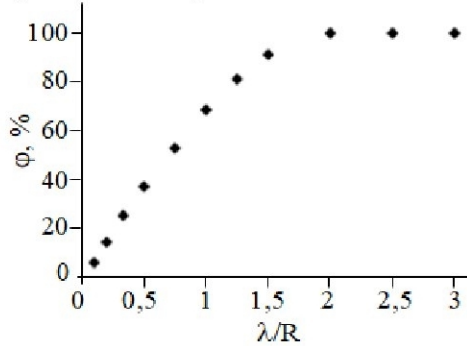
Cədvəl 2.

Kiçik enerjili elektronlarla Si atomları arasında qeyri-elastiki toqquşmadan alınan müxtəlif elektron-həyəcanlanma hallarının ($L_{1v}, \Gamma_2, L_3, \Gamma_{15}, L_{1c}, X_{1c}$) energetik çıxımları

Həyəcanlanma səviyyələri	Həyəcanlanma enerjisi, $W_{0,i}$, eV	Elektronun kinetik enerjisi, keV				
		0,1	0,5	1	5	10
L_{1v}	6,7	1,12	0,63	0,51	0,39	0,36
Γ_2'	4,23	2,85	1,94	1,66	1,24	1,15
L_3	4,15	0,22	0,13	0,10	0,08	0,07
Γ_{15}	3,4	2	1,36	1,14	0,85	0,79
L_{1c}	2,4	3,39	2,88	2,64	1,95	1,72
X_{1c}	1,25	9,34	8,91	8,42	5,99	5,46

Modeldə tədqiq olunan nano-silisiyum hissəciyini radiusu R olan kürə şəklində qəbul etsək. γ -kvantların təsirilə kürə daxilində prosesin fiziki mərhələsində əmələ gələn enerji daşıyıcıları olan elektronlar, deşiklər və eksitonların bütün həcmdə eyni paylanmasını və bütün istiqamətdə eyni ehtimalla daşınmasını qəbul edək. Alınan deşik mərkəzləri dreyf nəticəsində daşınaraq bir hissəsi hissəcik daxili quruluş defektlərində, bir hissəsi də səthə qədər miqrasiya edərək səth mərkəzlərində lokallaşa bilirlər. Hissəcik daxilində əmələ gələn eksitonlar da daşınaraq bir hissəsi həcmdə tutula, bir hissəsi hissəcik səthilə əlaqəli mərkəzlər vasitəsilə digər fazaya ötürülə bilirlər. Şüalanmanın təsirilə nano-Si daxilində əmələ gələn kompton elektronları və onların yaratdıqları hər bir yeni nəsil δ -elektronlar prosesin fiziki mərhələsində hissəcik daxilində elastiki və qeyri-elastiki toqquşmada kinetik enerjilərini tədricən itirərək, bir hissəsi hissəcik daxilində quruluş defektləri tərəfindən tutula, bir hissəsi də hissəcik səthinə qədər daşınırlar. Səthə qədər daşınan elektronlardan kinetik enerjiləri səth potensialından kiçik olarsa, onların bir hissəsi

səthdə lokallaşa, bir hissəsi də səthdən əks olunaraq hissəcik daxilinə qayıdırlar, böyük olanlar isə hissəcik səthini aşaraq su daxilinə emissiya olunurlar. Model əsasında elektronların trayektoriyaları izlənmiş və nanohissəcik səthindən su daxilinə emissiya olunan elektronların emissiya faizi hesablanmışdır. Şəkil 2-də emissiya faizinin elektronun kinetik enerjisindən və nanohissəciklərin hissəcik ölçüsündən asılılıq qrafiki verilmişdir.



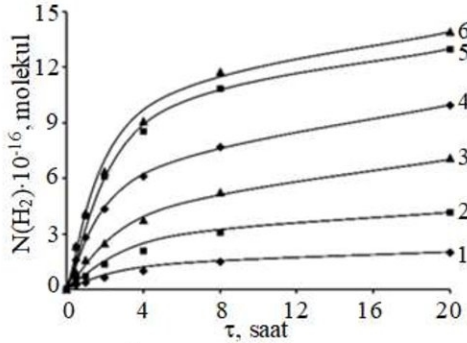
Şəkil 2. Nanohissəcik səthindən emissiya olunan elektronların emissiya faizinin onun hissəcik ölçüsündən asılılığı

Model əsasında hesablamadan alınmışdır ki, elektronların nanohissəcik səthindən maye fazaya emissiya faizi onun hissəcik ölçüsündən və elektronların kinetik enerjisindən asılı olaraq dəyişir. Orta sərbəst qaçış məsafəsi $\lambda \geq 2R$ şərtini ödəyən elektronların hamısı nanohissəcik səthindən su daxilinə emissiya olunurlar.

Dördüncü fəsildə $d=50, 100, 300 \div 500$ nm hissəcik ölçülü Si/H₂O yaradılan sistemlərində suyun termiki ($T=373, 473, 573, 623$ və $673K$) və γ -kvantların təsiri ilə (⁶⁰Co, $P=18,17$ rad/san) radiasiya-termiki ($T=300, 373, 473, 573, 623$ və $673K$) parçalanmasından molekulyar hidrogenin alınması prosesləri tədqiq edilmişdir. Bu proseslər üç istiqamətdə aparılmışdır.

Birinci istiqamətdə γ -kvantların (⁶⁰Co, $P=18,17$ rad/san, $T=300K$) təsiri ilə $d=50$ nm hissəcik ölçülü nano-Si səthinin suyun $\theta=0,25$ (1); 0,5 (2); 1 (3); 2 (4); 4 (5); 10 (6) dolma dərəcələrində adsorbsiyası ilə yaradılan nano-Si/H₂O sistemlərində suyun radiasiya-heterogen parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin

miqdarının şüalanma müddətindən asılılığı kinetik əyriləri şəkil 3-də verilmişdir.



Şəkil 3. γ -kvantların (^{60}Co , $P=18,17$ rad/san, $T=300\text{K}$) təsiri ilə $d=50$ nm hissəcik ölçülü nano-Si səthinin suyun $\theta=0,25$ (1); 0,5 (2); 1 (3); 2 (4); 4 (5); 10 (6) dolma dərəcələrində adsorbsiya ilə yaradılan nano-Si/ H_2O sistemlərində suyun radiasiya-heterogen parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin miqdarının şüalanma müddətindən asılılığı

Şəkil 3-də alınan əyrilərin (1-6) kinetik hissələrindən molekulyar hidrogenin nano-Si-a görə təyin edilən əmələgəlmə sürətləri- $w(\text{H}_2)$ və energetik çıxımları- $G(\text{H}_2)$ cədvəl 3-də verilmişdir.

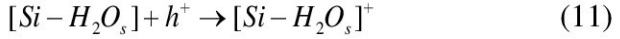
Cədvəl 3.

γ -kvantların (^{60}Co , $P=18,17$ rad/san, $T=300\text{K}$) təsiri ilə $d=50$ nm hissəcik ölçülü nano-Si səthində adsorbsiya olunmuş suyun radiasiya-heterogen parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürəti- $w(\text{H}_2)$ və energetik çıxımının- $G(\text{H}_2)$ onun səthinin suyun dolma dərəcəsiindən asılılığı

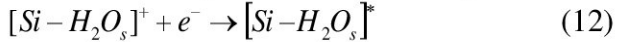
H_2 -nin əmələgəlmə sürətləri və energetik çıxımları	Səthin dolma dərəcəsi, θ					
	0,25	0,5	1	2	4	10
$w(\text{H}_2) \cdot 10^{-13}$, molekull/(q·san)	0,33	0,63	1,23	2,2	3,1	3,25
$G(\text{H}_2)$, molekull/(100 eV)	0,29	0,55	1,08	1,92	2,7	2,87

Digər tərəfdən $d=100, 300\div 500$ nm hissəcik ölçülü Si-la səthin dolma dərəcəsinin $\theta=4$ qiymətində həmin proseslər aparılmışdır.

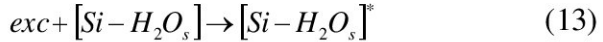
γ -kvantların təsirilə Si hissəciyi daxilində əmələ gələn və hissəcik/su sərhəddinə qədər miqrasiya olunan dəşiklər səthdə adsorbsiya olunmuş su $[Si-H_2O_s]$ kompleksi tərəfindən tutularaq (11) ion-kompleksini yaradırlar.



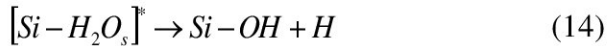
İon-kompleksi istilik və ya tunel elektronları ilə rekombinasiya olunaraq elektron-həyəcanlanma kompleksini (12) əmələ gətirir.



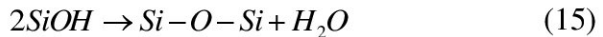
Digər tərəfdən ionlaşdırıcı şüaların təsirilə əmələ gələn eksitonlar (yalnız L_{1v}) öz enerjisini (6,7 eV) səthdə adsorbsiya olunan su kompleksinə ötürərək, kompleksin elektron-həyəcanlanmasını (13) yaradırlar.



Hər iki halda kompleksin elektron-həyəcanlanma $[Si-H_2O_s]^*$ enerjisi adsorbsiya olunmuş su molekulasına ötürülərək onun parçalanmasına (14) səbəb olur və nəticədə nanohissəcik səthində:



OH qrupu və H atomu alınır. Nəhayət, suyun radiasiya-heterogen parçalanmasından molekulyar hidrogen ($H+H \rightarrow H_2$) alınır. Qonşu OH qruplarının birləşməsi nəticəsində səthin dozadan asılı olaraq oksidləşməsi də (15) baş verir:



Bu zaman suya ötürülən elektron-həyəcanlanma enerjisi (E_{exc}) suyun parçalanması ($H_2O \rightarrow OH+H$) üçün lazım olan ($E_{rab}=5,1$ eV) rabitə enerjisindən böyük və ya ona bərabər ($E_{exc} \geq E_{rab}$) olmalıdır.

Beləliklə, γ -kvantların Si/H₂O sisteminə təsirilə hissəcik daxilində yaranan qeyri-tarazlıqlı enerji daşıyıcıların (elektronlar, dəşiklər və eksitonlar) səthdə adsorbsiya olunan su molekulasına ötürülməsi ilə gedən (11-15) reaksiyalarında suyun parçalan-masının baş verməsi üçün onların səthi adsorbsiya səviyələrinə miqrasiyası baş verməlidir. Hissəciklərin səthi səviyyəyə miqrasiya, diffuziya və dreyf mexanizmi ilə baş verə bilər və onların miqrasiya məsafəsi məhduddur. Bu mexanizmlərdən (11-15) belə məlum olur ki, suyun

radiasiya-heterogen parçalanmasından hər bir hidrogen molekulasının alınmasına iki elektron-deşik cütü və iki eksiton sərf olunmalıdır. Əgər qəbul etsək ki, γ -kvantların təsiri ilə əmələ gələn enerji daşıyıcılarının hamısı molekulyar hidrogenin alınmasında iştirak edirlər, onda (11-15) reaksiyalarına görə Si səthində adsorbsiya olunmuş suyun radiasiya-heterogen parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin energetik çıxımı (16) münasibətinə tabe olmalıdır:

$$G_n(H_2) = \frac{1}{2} [G_n(h^+ - e^-) + G_n(L_{1v})] \quad (16)$$

Yəni təcrübələrdən alınan molekulyar hidrogenin energetik çıxımı nəzəri hesablamadan alınan elektron deşik cütü ilə işlək eksitonun (L_{1v}) energetik çıxımları cəminin yarısına bərabər olmalıdır. Cədvəl 4-də $d=50, 100, 300 \div 500$ nm hissəcik ölçülü Si səthində suyun adsorbsiyası ($\theta=4$) ilə yaradılan sistemlərdə gedən radioliz prosesindən alınan molekulyar hidrogenin energetik çıxımları model əsasında hesablamadan alınan qiymətlərlə müqayisəli şəkildə verilmişdir.

Cədvəl 4.

Si-un hissəcik səthində suyun adsorbsiyası ($\theta=4$) ilə yaradılan sistemlərdə suyun radiasiya-heterogen parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin energetik çıxımlarının təcrübə və model əsasında hesablamadan alınan qiymətlərin müqayisəsi

50 nm	100 nm	300÷500 nm	$G_n(h^+ - e^-)$	$G_n(L_{1v})$	$G_n(H_2)$
H ₂ -nin energetik çıxımı, $G_t(H_2)$ molekul/(100eV)			Model əsasında təyin edilən qiymətlər		
2,7	1,7	1,15	6,06-3,66	1,12-0,36	3,6-2,01

Göründüyü kimi hissəcik ölçüsü artdıqca molekulyar hidrogenin energetik çıxımı azalır. Bu onu sübut edir ki, enerji daşıyıcıların bir hissəsi rekombinasiya olunur, bir hissəsi də səthə qədər çatmayır.

İkinci istiqamətdə γ - kvantların (^{60}Co , $P=22$ rad/san, $T=300\text{K}$) təsiri ilə 5 ml təmiz suyun və həmin miqdarda su daxilinə əlavə olunaraq şüalanma müddətində vibrator vasitəsilə suspenziya etdirilən Si-un kütləsi ($m=0,01 \div 0,12$ q) və hissəcik ölçülərini ($d=50,$

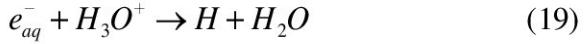
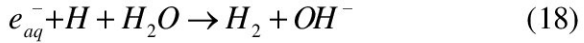
100, 300÷500 nm) dəyişməklə yaradılan sistemlərdə suyun parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin miqdarının şüalanma müddətindən asılılığına baxılmışdır. Alınan qrafiklərin kinetik hissələrindən suya görə təyin edilən molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürətləri- $w(H_2)$ və energetik çıxımları- $G(H_2)$ təyin edilmişdir. Alınan nəticələr cədvəl 5-də verilmişdir.

Cədvəl 5.

γ -kvantların təsiri ilə 5 ml təmiz su və həmin miqdarda su daxilində şüalanma müddətində vibrator vasitəsilə suspenziya etdirilən $d=50, 100$ və $300\div 500$ nm hissəcik ölçülü Si-un əlavəsilə yaradılan sistemlərdə suyun parçalanmasından alınan və suya görə təyin edilən molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürəti- $w(H_2)$ və energetik çıxımının- $G(H_2)$ onun kütləsindən asılılığı

$m_{Si},$ q	50 nm		100 nm		300 ÷ 500 nm	
	$w(H_2) \cdot 10^{-13},$ molekul/ (q·san)	$G(H_2),$ molekul/ 100eV	$w(H_2) \cdot 10^{-13},$ molekul/ (q·san)	$G(H_2),$ molekul/ 100eV	$w(H_2) \cdot 10^{-13},$ molekul/ (q·san)	$G(H_2),$ molekul/ 100eV
0	-	-	0,61	0,436	-	-
0,01	5	3,64	3,4	2,77	2,53	1,84
0,02	9,67	7,03	7,97	5,48	5,15	3,75
0,06	13,4	9,05	9,67	7,03	6,3	4,58
0,12	15	10,9	11,1	8,07	7,21	5,24

γ -kvantların təsiri ilə nano-Si/H₂O yaradılan suspenziyalı sistemlərdə hissəcik səthindən su daxilinə emissiya olunan elektronlara görə hissəcik ətrafı fazada müəyyən qalınlıqda elektronların konsentrasiyası təmiz suya nisbətən daha böyük olur. Hissəcik ölçüləri artdıqca, emissiya olunan elektronların emissiya faizi azalır. Su daxilinə emissiya olunan elektronlar dipol relaksasiyası, elastiki və qeyri-elastiki toqquşma nəticəsində kinetik enerjilərini tədricən itirərək əvvəlcə istilik, sonradan solvatlaşmış elektronlarına çevirilir. Solvatlaşmış (e_{aq}^-) elektronlarla su molekulları və protonlaşmış su molekulları (H₃O⁺) arasında gedən reaksiyalardan alınan molekulyar və atomar hidrogeni aşağıdakı (17-19) şəkildə təsvir etmək olar:



Cədvəl 6-da, γ -kvantların təsiriylə, $d=50, 100, 300\div 500$ nm hissəcik ölçülü Si/H_2O yaradılan suspenziyalı sistemlərdə suyun parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin energetik çıxımlarının təcrübələrdən və model əsasında hesablamadan alınan qiymətləri müqayisəli şəkildə verilmişdir. Model əsasında molekulyar hidrogenin energetik çıxımı (20) ifadəsi əsasında hesablanmışdır.

$$G_n(H_2) = \frac{1}{2} [G_n(h^+ - e^-) + G_n(L_{iv}) + G(e_{aq}^-)] \quad (20)$$

Cədvəl 6.

γ -kvantların təsiriylə, Si/H_2O yaradılan suspenziyalı sistemlərdə suyun parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin energetik çıxımlarının təcrübə və model əsasında hesablamadan alınan qiymətlərin müqayisəsi

Molekulyar hidrogenin energetik çıxımı	Təcrübədən alınan nəticələr			Nəzəri nəticələr
	50 nm	100 nm	300÷500 nm	
$G(H_2)$, molekul/10eV	10,9	8,07	5,24	12,5-6,6

Göründüyü kimi hissəcik ölçüsü artdıqca molekulyar hidrogenin energetik çıxımı azalır. Bu onu sübut edir ki, enerji daşıyıcıların bir hissəsi rekombinasiya olunur, bir hissəsi də səthə qədər daşıma bilmirlər. γ -kvantların təsiriylə suspenziyalı sistemlərdə molekulyar hidrogenin alınması prosesini həm rekombinasiya mexanizmi (11-14), həm birbaşa eksitonların ötürülməsi (13-14), həm də bərk cisim səthindən emissiya olunaraq su daxilində solvatlaşan elektronlar vasitəsilə (17-19) baş verə bilər.

Üçüncü istiqamətdə $d=50$ nm hissəcik ölçülü nano-Si-un $T=673K$ temperaturda, $\rho=0,25; 0,5; 1, 3$ və 8 mq/sm³ sıxlıqda su buxarı ilə təmasda, suyun termiki və γ -kvantların (⁶⁰Co, P=18,17 rad/san) təsiriylə radiasiya-termiki parçalanmasından alınan

molekulyar hidrogenin miqdarının şüalanma müddətindən asılılığına baxılmışdır. Alman qrafiklərin kinetik hissəsindən molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürətləri: -termiki- $w_T(H_2)$, radiasiya-termiki- $w_{RT}(H_2)$ və radiasiyanın payı $w_R(H_2)=w_{RT}(H_2)-w_T(H_2)$ ifadəsi əsasında təyin edilmişdir. Molekulyar hidrogenin energetik çıxımı- $G_R(H_2)$, sürətlər fərqiinə - $w_R(H_2)$ görə təyin (cədvəl 7) edilmişdir.

Cədvəl 7.

T=673K temperaturda d=50 nm hissəcik ölçülü nano-Si-un reaksiya mühitində $\rho=0,25; 0,5; 1; 3$ və 8 mq/sm^3 sıxlıqda su buxarı ilə təmasda, suyun termiki və γ -kvantların təsiri ilə radiasiya-termiki parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürətləri ($w_T(H_2)$, $w_{RT}(H_2)$, $w_R(H_2)$ və energetik çıxımları $G_R(H_2)$)

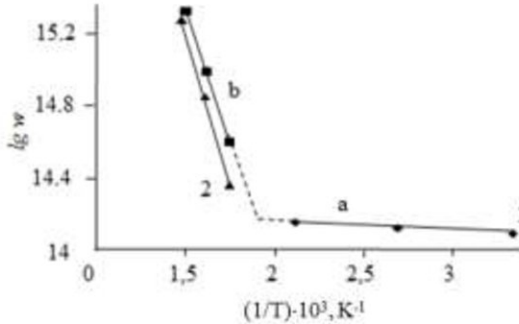
Molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürətləri- $(w_T(H_2), w_{RT}(H_2), w_R(H_2))$ və energetik çıxımları- $G_R(H_2)$	Su buxarının sıxlığı, mq/sm^3				
	0,25	0,5	1	3	8
$w_T(H_2) \cdot 10^{-14}$, molekul/q·san	1,68	3,34	6,49	18,74	20,1
$w_{RT}(H_2) \cdot 10^{-14}$, molekul/q·san	1,73	3,45	6,7	19,15	20,6
$w_R(H_2) \cdot 10^{-14}$, molekul/q·san	0,05	0,1	0,21	0,41	0,5
$G_R(H_2)$, molekul/100eV	0,45	0,89	1,85	3,6	4,4

Cədvəl 8.

T=673K temperaturda, d=50 nm hissəcik ölçülü nano-Si-un reaksiya mühitində $\rho=8 \text{ mq/sm}^3$ sıxlıqda su buxarı ilə təmasda suyun termiki və γ -kvantların təsiri ilə radiasiya-termiki parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürətinə və energetik çıxımına temperaturun təsiri

T, K	$w_T(H_2)$, molekul/q·san	$w_{RT}(H_2)$, molekul/q·san	$w_R(H_2)$, molekul/q·san	$G_R(H_2)$, molekul/(100·eV)
300	-	$0,325 \cdot 10^{14}$	$0,325 \cdot 10^{14}$	2,87
373	-	$0,332 \cdot 10^{14}$	$0,332 \cdot 10^{14}$	2,9
473	-	$0,363 \cdot 10^{14}$	$0,363 \cdot 10^{14}$	3,2
573	$2,40 \cdot 10^{14}$	$2,88 \cdot 10^{14}$	$0,48 \cdot 10^{14}$	4,2
623	$7,22 \cdot 10^{14}$	$7,71 \cdot 10^{14}$	$0,49 \cdot 10^{14}$	4,32
673	$2,01 \cdot 10^{15}$	$2,06 \cdot 10^{15}$	$0,50 \cdot 10^{14}$	4,4

Digər tərəfdən $d=50$ nm hissəcik ölçülü nano-Si-un $\rho=8$ mq/sm³ sıxlıqda su buxarı ilə təmasda, suyun termiki və γ -kvantların (⁶⁰Co, P=18,17 rad/san) təsirlə radiasiya-termiki parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin miqdarı, əmələgəlmə sürəti və energetik çıxımlarının sistemin temperaturundan (T=300, 373, 473, 573, 623, 673K) asılılıq qanunauyğunluğu tədqiq edilmişdir.



Şəkil 4. $d=50$ nm hissəcik ölçülü nano-Si-un reaksiya mühitində $\rho=8$ mq/sm³ sıxlıqda su buxarı ilə təmasda suyun termiki və γ -kvantların təsirlə radiasiya-termiki parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürətlərinin $\lg w$ -nin $1/T$ -dən asılılığı

Arrenius koordinatlarından ($\lg w(H_2)$, $1/T$) istifadə edərək nano-Si-un reaksiya mühitində $\rho=8$ mq/sm³ sıxlıqda su buxarı ilə təmasda suyun termiki və γ -kvantların təsirlə radiasiya-termiki parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürətinin $\lg w$ -nin $1/T$ -dən asılılığından, proseslərin aktivləşmə enerjiləri təyin edilmişdir. T=300-473K temperatur dəyişməsinə nano-Si/H₂O sistemindən molekulyar hidrogen suyun radiasiya-termiki parçalanmadan alınır ki, bu prosesin aktivləşmə enerjisi 1,07 kC/mol (şəkil 4 (1a)) təyin edilmişdir. T=573-673K temperatur dəyişməsinə isə molekulyar hidrogen suyun həm radiasiya-termiki (şəkil 4 (1b)), həm də termiki (şəkil 4 (2)) parçalanmasından alınır ki, hər iki prosesə uyğun aktivləşmə enerjiləri 53,83 kC/mol və 68,6 kC/mol təyin edilmişdir.

İQ-spektroskopiya metodu ilə müəyyən olunmuşdur ki, nano-Si/H₂O sistemində suyun radiasiya-termiki və termiki parçalanması

zamamı H – rabitəli qrupların səthdən ayrılma və izolə olunmuş OH – qruplarının səthdə əmələgəlmə sürətləri radiasiya-termiki prosesdə daha böyükdür. Bu da radiasiyanın stimullaşdırıcı rolunu göstərir və molekulyar hidrogenin əmələgəlmə sürətinin və energetik çıxımının qiymətləri ilə uzlaşır. Eyni zamanda γ -kvantların təsiri ilə nano-Si/H₂O heterosistemində T=300-673K temperatur intervalında suyun parçalanması zamanı aktiv aralıq məhsullar (Si-O, Si-H, Si-OH, Si-H₂) əmələ gəlir.

İlkin və radiasiya-termiki oksidləşmiş silisiumun səthlərinin müqayisəli AQM analizi aşağıdakı nəticələri söyləməyə əsas verir: 1)Oksidləşmiş səth nisbətən daha nizamlı quruluşa malikdirlər, 2)Radiasiya-termiki oksidləşmiş təbəqələr daha kiçik ölçülü hissəciklərin (1,5 dəfə kiçik, maksimum paylanma 100-150 nm) iştirakı xarakterizə olunurlar. Bu zaman hissəciklərin sayı ~2 dəfə (14000:650) artır.

ƏSAS NƏTİCƏLƏR

1. Model əsasında kiçik enerjili elektronlarla Si atomları arasında prosesin fiziki mərhələsində qeyri-elastiki toqquşma məhsulların energetik çıxımları:-müxtəlif MO-ların birbaşa birqat ionlaşmasından alınan elektron-deşik cütü $G(h^+e^-)=3,66-6,06$ elektron-deşik cütü/(100 eV), elektron-həyəcanlanma hallarının $G(Si^*)=9,55-18,9$ həyəcanlanma halı/(100 eV) və sonrakı fiziki-kimyəvi mərhələsində elektron-deşik cütü $G(h^+e^-)=13,21-24,97$ elektron-deşik cütü/(100 eV) alınmışdır.

2. Müəyyən edilmişdir ki, γ -kvantların təsiri ilə nano-Si daxilində əmələ gələn və hissəcik səthindən su daxilinə emissiya olunaraq orada solvatlaşan elektronların energetik çıxımı hissəciyin ölçüsündən və elektronun kinetik enerjisindən asılı olaraq dəyişir. Orta qaçış məsafəsi $\lambda \geq 2R$ şərtini ödəyən elektronların hamısı nanohissəcik səthindən su daxilinə emissiya olunurlar.

3. γ -kvantların təsiri ilə, nano-Si(d=50 nm)/H₂O sistemində suyun parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin energetik çıxımı, $\theta \leq 2$ qiymətlərində səthin dolma dərəcəsilə düz mütənasib olaraq artması, $\theta > 2$ isə meyl bucağının kəskin azalması müəyyən edilmişdir. d=50, 100, 300÷500 nm hissəcik ölçülü Si/H₂O adsorbsiyalı ($\theta=4$)

sistemlərdə suyun radiasiya-heterogen parçalanmasından alınan silisiuma görə təyin edilən molekulyar hidrogenin energetik çıxımları uyğun olaraq $G(H_2)=2,7; 1,7$ və $1,15$ molekul/(100 eV) müəyyən edilmişdir. Adsorbsiyalı sistemdə model əsasında hesablanan enerjinin rekombinasiya və eksiton mexanizmlərinə görə ötürülməsindən alınan molekulyar hidrogenin energetik çıxımı $G_n(H_2)=2-3,6$ molekul/100 eV alınmışdır.

4. γ -kvantların təsiri ilə $d=50, 100$ və $300\div 500$ nm hissəcik ölçülü Si/H₂O yaradılan suspenziyalı sistemlərdə, suyun parçalanmasından alınan və suya görə təyin edilən molekulyar hidrogenin maksimum energetik çıxımları üçün uyğun olaraq $G(H_2)=10,9; 8,07$ və $5,24$ molekul/100eV qiymətləri alınmışdır. Bu sistemdə molekulyar hidrogenin energetik çıxımının Si-un kütləsinin $m_{Si}\leq 0,02q$ qiymətlərində, onunla düz mütənasib olaraq artması, $m_{Si}>0,02q$ qiymətlərində isə hissəcik ölçülərindən asılı olaraq meyl bucağının kəskin azalması müəyyən edilmişdir. Model əsasında enerjinin rekombinasiya və eksiton mexanizmlərinə görə ötürülməsi və nanohissəcik səthindən su daxilinə emissiya olunaraq orada solvatlaşan elektronlara görə hesablanan molekulyar hidrogenin energetik çıxımı $G_n(H_2)=6,6-12,5$ molekul/100 eV alınmışdır.

5. Nano-Si($d=50$ nm)/H₂O sistemində $T=673K$ temperaturda, reaksiya mühitində su buxarının sıxlığının $\rho=0,25; 0,5; 1; 3$ və 8 mq/sm³ qiymətlərində suyun termiki və γ -kvantların təsiri ilə radiasiya-termiki parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin energetik çıxımı $0<\rho<3$ mq/sm³ qiymətlərində onunla düz mütənasib olaraq artması, $\rho\geq 3$ mq/sm³ qiymətlərində isə artım sürətinin kəskin azalması müəyyən edilmişdir.

6. Nano-Si/H₂O sistemində, reaksiya mühitində su buxarının sıxlığının $\rho=8$ mq/sm³ qiymətində suyun termiki və γ -kvantların təsiri ilə radiasiya-termiki parçalanmasından alınan molekulyar hidrogen $300K\leq T\leq 473K$ temperatur dəyişməsində yalnız radiasiya-termiki, bu prosesin aktivləşmə enerjisi $1,07$ kC/mol, $573K\leq T\leq 673K$ temperatur dəyişməsində isə həm termiki, həm də radiasiya-termiki proseslərdən alınmışdır ki, həmin proseslərin aktivləşmə enerjiləri uyğun olaraq $68,6$ kC/mol və $53,83$ kC/mol-a təyin edilmişdir. Həmin

sistemlərdə alınan molekulyar hidrogenin radiasiyanın payına görə hesablanan energetik çıxımı $G(H_2)=2,7-4,4$ molekul/100-eV alınmışdır.

Dissertasiyanın əsas nəticələri aşağıdakı tezis və məqalələrdə çap edilmişdir:

1. Bəşirova, S.M. Si+H₂O sisteminin radiolizində molekulyar hidrogenin radiasiya-kimyəvi çıxımına kütlənin və ölçünün təsiri // “Akademik Elm Həftəliyi - 2015”, Beynəlxalq multidissiplinar forumun materialları, -Bakı: -2015, -s. 272-274.

2. Jafarov, Y.D., Bəşirova, S.M., Aliyev, S.M. The impact of mass and size effects on the water Radiolysis process in Si+H₂O system // Journal of Radiation Researches, -Baku: -2015, Vol.2, №2, – p. 21-26.

3. Bəşirova, S.M. Qamma-kvantların təsiri ilə *nano-Si+H₂O* sistemində gedən suyun radiolizi prosesində silisiumun rolu // Ümummilli lider Heydər Əliyevin anadan olmasının 93-cü ildönümünə həsr olunmuş Gənc Tədqiqatçıların IV Beynəlxalq Elmi Konfransının materialları, -Bakı: -2016, -s. 88-90.

4. Bəşirova, S.M., Cəfərov, Y.D. Si+H₂O sistemində suyun radiolizi prosesində kütlə effekti // Azərbaycan Milli Aerokosmik Agentliyinin xəbərləri, -Bakı: -2016, №2(19), -s. 52-60.

5. Cəfərov, Y.D., Bəşirova, S.M. Si+H₂O sistemində suyun radiolizi prosesində kütlə effekti // “XəzərNeftQazYataq - 2016” elmi-praktiki konfransın materialları, -Bakı:-2016, -s. 640-645.

6. Bəşirova S.M., Cəfərov Y.D. Qamma-kvantların təsiri ilə Si+H₂O sistemində gedən suyun radiolizi prosesinə silisiumun kütlə və ölçü effektlərinin təsiri // Azərbaycan Milli Aerokosmik Agentliyinin xəbərləri, -Bakı: -2017, №1(20), -s. 53-59

7. Bəşirova, S.M., Cəfərov, Y.D., Axundzadə, H.N. Kiçik enerjili elektronlarla silisium atomları arasında qeyri-elastiki toqquşmaların riyazi modelləşdirilməsi // Azərbaycan xalqının ümummilli lideri Heydər Əliyevin anadan olmasının 94-cü ildönümünə həsr olunmuş tələbə və gənc tədqiqatçıların “Gənclər və elmi innovasiyalar” mövzusunda respublika elmi-texniki konfransının materialları, -Bakı:-2017, -s. 338-342

8. Bəşirova, S.M., Cəfərov, Y.D., Əliyev, S.M. Qamma-kvantların təsirilə kiçik ölçülü Si+H₂O sistemində gedən suyun radiolizi prosesindən molekulyar hidrogenin alınması // “Koordinasion birləşmələr kimyası: Analitik kimyanın aktual problemləri” mövzusunda Beynəlxalq Elmi konfransın materialları, -Bakı: -2017, -s. 159-160.

9. Bəşirova, S.M., Cəfərov, Y.D. Si+H₂O sistemində suyun termiki və radiasiya-termiki parçalanmasından alınan molekulyar hidrogenin tədqiqi // “Ekologiya: təbiət və cəmiyyət problemləri” mövzusunda III Beynəlxalq Elmi konfransın materialları, Bakı: -2017, -s. 148-149.

10. Jafarov, Y.D., Bashirova, S.M., Aliyev, S.M. Dependence of the yield of molecular hydrogen obtained from radiation-heterogeneous decomposition of water on particle size of silica and filling rate of particle surface of water in Si+H₂O system by the influence of gamma-quanta // Journal of Radiation Researches, -Baku: -2017, Vol.4, №2, -p. 16-23.

11. Bəşirova, S.M. Qamma-kvantların təsirilə nano-Si+H₂O sistemində suyun radiolizindən alınan molekulyar hidrogenin radiasiya-kimyəvi çıxımının silisium kütləsindən və hissəcik ölçüsündən asılılığı // Ümummilli lider Heydər Əliyevin anadan olmasının 95-ci ildönümünə həsr olunmuş Gənc Tədqiqatçıların II Beynəlxalq Elmi Konfransının materialları, -Bakı: -2018, -s. 87-89.

12. Джафаров, Я.Д. Влияние массового и размерного эффектов кремния на процесс радиоллиза воды, протекающего в системе Si+H₂O под воздействием гамма-квантов/Я.Д. Джафаров, С.М.Баширова, А.А. Гарибов, К.Т. Эюбов // Вопросы атомной науки и техники, Национальный научный центр “Харьковский физико-технический институт”, -Харьков: -2018, -с. 35-39.

13. Bəşirova, S.M. Nano - Si-un müxtəlif sıxlıqda su buxarı ilə təmasda, suyun termiki və radiasiya-termiki çevrilməsindən molekulyar hidrogenin alınması / S.M.Bəşirova, A.P. Abdullayev, S.İ. Hüseynova, Y.D. Cəfərov // Azərbaycan Milli Aerokosmik Agentliyinin xəbərləri, -Bakı: -2018, №2(21), -s. 56-61.

14. Bəşirova, S.M. Nano-Si+H₂O sisteminə qamma-kvantların təsirilə suyun radiolizindən alınan molekulyar hidrogenin radiasiya-

kimyəvi çıxımının silisim hissəciklərinin kütlə və ölçüsündən asılılığı // Milli Aviasiya Akademiyasının Elmi Əsərləri, -Bakı: -2018, №1, -s. 116-122.

15. Bəşirova, S.M. İonlaşdırıcı şüaların təsirilə nanohissəcik/su sistemində nanohissəcik səthindən su daxilinə emissiya olunan elektronların faiz nisbətinin hesablanması / S.M.Bəşirova, Y.D. Cəfərov, V.S. Mirzəyev, K.T. Eyubov // Radiasiya Problemləri İnstitutu, -Bakı: -2018, cild 5, №2, -s. 133-139.

16. Джафаров, Я.Д. Получение молекулярного водорода, образованного термическим и радиационно-термическим превращением воды в системе нано-Si+H₂O / Я.Д. Джафаров, С.М. Баширова, К.Т. Эюбов, А.А. Гарибов // Вопросы атомной науки и техники, Национальный научный центр “Харьковский физико-технический институт”, -Харьков: -2019, №1, -с. 55-60.

17. Bəşirova, S.M. Elektronların təsirilə nanohissəcik/su sistemində nanohissəcik səthindən su daxilinə emissiya olunan elektronların hesablanması // Azərbaycan Milli Aerokosmik Agentliyinin xəbərləri, -Bakı: -2019, №3(22), -s. 62-68.

18. Баширова, С.М. Влияние массы кремния на процесс радиолитического распада, протекающего при воздействии γ -квантов на суспензионную систему нано- Si/H₂O // “EurasiaScience” XXV Международная научно-практическая конференция, Научно-издательский центр “Актуальность.РФ”, -Москва: -2019, -с.3-4.

19. Bashirova, S.M. The impact of silicon mass on the radiolysis process occurring under the influence of γ -quanta on nano- Si/H₂O suspension system // Journal of Radiation Researches, -Baku: -2019, Vol.6, №2, -p. 89-96.

Dissertasiyanın müdafiəsi « 17 » dekabr 2021-ci il tarixdə, saat 15:00 -da AMEA-nın Radiasiya Problemləri İnstitutu nəzdində fəaliyyət göstərən FD1.21 Dissertasiya Şurasının iclasında keçiriləcək.

Ünvan: AZ 1143, Bakı, B.Vahabzadə küçəsi, 9.

Dissertasiya ilə AMEA-nın Radiasiya Problemləri İnstitutunun elmi kitabxanasında tanış olmaq mümkündür

Dissertasiya və avtoreferatın elektron versiyaları AMEA-nın Radiasiya Problemləri İnstitutunun rəsmi internet saytında yerləşdirilmişdir

Avtoreferat « 15 » noyabr 2021-ci il tarixində zəruri ünvanlara göndərilmişdir.

Çapa imzalanıb: 11.11.2021

Kağızın formatı: A5

Həcm: 39630

Tiraj: 100