

AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI

Əlyazması hüququnda

**3C-SiC NANOKRİSTALINDA NEYTRON SELİNİN TƏSİRİ İLƏ BAŞ
VERƏN RADİOAKTİV ÇEVİRİLMƏLƏR VƏ ONLARIN ELEKTRON
PROSESLƏRİNƏ TƏSİRİ**

İxtisas: 2225.01. Radiasiya materialşünaslığı

Elm sahəsi: Fizika

Elmlər doktoru elmi dərəcəsi almaq üçün təqdim edilmiş

DİSSERTASIYA

İddiaçı: _____ **f.ü.f.d., dos. Elçin Məmmədəli oğlu Hüseynov**

Bakı – 2021

M Ü N D Ə R İ C A T

GİRİŞ.....	6
I FƏSİL. NANOKRİSTALLİK SiC VƏ ONUN FƏRQLİ POLİTİPLƏRİ ÜZRƏ ƏDƏBİYYAT XÜLASƏSİ.....	16
1.1 Silisium karbidin müxtəlif politipləri və onlar haqqında ümumi məlumat.	17
1.2 Nanokristallik silisium karbid və onun özünəməxsus fiziki xassələri.....	24
1.3 Müxtəlif üsullarla SiC nanohissəciklərinin alınması.....	36
1.4 Silisium karbidin ionlaşdırıcı mühitlərdə tətbiq imkanları və mümkün radiasiya effektləri.....	41
1.5 Ədəbiyyat xülasəsinin nəticələri və dissertasiya işinin mövzusunun əsaslandırılması.....	47
II FƏSİL. FİZİKİ XASSƏLƏR VƏ NEYTRONLARLA ŞÜALANDIRMA METODİKALARI.....	55
2.1 TRİGA Mark II tipli tədqiqat nüvə reaktoru neytron mənbəsi kimi.....	57
2.2 Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin neytron seli ilə şüalandırılma və aktivlik analizləri metodiası.....	59
2.3 3C-SiC nanokristallarının struktur və nanoskopik tədqiqi üsulları.....	63
2.4 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin termal parametrlərinin ölçmə üsulları.....	68
2.5 3C-SiC nanokristallarının elektrik və dielektrik xassələrinin öyrənilmə metodikaları.....	74
2.6 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin paramaqnit xüsusiyyətlərinin tədqiqi metodikası.....	83
2.7 Xətalarnın müəyyən edilmə metodikası.....	88

III FƏSİL. NEYTRONLARLA ŞÜALANDIRILMIŞ NANOKRİSTALLİK 3C-SiC - in k_0 INAA, TEM, SEM ANALİZLƏRİ VƏ QURULUŞ XÜSUSİYYƏTLƏRİNİN TƏDQIQI.....	93
3.1 Nano 3C-SiC hissəciklərinin neytron aktivləşmə analizləri.....	94
3.2 Neytron selinin təsirinə məruz qalmış nano SiC hissəciklərinin TEM və SEM tədqiqi.....	104
3.3 Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin struktur analizləri.....	109
3.4 Təcrübi nəticələrin müzakirəsi.....	115
IV FƏSİL. NEYTRON SELİNİN NANOKRİSTALLİK 3C-SiC HİSSƏCİKLƏRİ İLƏ QARŞILIQLI TƏSİRİNİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKALARININ MODELLƏŞDİRİLMƏSİ.....	117
4.1 Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərində neytron zəbti.....	118
4.2 Neytron selinin təsiri ilə nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərdə (n, p) və (n, α) çevrilmələri.....	126
4.3 Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərindən neytron selinin səpilməsi.....	137
4.4 Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərində neytron selinin təsiri ilə defekt hallarının yaranması.....	149
4.5 Təcrübi nəticələrin müzakirəsi.....	161
V FƏSİL. NEYTRON SELİNİN NANOKRİSTALLİK 3C-SiC HİSSƏCİKLƏRİNİN ELEKTRİK XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ.....	164
5.1 3C-SiC nanokristallarının elektrik keçiriciliyində neytronlarla şüalanma effektləri.....	166
5.1.1 Elektrik keçiriciliyinin tezlik asılılığında neytron şüalanma effektləri..	167
5.1.2 Elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılığında neytron şüalanma effektləri.....	177

5.2	Neytron şüalanmanın nanokristallik 3C-SiC-in impedans spektrlərinə təsiri.....	182
5.2.1	İmpedansın tezlik asılılığında neytron şüalanma effektləri.....	183
5.2.2	İmpedansın temperatur asılılığında neytron şüalanma effektləri.....	191
5.3	3C-SiC nanokrsitallarının Volt-Amper xarakteristikalarında neytron şüalanma effektləri.....	199
5.4	Təcrübi nəticələrin müzakirəsi.....	206
VI FƏSİL. NEYTRON SELİNİN NANOKRİSTALLİK 3C-SiC HİSSƏCİKLƏRİNİN DİELEKTRİK VƏ PARAMAQNİT XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ.....		
209		
6.1	Neytron selinin nanokristallik 3C-SiC-in dielektrik nüfuzluğuna təsirinin tədqiqi.....	211
6.1.1	Dielektrik nüfuzluğunun tezlik asılılığında neytron şüalanma effektləri.....	212
6.1.2	Dielektrik nüfuzluğunun temperatur asılılığında neytron şüalanma effektləri.....	219
6.2	Neytronlarla şüalanmanın nanokristallik 3C-SiC-in dielektrik itkilərinə təsiri.....	225
6.3	Neytron selinin təsirinə məruz qalmış nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin EPR tədqiqi.....	233
6.4	Təcrübi nəticələrin müzakirəsi.....	240
VII FƏSİL. NEYTRON SELİNİN NANOKRİSTALLİK 3C-SiC HİSSƏCİKLƏRİNİN TERMİK XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ.....		
243		
7.1	Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin termik parametrlərinin DSC metodu ilə tədqiqi.....	244
7.2	DTA, TGA və DTG metodları ilə nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin termofiziki parametrlərinin öyrənilməsi.....	252
7.3	Silisium karbid (3C-SiC) nanokristallarına neytron selinin təsirinin DSC	

spektroskopiyası ilə öyrənilməsi.....	262
7.4 Neytron selinin təsiri altında nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin DTA, TGA və DTG spektroskopik analizləri.....	270
7.5 Təcrübi nəticələrin müzakirəsi.....	281
ƏSAS NƏTİCƏLƏR.....	284
DİSSERTASIYANIN ƏSAS NƏTİCƏLƏRİ ÜZRƏ ÇAP OLUNMUŞ ELMİ İŞLƏRİN SİYAHISI	287
İSTİFADƏ EDİLMİŞ ƏDƏBİYYAT.....	291
İXTİSARLARIN SİYAHISI.....	328

GİRİŞ

Mövzunun aktuallığı və işlənmə dərəcəsi. Son zamanlar mikro və nano elektronikada yeni materialların alınması və ya mövcud materialların yenidən işlənməsi dünya tədqiqatçılarının diqqət mərkəzindədir. SiC fiziki və kimyəvi xassələrinə görə elektronikada geniş tətbiq oluna bilən mükəmməl materialdır. Yüksək temperatura davamlılığı, qüsursuz strukturu, mexaniki davamlılığı, aşağı oksidləşmə qabiliyyəti SiC – in tətbiq potensialını artırır. Heyrətamiz mexaniki və funksional xassələrinin kombinasiyası SiC – in müasir mikro və nano elektronikada yarımkeçirici kimi geniş tətbiqinin əsasıdır. Silisium karbidi təşkil edən Si və C atomları müxtəlif modifikasiyalarda formalaşaraq 200 – dən artıq politip yaradır. Mükəmməl mexaniki və kimyəvi davamlılığının əsas səbəbi mövcud politiplərin əksəriyyətində atomlararası məsafənin az olmasıdır. Əlavə olaraq, silisium karbid politipindən asılı olaraq (2,4eV – 3,2eV) geniş qadağan olunmuş zolaq eninə malik yarımkeçiricidir. SiC fərqli politiplərdə amorf, polikristallik və ya monokristallik hallarda formalaşa bilər. Silisium karbidin politipləri içərisində ən geniş tətbiq olunanları kubik (3C-SiC) və heksaqonal (4H-SiC və 6H-SiC) modifikasiyalı birləşmələridir. Multifunksional xassələrə malik olan nanokristallik 3C-SiC nanoelektronik qurğularda geniş istifadə imkanına malikdir. Məhz bu səbəbdən, təqdim olunan işdə bütün eksperimentlərdə kubik modifikasiyalı nano 3C-SiC (həmçinin β -SiC kimi də tanınır) hissəciklərindən istifadə olunmuşdur.

Materiallar nano ölçülərdə çox böyük xüsusi səth sahəsinə (Specific Surface Area - SSA) malik olduqları üçün, fərqli fiziki xüsusiyyətlərə malik olurlar. Nano ölçülərdə digər materiallarda olduğu kimi, silisium karbidin də özünəməxsus funksional və yeni fərqli fiziki xassələri mövcuddur. Nanomateriallarda xüsusi səth sahəsinin böyük olması səthdə baş verən fiziki proseslərdə və xüsusən də elektrofiziki proseslərdə kəskin fərqin yaranmasına səbəb ola bilər.

Hal – hazırda dünyada ən aktual problemlərdən biri, nano ölçülərdə materialların fiziki xassələrinin idarə edilməsi və ya dəyişdirilməsindən ibarətdir. Bu istiqamətdə tədqiqatçılar tərəfindən müxtəlif yanaşmalar olsa da, neytron seli ilə

silisium karbid nanokristallarında mümkün dəyişikliyin yaranması öyrənilməmişdir. Bu yanaşmada, təqdim olunan dissertasiyanın məzmunu, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərini neytron seli ilə aşqarlamaqdan ibarətdir. Belə ki, nanomateriallar çox kiçik ölçülü və həssas olduğundan onların aşqarlanması üçün neytron selindən istifadə mükəmməl vasitədir. Neytron seli ilə materialların aşqarlanması günümüzdə qədər dünyanın ən dəqiq və həssas aşqarlanması hesab edilir. İşdə əsas məqsədlərdən biri mikro və nanoelektronikada çox geniş tətbiq sahəsinə malik nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fiziki xassələrini neytron seli ilə idarə etmək və ya mümkün dəyişikliklər yaratmaqdır. Neytronlarla modifikasiya olunmuş nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yeni və fərqli tip əlavə aşqar elementlər yarana bilər. Təbii halda nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində mövcud silisiumun 92.23% - i ^{28}Si , 4.67% - ^{29}Si və 3.1% - i ^{30}Si izotopunun payına düşür. Sadalanan silisium izotoplarının hər üçü stabil izotopdur və heç bir radioaktiv çevrilməyə məruz qalmır. Lakin, neytronla şüalanma zamanı, ^{30}Si izotopu bir neytron zəbt edərək ^{31}Si radioaktiv izotopuna çevrilir. ^{31}Si izotopu isə 157.36 dəq yarımparçalanma müddətinə malik β aktiv izotopdur. β parçalanma nəticəsində ^{31}Si izotopu ^{31}P izotopuna çevrilir və ^{31}P izotopu 3C-SiC nanomaterialında n-tip aşqar olur.

Neytronlarla şüalanma müddətinə mütənasib olaraq ^{31}P izotopunun konsentrasiyasının artması və ya azaldılması nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fiziki xassələrinin dəyişməsinə səbəb olur. Qeyd edək ki, çox aşağı ehtimalla ikinci nüvə reaksiyası baş verə bilər. ^{31}P izotopu bir neytron zəbt edərək ^{32}P izotopuna çevrilə bilər. ^{32}P izotopu isə 14 gün yarımparçalanma müddətinə malik β aktiv izotopdur ki, bu da stabil ^{32}S izotopuna çevrilir. Bunu qeyd etmək önəmlidir ki, ^{32}S izotopunun yaranma ehtimalı çox aşağıdır və miqdarı birbaşa ^{31}P izotopunun konsentrasiyasından asılıdır. Anoloji yanaşma ilə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərini ^{14}N izotopları ilə də aşqarlamaq olar. Lakin bu proses bir qədər mürəkkəbdir və aşağı effektivliyə malikdir. Bu səbəbdən, təqdim olunan işdə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin sadəcə ^{31}P izotopları ilə aşqarlanması və fiziki xassələrinin idarə edilməsi proseslərinə baxılmışdır.

Dissertasiya işində aparılan bütün təcrübələr AMEA – nın Radiasiya

Problemləri İnstitutu və Sloveniyanın Jozef Stefan İnstitutunun müxtəlif mərkəzləri və laboratoriyalarında yerinə yetirilmişdir. Neytron mənbə kimi Jozef Stefan İnstitutunun “Reaktor Mərkəzində” TRIGA Mark II yüngül su tipli tədqiqat nüvə reaktoru istifadə edilmişdir.

Tədqiqatın məqsəd və vəzifələri – Neytron selinin təsiri ilə 3C-SiC nanokristallarının fiziki xassələrini dəyişmək, müxtəlif spektroskopik yanaşmalarla baş verən dəyişiklikləri araşdırmaq, nanomaterial daxilində mümkün neytron çevrilmələrini öyrənmək, neytron transmutasiya üsulu ilə nanokristalın aşqaralamaq və aşqarlanmış nanokristalın xüsusiyyətlərinin tədqiqindən ibarətdir.

Tədqiqat metodları: İşdə tədqiqat obyektini olaraq $120 \text{ m}^2/\text{q}$ xüsusi səth sahəsinə, 18nm ölçülü hissəciklərə və $0.03 \text{ q}/\text{sm}^3$ (həqiqi sıxlıq $3.216 \text{ q}/\text{sm}^3$) sıxlığa malik kubik modifikasiyalı nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəcikləri istifadə edilmişdir. Tədqiqat işində məqsədə nail olmaq üçün aşağıda qeyd olunan bir neçə tədqiqat metodu və üsullarından istifadə edilmişdir:

3C-SiC nanokristallarını neytron seli ilə modifikasiya etmək məqsədilə JSI TRIGA Mark II tipli tədqiqat nüvə reaktorundan istifadə edilmişdir. JSI TRIGA Mark II reaktorunun maksimal iş gücü 250kVt – dır. Təcrübələr aparılan reaktorun soyutma sistemi olaraq yüngül sudan istifadə olunur. Tədqim olunan dissertasiya işində bütün nümunələr TRIGA Mark II reaktorunun mərkəzi kanalında neytron seli ilə şüalandırılmışdır. Təcrübələr aparılan nüvə reaktorunun mərkəzi kanalı (Central Channel - CC) alüminium boru ilə əhatə olunmuşdur. Eyni zamanda digər şüalandırma kanalları da, mərkəzi kanal ətrafında F15, F19, F22, F24 və F26 nömrələri ilə yerləşdirilmişdir. Bundan əlavə qeyd olunan TRIGA Mark II reaktorunun D8, E10 və E11 vəziyyətərində üçbucaq şüalandırma kanalları mövcuddur. Qeyd edək ki, təcrübələr aparılan reaktorun daxilində neytron selinin sıxlığını mütəmadi öyrənmək və nəzarətdə saxlanmaq məqsədilə daxili diametri 8mm ilə 10mm aralığında dəyişən bir neçə ölçü yuvaları mövcuddur. Təcrübələr aparılan TRIGA Mark II reaktorunun mərkəzi kanalında tam güc rejmində mövcud neytron selinin parametrləri termal neytronlar üçün $5.107 \times 10^{12} \text{ n}/\text{sm}^2 \cdot \text{san}$ (1 ± 0.0008 , $E_n <$

625eV), epitermal neytronlar üçün 6.502×10^{12} n/sm²san (1 ± 0.0008 , $E_n \sim 625\text{eV} \div 0.1\text{MeV}$), sürətli neytronlar üçün 7.585×10^{12} n/sm²san (1 ± 0.0007 , $E_n > 0.1\text{ MeV}$) və nəhəyyət bütün neytronlar üçün mərkəzi kanalda sel sıxlığı 1.920×10^{13} n/sm²san (1 ± 0.0005) kimidir. Növbəti təcrübənin məqsədindən asılı olaraq nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri tabletka və toz halında xüsusi formada hazırlanaraq reaktorun kanalına uyğun yüksək təmizliyə malik alüminium silindərdə yerləşdirilmişdir. Reaktor kanalına uyğun alüminium silindir reaktorun mərkəzi şüalandırma borusuna yerləşdirilmişdir, hansı ki bu kanalda neytron selinin sıxlığı 2×10^{13} n/sm²san kimidir. Təhlükəsizlik məqsədilə şüalandırma ilkin mərhələdə 5 dəqiqə aparılmışdır və nümunənin aktivlik dərəcəsi, şüalanmaya həssaslığı və digər lazımı parametrləri analiz edilmişdir. Mərkəzi kanalda nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri 1, 5, 10 və 20 saata qədər kəsilməz olaraq neytron seli ilə şüalandırılmışdır. Neytron selinin təsiri ilə nüvə çevrilmələri nəticəsində nümunələrin aktivliyi təqribən 3 GBq – ə qədər artmışdır. Aktiv izotopların parçalanma müddətindən asılı olaraq bütün ölçmələr neytron selinin təsirindən təqribən 500 saat sonra aparılmışdır (aparılan təcrübələrdə soyuma vaxtı olaraq 500saat götürülmüşdür). Qeyd edək ki, neytron selinin təsiri altında nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində mümkün radioaktiv çevrilmələr və yeni izotopların öyrənilməsi məqsədi ilə k_0 -INAA metodu tətbiq edilmişdir. Eyni zamanda, neytron seli ilə 3C-SiC nanokristallarının qarşılıqlı təsirinin ümumi halda təsviri və effektiv neytron enerjisinin öyrənilməsi məqsədilə şüalanmadan öncə kompüter modelləşdirilməsi aparılmışdır.

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərin ölçü və səth morfolojiyasının HRTEM, TEM, FESEM və SEM üsullar ilə analizləri aparılmışdır. Eyni zamanda 3C-SiC nanokristallarının quruluşuna neytron selinin təsiri SAED, EDP və rentgenfaza üsulu ilə tədqiq olunmuşdur. Neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra nümunələrin TEM, SAED və EDP analizləri “TEM, Jeol JEM-2010F” cihazında effektiv gərginliyin 200 kV qiymətində aparılmışdır. TEM qurğusunda analizlər zamanı nümunə mis-karbon ilə üzünib vakuüm quruducusunda qurudulduqdan sonra yüksək vakuüm altında aparılmışdır. Həmçinin nisbətən böyük ölçülərdə (təqribən 200nm) aqloremasiyanın öyrənilməsi məqsədi ilə nümunələrin ilkin və neytron

selinin təsirinə məruz qaldıqdan sonra sahə emmissiyalı SEM şəkilləri "FE-SEM, Jeol JSM-7600" cihazında effektiv gərginliyin 7 – 10 kV və iş məsafəsinin 8mm (working distance - WD) qiymətində çəkilməmişdir. TEM tədqiqatlarından fərqli olaraq SEM analizləri birbaşa nümunə üzərində üzlənmə olmadan və ətraf mühitin təsirini minimuma endirmək məqsədilə vakuumba aparılmışdır.

Dissertasiyada işində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin termik parametrləri "Perkin Elmer" STA 6000 cihazında tədqiq edilmişdir. "Perkin Elmer" STA 6000 cihazında işçi oblast 290K-1273K, termik işləmə sürəti 5 K/dəq, 10K/dəq, 15K/dəq və 20K/dəq, PolyScience analizatoru və "digital temperature controller" soyuducu sistemidir. İşdə "Pyris Manager" proqram təminatından istifadə olunaraq kinetik parametrlər təyin olunmuşdur. Təcrübələr aparılan "Perkin Elmer" STA 6000 cihazı eyni zamanda həm kütlə dəyişməsinə, həm də, sistemdə baş verən istilik mübadiləsinə ölçməyə imkan verir. Belə ki, bu cihazda asanlıqla eyni zamanda nümunənin DSC, DTA, TGA və TG kimi parametrlərini öyrənmək mümkündür. "Perkin Elmer" STA 6000 cihazı müasir temperastur sensoru və kütlə qeydedicisi ilə təchiz olunmuşdur və bu təcrübələrdə nəticələrin mükəmməl olmasına imkan yaratmışdır. Təcrübələr zamanı yanma məhsullarının sistemdən xaric edilməsi və kondensasiya prosesinin qarşısının alınması məqsədi ilə arqon təsirsiz qazından istifadə edilmiş və sistemə 20ml/dəq sürət ilə verilmişdir.

Neytronlarla aşqarlanmanın impedans spektroskopiyası ilə araşdırılması və 3C-SiC nanokristallarının impedans spektrlərinin qarşılıqlı təhlili məqsədilə impedans spektroskopiyaya üsulundan istifadə edilmişdir. Şüalanmadan öncə və sonra nümunələrin səthinə xüsusi şəraitdə püskürmə üsulu ilə qızıl kontaktlar vurulub və onun keyfiyyəti yoxlanılıb. Sonra platin altlıq və üstlükdən istifadə edilərək nümunələrin elektrik və dielektrik xüsusiyyətləri "Novocontrol Alpha High Resolution Dielectric Analyzer" cihazında dəyişən sahə üçün (~1V) temperaturun 100 – 400 K intervalında və tezliyin 0.1Hz – 2.5MHz aralığında öyrənilmişdir. Ölçmələr zamanı temperaturun hər hansı dərəcədə saxlanma dəqiqliyi 10^{-2} K kimi olmuşdur və bu dəqiqlik körpü metodu ilə əldə edilmişdir (Pt100 resistor). Digər tərəfdən, 3C-SiC nanokristallarının volt – amper (V – A) xarakteristikaları "Keithley

238 High Current Source Measurement Unit” cihazında ölçülmüşdür. Bu halda, bütün təcrübələr otaq temperaturunda gərginliyin -100V - +100V aralığında və 5V addımla aparılmışdır. Təcrübələrdə histerik ölçmələr aparılmışdır (gərginliyin -100V qiymətindən +100 qiymətinə qədər və əksinə). Təcrübələr zamanı altlıq olaraq mis lövhədən istifadə edilmiş və üst tərəfdən kontakt tipi fərqli vəziyyətlərdə idarə edilmişdir. Bütün təcrübələrdə hər nümunə üçün bir neçə fərqli kontakt vəziyyətlərində ən azı 3 dəfə təkrar ölçmələr aparılmışdır.

EPR təcrübələri zamanı hazırlanmış nümunələr hər biri təqribən 50 µl (1.5mg) olmaqla hündürlüyü 5mm, iç diametri 2,5mm olan silindir formalı yüksək təmizliyə malik kvars borucuqlara doldurulmuşdur. Qeyd edək ki, kənar effektləri minimuma endirmək məqsədilə, təcrübələrdə istifadə olunan nümunələr kvars borulara doldurulmadan öncə müxtəlif müddətlərdə neytron seli ilə şüalandırılmışdır. Neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra nümunələrin EPR analizləri “Bruker ELEXSYS E500 EPR spectrometer with high-Q resonator” cihazında aparılmışdır (500 - 5500G genişlikdə, mərkəzi sahənin 3300G qiymətində (Full sweep analysis, sweep = 500 G to 5500 G at center field of 3300 G = 0.33 T)).

- **Müdafiyyə çıxarılan əsas müddəalar:**

- Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində mümkün neytron çevrilmələri
- Neytron selinin 3C-SiC nanokristallarının strukturunda yaratdığı dəyişikliklər
- 3C-SiC nanokristallarında qarşılıqlı təsir zamanı effektiv neytron enerjisi
- Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərin səth morfologiyası, materialın nanokristallik təbiəti, aqloremasiya və amorflaşma dərəcəsi
- Neytron seli ilə 3C-SiC nanokristallarının fərqli konsentrasiyalarda n – tip aşqarlanması
- 3C-SiC nanokristallarında radiasiya səbəbindən keçiricilik (RIC)
- 3C-SiC nanokristallarının elektrik və dielektrik xassələrində neytronlarla çevrilmə effektləri
- Neytron selin təsiri altında nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində defektəmələgəlmə prosesləri
- Neytron selinin təsiri altında 3C-SiC nanokristallarında relaksasiya müddəti və

metal-yarımkəçirici keçidi

- 3C-SiC nanokristallarının termik parametrlərində neytronlarla şüalanma effektləri

Tədqiqatın elmi yeniliyi: Tədqim olunan dissertasiya işində ilk dəfə olaraq:

- 3C-SiC nanokristallarında neytron çevrilmələri tapılmış və nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri daxilində neytron transmutasiyası üsulu ilə nanokristal struktur saxlanılaraq n – tip aşqarlar alınmışdır

- Neytron seli ilə şüalanma nəticəsində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində maksimum 70-80 nm tərtibində aqloremasiyanın olması HRTEM, TEM, FESEM və SEM analizləri ilə göstərilmişdir

- Neytron şüalanmadan sonra nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin səthində qalınlığı təqribən 3nm olan amorf təbəqə müəyyən edimişdir

- HRTEM analizləri ilə 3C-SiC hissəciklərinin nanokristallik təbiəti təstiqlənmiş və neytronlarla şüalanmadan sonra nanomaterialda yaranan defektlər və ya klasterlər “ləkələr” kimi müəyyən edilmişdir

- EDP, SAED və rentgenstruktur analizlərindən nanokristallik 3C-SiC politipinin qəfəs parametrləri (1 1 1), (2 0 0), (2 2 0), (3 1 1), (2 2 2), $a=b=c=4,377565$ və $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ kimi təyin olunmuşdur

- Kompüter modelləşməsi ^{28}Si , ^{29}Si və ^{30}Si izotoplarında udulma spektrlərində müşahidə olunan rezonans halların minimal enerjisi uyğun olaraq $5 \cdot 10^{-2}$ MeV, 10^{-2} MeV və 10^{-3} MeV kimi tapılmışdır

- Neytron seli ilə şüalanma zamanı 3C-SiC nanokristallarında RIC keçiriciliyi müəyyən olunmuşdur

- Neytronlarla n – tip aşqarlanma nəticəsində 3C-SiC nanokristallarında elektrik keçiriciliyinin ədədi qiyməti $7.5 \cdot 10^{-4}$ S/m qədər və ya təqribən 5.5 dəfə artması göstərilmişdir

- İmpedans spektroskopiyasından tezliyin 0.1MHz, 1MHz və 2.5MHz qiymətlərinə uyğun olaraq $T_{MS} = 250\text{K}$, 325K və 370K temperaturlarda 3C-SiC nanokristallarında metal-yarımkəçirici keçidi tapılmışdır

- 3C-SiC nanokristallarının müqavimətinin neytronlarla şüalanmadan sonra təqribən 4 MΩ-dan 1 MΩ-a qədər azalması göstərilmişdir
- Neytronlarla şüalanmadan sonra g – faktorun fərqli qiymətlərində paramagnit mərkəzlərin ümumi sayının 1.5×10^{20} mərkəz/q – dan 2.7×10^{20} mərkəz/q – a qədər (təqribən iki dəfə) artması göstərilmişdir
- 3C-SiC nanokristallarının neytronlarla şüalanma müddətinin artması nəticəsində sərbəst elektronlara uyğun mərkəzlərin, başqa sözlə n – tip aşqarların konsentrasiyasının təqribən 0.7×10^{16} qədər olması müəyyən edilmişdir
- 3C-SiC nanokristallarında Debay temperaturunun nanomateriallar üçün xarakterik olaraq 1200K – dən 800K - ə qədər azalması göstərilmişdir
- Neytron seli ilə modifikasiya olunmuş nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin xüsusi istilik tutumu, istilik axını, oksidləşmə reaksiya sürəti, aktivləşmə enerjisi, Gibbs enerjisi entalpiya və entropiyası müəyyən edilmişdir

Tədqiqatın nəzəri və praktiki əhəmiyyəti: Dissertasiya işində alınmış əsas elmi nəticələrə uyğun olaraq demək olar ki, nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri neytron seli ilə kristallik struktura təsir etmədən n – tip aşqarlanaraq müxtəlif mühitlərdə mükəmməl material kimi nanoelektronikada tətbiq oluna bilər. Eyni zamanda dissertasiyada göstərilmişdir ki, neytron seli ilə modifikasiya olunaraq 3C-SiC nanokristallarının bəzi fiziki xüsusiyyətləri idarə oluna bilər ki, bu da bu materialın elektronikada tətbiq imkanlarını artırır. Ümumi yanaşmada nanomaterialların fiziki xassələrinin idarə edilməsi çox mürəkkəb və önəmli məsələdir. Aparılan təcrübələr göstərmişdir ki, neytron selinin təsir müddəti ilə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaranan aşqar elementlərin konsentrasiyasını idarə etmək olar. Yeni yaranmış aşqar elementlərin konsentrasiyasının dəyişməsi, birbaşa nanomaterialın fiziki xassələrinin dəyişməsinə səbəb olur. Dissertasiya işi, radiasiya materialşünaslığı, nüvə fizikası, nanostrukturalar və yarımkeçiricilər fizikası sahələrinin kombinasiyası çərçivəsində multidissiplinar şəkildə həyata keçirilmişdir. İşdə, neytron seli ilə modifikasiya olunaraq fərqli xüsusiyyətlərə malik yeni tip nanokristallik 3C-SiC materialı alınmışdır. Alınmış yeni material ilə mikroelektronik

avadanlıqların nanohissələrinin və ya nanoelektronika qurğularının faydalı iş əmsalının və ya istismar müddətinin uzadılması mümkündür. Eyni zamanda alınmış yeni və mükkəməl xüsusiyyətlərə malik nanomaterial iqtisadi cəhətdən daha əlverişlidir. Digər tərəfdən, nanomaterialın fiziki xassələrinin idarə olunması digər alternativ materialların bu materiallarla əvəz olunmasına imkan verəcəkdir.

Aprobasiyası və tətbiqi: Dissertasiya işinin ayrı-ayrı materialları bir neçə beynəlxalq və ölkədaxili konfranslarda məruzə və müzakirə edilmişdir. İşdə alınmış nəticələr beynəlxalq, ölkədaxili beynəlxalq və digər konfranslarda aşağıda qeyd olunan məruzələr ilə müxtəlif illərdə müzakirə edilmişdir.

- XXVII International Materials Research Congress, F2. Advances in functional semiconducting materials - IMRC 2018, 2879-2880, August 19-24, 2018, Cancun, Mexico
- Ümummilli lider Heydər Əliyevin anadan olmasının 95-ci ildönümünə həsr olunmuş Gənc Tədqiqatçıların II Beynəlxalq Elmi Konfransı, 67-69, 27-28 Aprel 2018, Bakı, Azərbaycan
- DPG-Frühjahrstagung und EPS-CMD27, Technische Universität Berlin, Deutsche Physikalische Gesellschaft e.V., 137/188, O 81.17, 11 - 16 March 2018, Berlin, Germany
- 27th International Conference Nuclear Energy for New Europe, 95-96/148, September 10 – 13, 2018, Portoroz, Slovenia
- 2rd International congress on semiconductor materials and devices, 120/121, 28-30 Aug, 2018 Ardahan-Turkey
- VIII International Conference, Semipalatinsk Test Site: Legacy and Prospects for Scientific and Technical Potential Development, 161-162/174, 11–13 Sep 2018, Kurchatov, Republic of Kazakhstan
- International scientific conference of students and young scientists "Lomonosov-2018", Moscow, 2018, p. 34.14.1-3
- XXI Simposio Chileno de Física Antofagasta, SOCHIFI, Area H: Materia Condensada Fis. Estado Solido, Chile, 2018, p.SPH04.1-2

- 11th International Conference «Nuclear and radiation physics» 374/450, September 12-15, 2017, Almaty, Republic of Kazakhstan
- 26th International Conference Nuclear Energy for New Europe 302-55/197, September 4-7, 2017, Slovenia
- I International scientific conference of young researchers, Baku Engineering University, May 05-06, 2017, Baku, Azerbaijan
- 25th International Conference Nuclear Energy for New Europe, 602, 42-43, Sep 5-8, 2016, Slovenia

Ümumi yanaşmada, neytron transmutasiyası nəticəsində alınmış yeni xüsusiyyətli 3C-SiC nanokristalları mikroelektronika, nanoelektronika, mikroelektromexaniki siztemlər (MEMS), nanoelektromexaniki sistemlər (NEMS) və ionlaşdırıcı mühitlər (peyk (fəza) texnologiyalarında, nüvə texnologiyalarında və s.) kimi bir sıra sahələrdə geniş tətbiq potensialına malikdir.

Dissertasiya işinin yerinə yetirildiyi təşkilatın adı: Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Radiasiya Problemləri İnstitutu.

Dissertasiyanın struktur bölmələrinin ayrılıqda həcmi qeyd olunmaqla dissertasiyanın işarə ilə ümumi həcmi: Təqdim olunan dissertasiya işi girişdə 18000 işarə, I fəsildə 59900 işarə, II fəsildə 54200 işarə, III fəsildə 33400 işarə, IV fəsildə 69800 işarə, V fəsildə 57200 işarə, VI fəsildə 42700 işarə, VII fəsildə 56500 işarə və nəticələrdə 5500 işarə olmaqla ümumilikdə 397200 işarədən ibarətdir.

I FƏSİL

NANOKRİSTALLİK SiC VƏ ONUN FƏRQLİ POLİTİPLƏRİ ÜZRƏ

ƏDƏBİYYAT XÜLASƏSİ

Nano ölçülərdə materialların fiziki xassələri makro ölçülərlə müqayisədə bir qədər fərqlənir. SiC nanokristalları da digər nanomateriallar kimi fərqli xüsusiyyətlərə malikdir. Bu fəsildə nanokristallik SiC hissəciklərinin müxtəlif politipləri haqqında ümumiləşdirici məlumat verilmişdir. Həmçinin SiC nanokristallarının özünəməxsus fiziki xassələri ətraflı şərh edilmişdir. Müxtəlif yanaşmalarla nano ölçülərdə SiC hissəciklərinin alınma texnologiyaları analiz edilmişdir. Eyni zamanda, silisium karbidin ionlaşdırıcı mühitlərdə tətbiq imkanları və SiC üzərində mümkün radiasiya effektləri ədəbiyyat materialları ilə analiz edilmişdir. Ümumi yanaşmada bu fəsildə nanokristallik SiC hissəciklərinin bəzi fiziki xassələri, müxtəlif politiplərin özünəməxsus xüsusiyyətləri, nano ölçülərdə kristallik materialların alınma texnologiyalar və silisium karbid birləşmələrinin ionlaşdırıcı mühitdə tətbiq imkanları haqqında dərc olunmuş elmi ədəbiyyatların icmalı verilmişdir. Digər nanomateriallara oxşar olaraq silisium karbidin də nano ölçülərdə fiziki xassələrinin makro ölçülərlə müqayisədə bir qədər fərqli olması araşdırılmışdır. Eyni zamanda, bu fəsildə ümumi yanaşmada silisium karbidin müxtəlif politipləri içərisində daha geniş yayılanları və heyvətəməz tətbiq imkanlarına malik olanları haqqında ümumiləşdirici məlumat verilmişdir. Həmçinin, dissertasiyada tədqiqat obyektı olaraq seçilmiş 3C-SiC politipi də daxil olmaqla bir neçə politipin kristallik fəza quruluşu müqayisəli analiz edilmişdir. Müxtəlif politiplərdə atomların düzülüşü, nano ölçülərdə mümkün qaçılmaz defektlər və digər krsitallik xüsusiyyətlər ədəbiyyatlarda məlum yanaşmalara uyğun şərh edilmişdir. Digər tərəfdən, nano ölçülərdə hissəcik səthinin mümkün modifikasiyaları və nanohissəcik səthində gedən bəzi proseslər ətraflı izah edilmişdir. Ümumi yanaşmada silisium karbidin ionlaşdırıcı mühitlərdə tətbiq imkanları və ionlaşdırıcı şüalanma

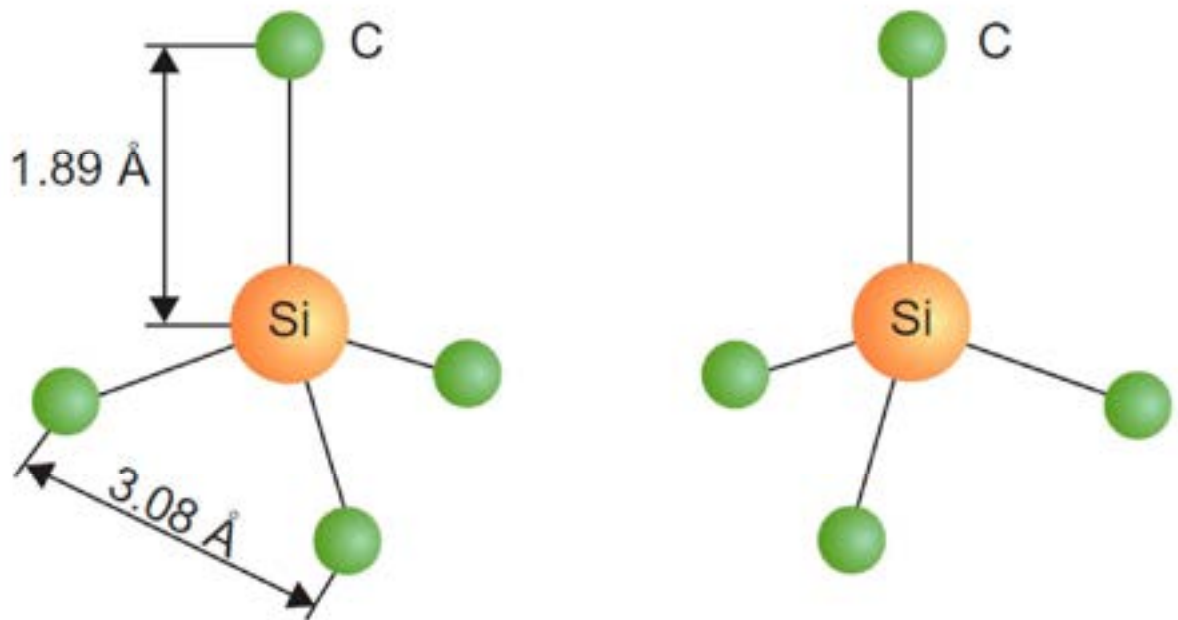
effektləri analiz edilmişdir. Müxtəlif temperaturlarda kosmik fəzada, nüvə reaktorlarında və eləcə də digər ionlaşdırıcı mühitlərdə istifadəsi zamanı silisium karbiddə radiasiya səbəbindən mümkün mexaniki dəyişikliklər ədəbiyyatlarda olan məlumatlarla izah edilmişdir. Bu fəslin sonunda, ədəbiyyat xülasəsinə aparılan müzakirələrin nəticələrinə uyğun olaraq dissertasiya işinin mövzusu əsaslandırılmışdır.

1.1. Silisium karbidin müxtəlif politipləri və onlar haqqında ümumi məlumat

Son zamanlar silisium karbid və onun müxtəlif tip kompozitləri dünya tədqiqatçıları tərəfindən nəzəri və təcrübi olaraq ətraflı araşdırılmaqdadır [51, s.98; 86, s.176; 115, s.53; 214, s.401; 313, s.305; 340, s.727; 377, s.118]. Mükəmməl fiziki və kimyəvi davamlılığa malik SiC ekstrenal mühitlərdə geniş tətbiq sahəsinə malikdir [14, s.177; 50, s.494; 225, s.220; 273, s.16501; 311, s.440; 366, s.198; 374, s.13944]. Ümumi yanaşmada silisiuma oxşar olaraq silisium karbid də geniş yayılmış kovalent rabitəli yarımkeçiricidir. Kristallik quruluş baxımından, hər bir silisium atomu dörd qonşu karbon atomu ilə kovalent birləşərək tetraedr formalaşdırır və əksinə (Şəkil 1.1.1). Formalaşmış tetraedrdə Si və C atomları arasında çox qısa və güclü rabitə mövcuddur [58, c.1, s.121-134; 93, c.1, s.61; 135, c.1, s. 63; 142, c.1, s.7; 222, c.22, s.97; 248, c.1, s.95; 249, c.2, s.14; 264, c.1, s.33; 288, c.1, s.45; 307, c.1, s.9; 308, c.1, s.32; 327, c.1, s.75]. Bu isə SiC birləşməsinin çox güclü kimyəvi və mexaniki davamlılığının əsasını təşkil edir.

SiC amorf, polikristal və monokristal kimi bir neçə hallarda formalaşa bilər. Eyni zamanda yüksək stabilliyə və yüksək temperatura davamlı olan SiC birləşməsi adətən 1000⁰C temperaturdan yuxarı temperaturlarda alınır və istifadəyə yararlıdır [308, c.1, s.33]. Silisium karbidi təşkil edən Si və C atomları müxtəlif modifikasiyalarda formalaşaraq 200 – dən artıq politip yaradır. Ədəbiyyatlarda SiC – in 200 – ə qədər politipləri haqqında ətraflı məlumatlara rast gəlmək olar. Bunlar içərisində ən geniş yayılanları kubik, heksoqonal və röhədririk politipləridir. Müasir

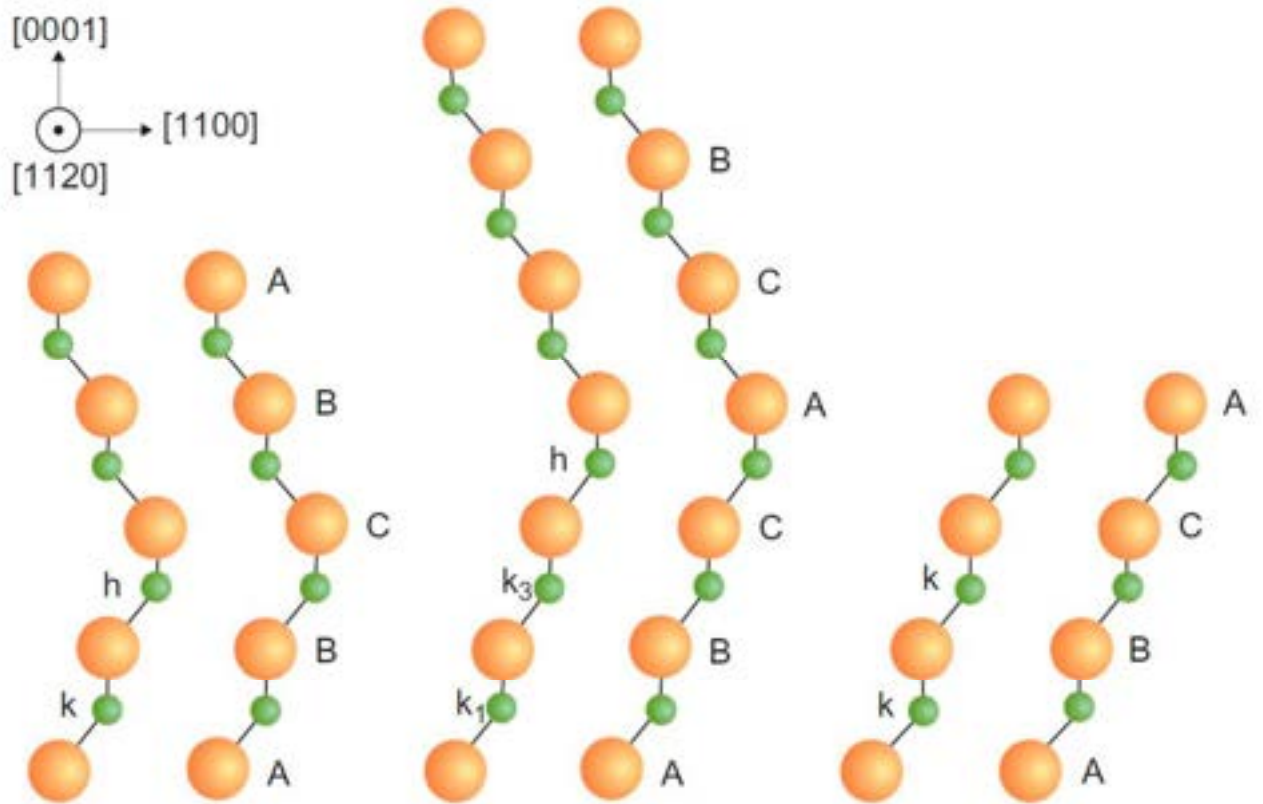
zamanda fərqli tip texnologiyalarda ən geniş tətbiq olunan SiC politipləri kubik (3C-SiC və ya β -SiC) və iki heksaqonal (4H-SiC və 6H-SiC və ya sadəcə olaraq α -SiC) modifikasiyalarıdır. SiC – in hər iki heksaqonal politipi fiziki xüsusiyyətlərinə görə kubik simmetriyaya oxşardır. Hər üç politipin fəza quruluşu Şəkil 1.1.2 – də təsvir edilmişdir. Şəkildə mövcud “k” (k-tip atomlar) və “h” (h-tip atomlar) işarələri uyğun olaraq kubik və heksaqonal simmetriyanı xarakterizə edir. Qeyd edək ki, mövcud politiplər içərisində yalnız 3C-SiC politipi tam kubik simmetriyaya malikdir. Eyni zamanda SiC – in geniş yayılmış üç politipinin üçölçülü təsviri şəkil 1.1.3 –də verilmişdir (ABC, ABCB və ABCACB təkrarlanmalar ilə).



Şəkil 1.1.1 SiC birləşməsində iki tip tetraedrin formalaşması (biri digərinin c-oxu ətrafında 180° fırlanmasının nəticəsidir).

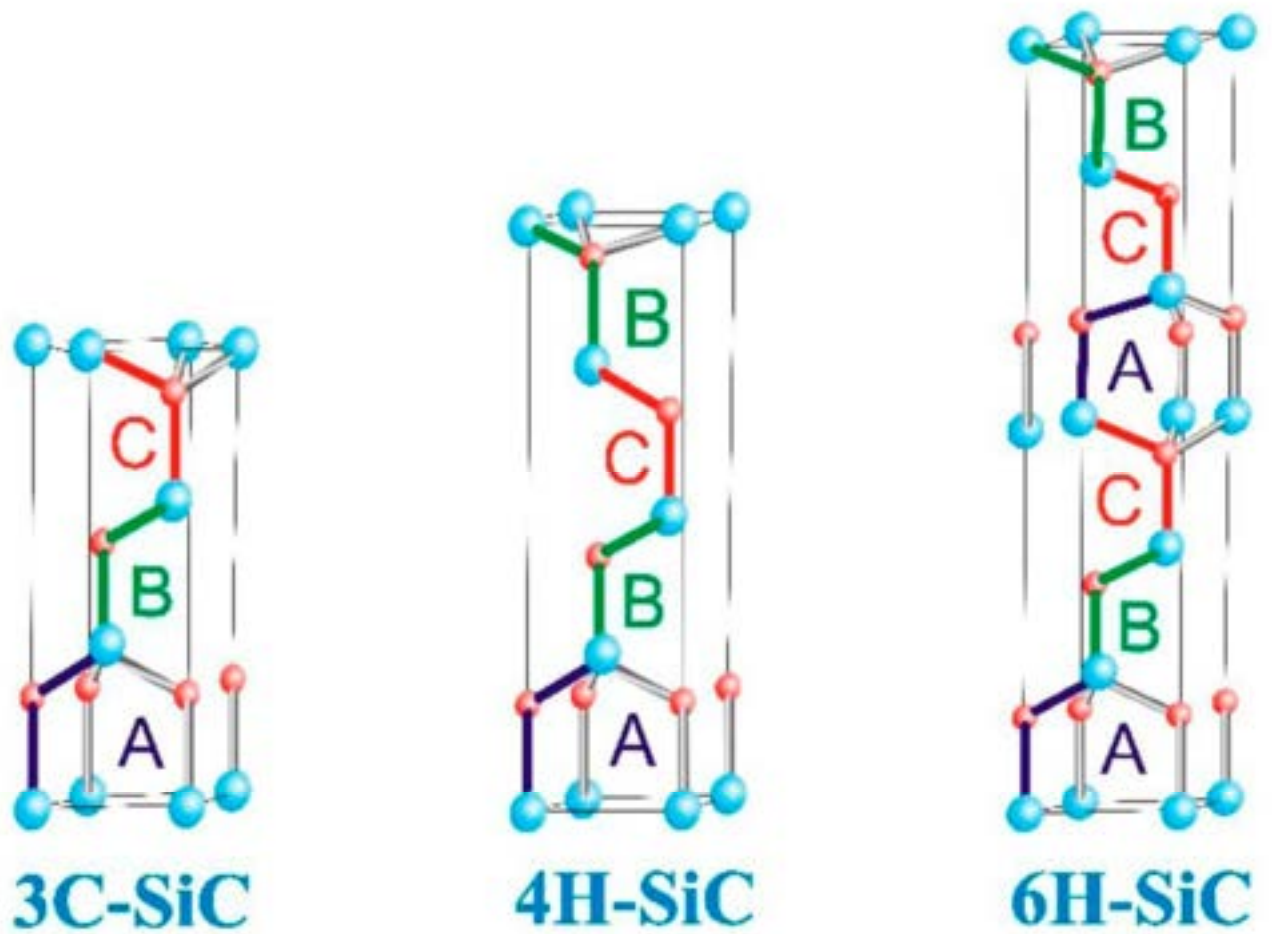
3C-SiC politipində “3” rəqəmi onu göstərir ki, bu politipdə Si-C birləşməsinin əsas strukturu üç təbəqədə formalaşır. Başqa sözlə təkrarlanan qəfəs parametrləri hər 4-cü təbəqədə ilki ilə eynidir. Digər tərəfdən “C” onu ifadə edir ki, struktur tam olaraq kubik modifikasiyada formalaşmışdır. Digər iki politipdə mövcud “4” və “6” rəqəmi də 3C-SiC politipinə uyğun olaraq strukturda təkrarlanmaları ifadə edir və “H” isə hər iki strukturun heksaqonal olmasının göstəricisidir. Qeyd edək ki, SiC – in sadalanan politipləri ilə yanaşı 2H-SiC və 15R-SiC politipləri də nisbətən geniş

yayılmışdır.

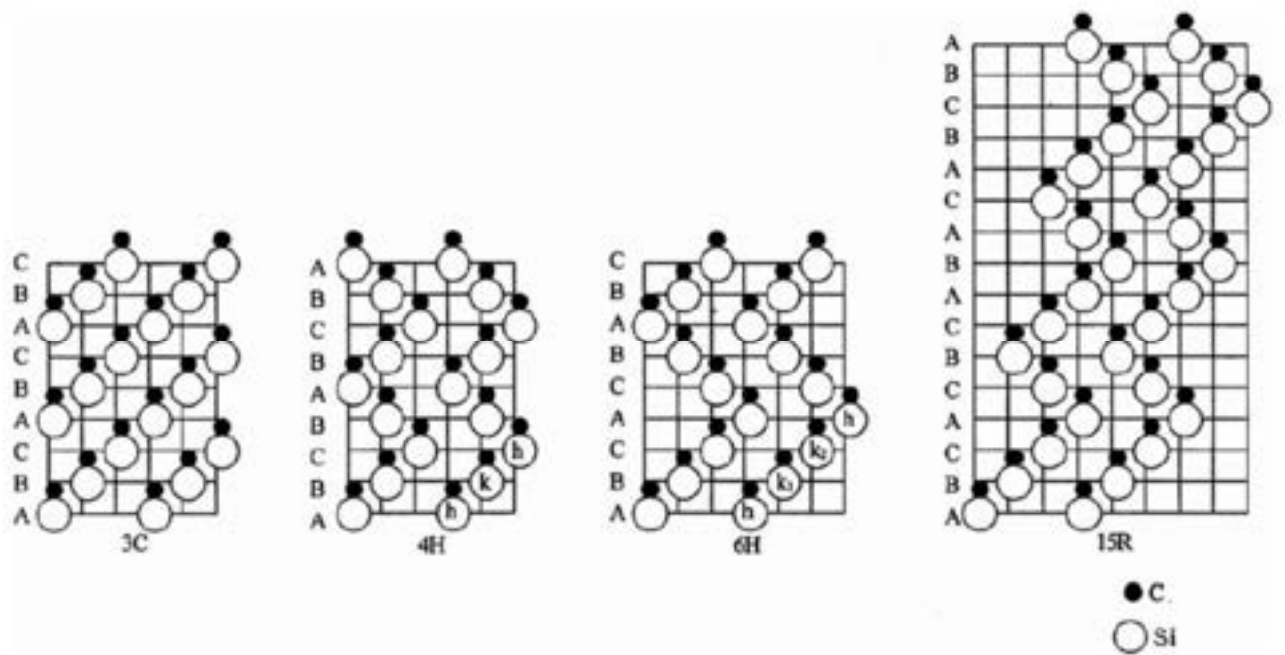


Şəkil 1.1.2 Müxtəlif tip SiC politiplərinin ikiölçülü təsviri. Soldan sağa uyğun olaraq 4H-SiC (ABCB), 6H-SiC (ABCACB) və 3C-SiC (ABC).

SiC-in məlum politipləri içərisində 3C-SiC yalnız k-tip atomlardan ibarət olduğu halda, 2H-SiC politipi yalnız h-tip atomlardan ibarətdir [179, s.330; 220, s.406]. Digər politiplər isə h və k-tip atomların kombinasiyasından ibarətdir. Məsələn, politipdə mövcud atomların say nisbəti 4H-SiC üçün k:h – 1:1 kimi, 6H-SiC üçün isə k:h – 2:1 kimidir. Ümumi yanaşmada SiC birləşməsinin 4 politipinin krsital strukturu **şəkil 1.1.4**-də verilmişdir.

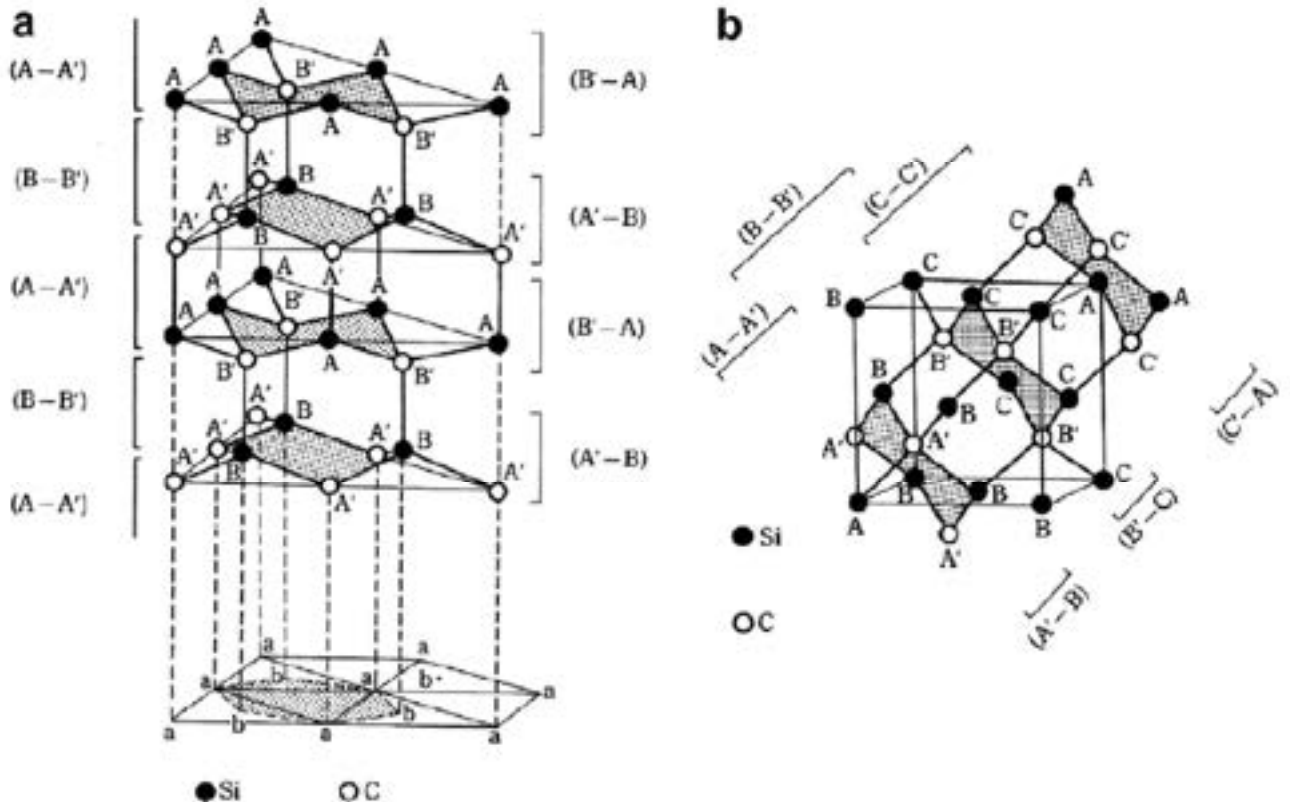


Şəkil 1.1.3 Müxtəlif tip SiC politiplərinin üçölçülü təsviri.



Şəkil 1.1.4 3C, 4H, 6H və 15R politiplərinin ikiölçülü struktur təsviri [220, s.407].

Öncə qeyd etdiyimiz kimi kubik strukturda olan yalnız bir politip vardır ki, bu da 3C-SiC və ya β -SiC kimi qeyd edilir. Ədəbiyyatlarda digər politiplər hamısı sadəcə olaraq α -SiC kimi tanınır [179, s.330; 220, s.408]. Silisium karbidin α və β modifikasiyalı politiplərinin üçölçülü təsviri **şəkil 1.1.5-də** verilmişdir.



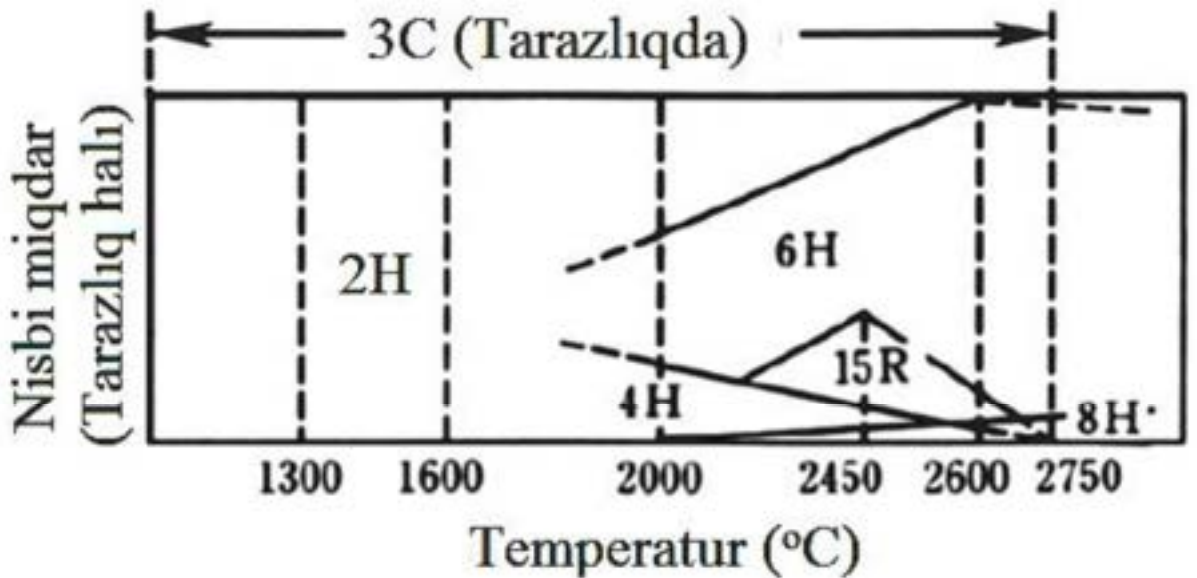
Şəkil 1.5 α -SiC (a) və β -SiC (b) politiplərinin üçölçülü təsviri

Silisium karbidin ən geniş yayılmış beş politipinin kristal strukturunu haqqında daha müfəssəl məlumat cədvəldə verilmişdir (**Cədvəl 1.1.1**). Cədvəldən görüldüyü kimi SiC – in yalnız 2H-SiC və 3C-SiC politipləri bir halda formalaşır. Digər politiplər hamısı bir nəçə vəziyyətdə formalaşa bilər [179, s.334].

Bir çox ədəbiyyatda SiC – in fərqli temperaturlarda kristallik strukturunun stabillik dərəcəsi dayanıqlıq diaqramını kimi nəzərdən keçirilir [179, s.333]. **Şəkil 1.1.6-də** silisium karbidin fərqli politipləri üçün tipik dayanıqlıq qioqramı təsvir edilmişdir.

Cədvəl 1.1.1 SiC – in müxtəlif politiplərinin kristallik parametrləri

Politip	Fəza qrupu	Elementin Wyckoff vəziyyəti (xyz)	
2H	P63mc	Si:2b, 1/3 2/3 0	C:2b, 1/3 2/3 3/8
3C	F43m	Si:4a, 0 0 0	C:4c, 1/4 1/4 1/4
4H	P63mc	Si (1):2a, 0 0 0	C (1):2a, 0 0 3/16
		Si (2):2b, 1/3 2/3 1/4	C (2):2b, 1/3 2/3 7/16
6H	P63mc	Si (1):2a, 0 0 0	C (1):2a, 0 0 1/8
		Si (2):2b, 0 0 1/2	C (2):2b, 1/3 2/3 7/24
		Si (3):2b, 1/3 2/3 5/6	C (3):2b, 1/3 2/3 23/24
15R	R3m	Si (1):3a, 0 0 0	C (1):3a, 0 0 3/60
		Si (2):3a, 0 0 2/15	C (2):3a, 0 0 11/16
		Si (3):3a, 0 0 6/15	C (3):3a, 0 0 27/60
		Si (4):3a, 0 0 9/15	C (4):3a, 0 0 39/16
		Si (5):3a, 0 0 13/15	C (5):3a, 0 0 55/60



Şəkil 1.1.6 Müxtəlif SiC politiplərinin kristallik faza stabilliyi dioqramı.

Şəkildən görüldüyü kimi SiC – in fərqli politiplərinin kristallik stabilliyi birbaşa temperaturdan asılıdır. Dioqramdan məlum olur ki, temperaturun 2373K-dən

aşağı qiymətlərində kubik 3C-SiC politipi heksaqonal politiplə (6H-SiC) müqayisədə daha çox dayanıqlıdır. Lakin bu nüans, bəzi ədəbiyyatlarda mübahisəli məsələ olaraq qalır [28, s.3038]. Krişna və həmüəllifləri göstərmişdir ki, 2H-SiC politipi yalnız aşağı temperaturlarda dayanıqlıdır və arqon mühitində $T > 1673\text{K}$ temperaturlarda dəmləndikdə asanlıqla 3C-SiC politipinə çevrilir [179, s.333; 220, s.408]. Qeyd etmək lazımdır ki, dioqram tam idal sistem üçün verilmişdir və real halda Si və C atomlarının nisbətindən asılı olaraq temperatur sürüşməsi müşahidə oluna bilər. Otaq temperaturunda Rentgenstruktur analizlərinə əsasən fərqli SiC politiplərinin qəfəs parametrləri cədvəl 1.1.2 – də verilmişdir [179, s.334]. 3C-SiC politipi üçün qəfəs sabiti və sıxlığı uyğun olaraq 0.4358 nm və 3.21 q/sm^3 kimidir.

Cədvəl 1.1.2 Otaq temperaturunda fərqli SiC politiplərinin sıxlıq və qəfəs parametrləri

Politip	Sıxlıq (q/sm^3)	Qəfəs parametri (nm)
2H	3.219	$a=0.3081, c=0.5031$
3C	3.215	$a=0.43589$
4H	3.215	$a=0.3081, c=1.0061$
6H	3.215	$a=0.3081, c=1.5092$
15R	---	$a=0.3073, c=3.770$
21R	---	$a=0.3073, c=5.278$

Bütün SiC politipləri üçün qəfəs parametrləri temperaturun arması ilə çox az miqdarda artır. Li və Brend yüksək temperaturlarda 3C-SiC politipinin qəfəs parametrlərinin temperatur asılılığını rentgenstruktur analizi ilə ətraflı tədqiq ediblər [135, c.1, s.75; 179, s.332; 220, s.409]. β -SiC – in qəfəs parametrləri (a , nm) öyrənilərkən aşağıdakı üçsəralı polinomdan istifadə edilmişdir.

$$a = 0.43577 + 1.3887 \cdot 10^{-6} (T - 273) + 7.8494 \cdot 10^{-10} (T - 273)^2 - 2.4434 \cdot 10^{-13} (T - 273)^3 \quad (1.1)$$

burada T mütləq temperaturdur (K), son bərabərlikdən görünür ki, temperaturun təsiri ilə standart kənarçıxma $\pm 2.6 \cdot 10^{-5}$ nm ətrafındadır. Temperaturun təsiri ilə qəfəs parametrlərinin dəyişməsi birbaşa termal proseslərlə izah edilə bilər. Termal analizlərdən məlum olmuşdur ki, SiC üçün qəfəs parametrlərində baş verən dəyişiklik 1273K temperaturda çox kiçik (təqribən 0,5% tərtibində) qiymətə malikdir [179, s.335].

1.2. Nanokristallik silisium karbid və onun özünəməxsus fiziki xassələri

Silisium karbid yüksək temperatur, təzyiq və ionlaşdırıcı mühitdə geniş tətbiq imkanına malik yarımkeçiricidir [97, s.20; 101, s.20; 172, s.151; 329, s.320; 340, 362, s.4449]. Bu fakta bu haqda yazılan minlərlə elmi iş və araşdırmalarda rast gəlmək olar [24, s.10275; 224, s.2; 241, s.63; 306, s.5305; 369, s.107]. Hal – hazırda nano ölçülərdə silisium karbid öz mükkəməl fiziki və kimyəvi xüsusiyyətlərinə görə dünya tədqiqatçılarının diqqət mərkəzindədir [13, s.347; 111, s.93; 156, s.3; 203, s.188; 207, s.2486; 230, s.1319; 345, s.639; 355, s.276]. Eyni zamanda SiC geniş qadağan olunmuş zolaq eninə malikdir və ekstrimal mühitdə mükəmməl tətbiq oluna bilər [84, s.66; 147, s.270; 175, s.1325; 195, s.80; 196, s.634; 211, s.39; 287, s.1036; 312, s.584; 341, s.1342; 361, s.723]. Sadalanan xüsusiyyətlərinin kombinasiyası silisium karbidin tətbiq imkanlarını artırır. Əlavə olaraq qeyd etmək lazımdır ki, SiC silisiumun digər birləşmələri (Si, SiO₂ və s.) ilə müqayisədə nisbətən yüksək sıxlığa malik (politipdən asılı olaraq təqribən 3.2q/sm³) stabil materialdır.

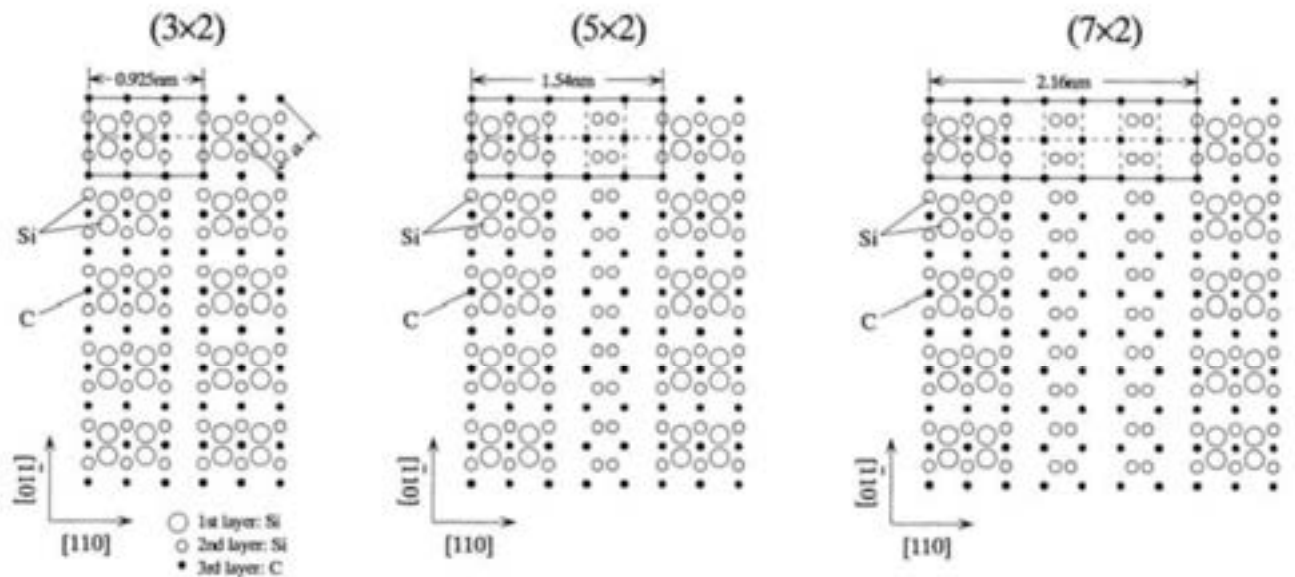
Yarımkeçirici kimi istifadəsi zamanlı silisium karbidin qadağan olunmuş zolaq eni diqqət mərkəzinə alınmalıdır. Ümumi yanaşmada silisium karbidin 200-dən artıq politipi mövcuddur ki, bunların da hər birində qadağan olunmuş zolaq eni fərqlidir. Belə ki, politipdən asılı olaraq SiC – in qadağan olunmuş zolaq eni 2.39eV- dan (3C-SiC üçün) 3.3 – eV – a qədər (2H-SiC üçün) geniş aralıqda dəyişir [15, s.014303; 21, s.17211; 84, s.67; 142, c.1, s.17; 147, s.271; 175, s.1326; 195, s.80; 196, s.634; 211, s.39; 307, c.1, s.2; 312, s.585; 361, s.723]. SiC - in qadağan olunmuş zolaq eninin geniş aralığa malik olması imkan verir ki, bu material yüksək temperaturlarda işlək material kimi istifadə olunsun. Belə ki, valent zonadakı elektronun termal ionizasiya

nəticəsində keçirici zonaya keçməsi, digər Si əsaslı qurğuların və avadanlıqların yüksək temperaturda işləməsində çətinliklər yaradır ki, qadağan olunmuş zolaq eninin geniş aralıqda olması nəticəsində SiC üçün bu problem deyil.

Məlumdur ki, nanomaterialları digər materiallardan fərqləndirən əsas parametr onların xüsusi səth sahəsinin (Specific Surface Area - SSA) böyük olmasıdır. Məhz nanomateriallarda SSA – nın böyük olmasının nəticəsidir ki, bu tip materiallarda həcmdə gedən proseslər səthə ötürülür. Öncə qeyd etdiyimiz kimi SiC-in bir neçə politipi mövcuddur ki, bunların da hər birində xüsusi səth strukturu fərqlidir. SiC nanohissəciyini təşkil edən Si və C atomları nanohissəcik səthdə Si-Si, C-C, yarımçıq rabitələr və ya yad atomla rabitələr yarada bilər. Başqa sözlə, nano ölçülərdə SiC mürəkkəb yarımkeçiricidir və səthdə olan Si və C atomları hidrogen və ya oksigen kimi başqa atomlarla birləşərək fərqli səth quruluşu yarada bilərlər. Bu baxımdan SiC nanohissəcikləri daha mürəkkəb xüsusi səth sahəsinə malikdir. Lakin bəzi səth effektləri nano ölçülərdə SiC – in fiziki xassələrini əhəmiyyətli dərəcədə dəyişmir və bir çox hallarda onlar nəzərə alınmır [142, c.1, s.166].

Ümumi yanaşmada yarımkeçirici kimi istifadəsi zamanı SiC səthində baş verən proseslər səbəbindən atomar səviyyədə səth effektləri nəzərə alınır. Beləliklə səth atomlarında baş verən dəyişikliklər minimum səth enerjisinin dəyişməsinə səbəb ola bilər. SiC nanohissəciklərində təcrübi olaraq səth atomlarının rekonstruksiyasını müəyyən etmək olduqca çətin məsələdir. Müasir zamanda SiC nanohissəciklərinin səthini öyrənmək üçün ən mükəmməl təcrübi üsullar skanedicci elektron mikroskop (SEM), transmissiya elektron mikroskopu (TEM), skanedicci tunel mikroskopu (STM), aşağı enerjili elektron difraksiyası (low-energy electron diffraction - LEED) və sair hesab edilir [142, c.1, s.84]. İlkin yanaşmada kompüterdə molekulyar dinamik simulyasiya ilə SiC nanohissəciklərinin səthini nəzəri öyrənmək daha əlverişli hesab edilir. Təcrübi və nəzəri araşdırmaların nəticəsində SiC nanohissəciklərinin səthi haqqında müəyyən fikir irəli sürmək mümkündür. Son zamanlar SiC politipləri içərisində 3C-SiC politipinin (1 0 0) səthi ən geniş öyrənilmiş səthdir [142, c.1, s.85]. Belə ki, bu səthdə C – ilə bitən $c(2 \times 2)$, Si – ilə bitən (2×1) və Si (zəngin) – ilə bitən (3×2) kimi bir neçə səth rekonstruksiya halları aşkarlanmışdır. Atomik səviyyədə

həsaslıqla aparılan STM analizlərindən məlum olmuşdur ki, 3C-SiC(001) səthində Si – ilə bitən səth rekonstruksiya halları mövcuddur [105, s.4548]. Əlavə Si atomları ilə mümkün rekonstruksiya halları STM və LEED texnologiyalarının birlikdə tətbiqi ilə əldə edilmişdir. Belə ki, bu metodlarla iki özək atomun mərkəzi istiqamətində əlavə Si səth halaları (3x2) müəyyən edilmişdir. Ümumi halda, mümkün (3x2), (5x2) və (7x2) Si – ilə bitən səth halları **şəkil 1.2.1** – də təsvir edilmişdir.

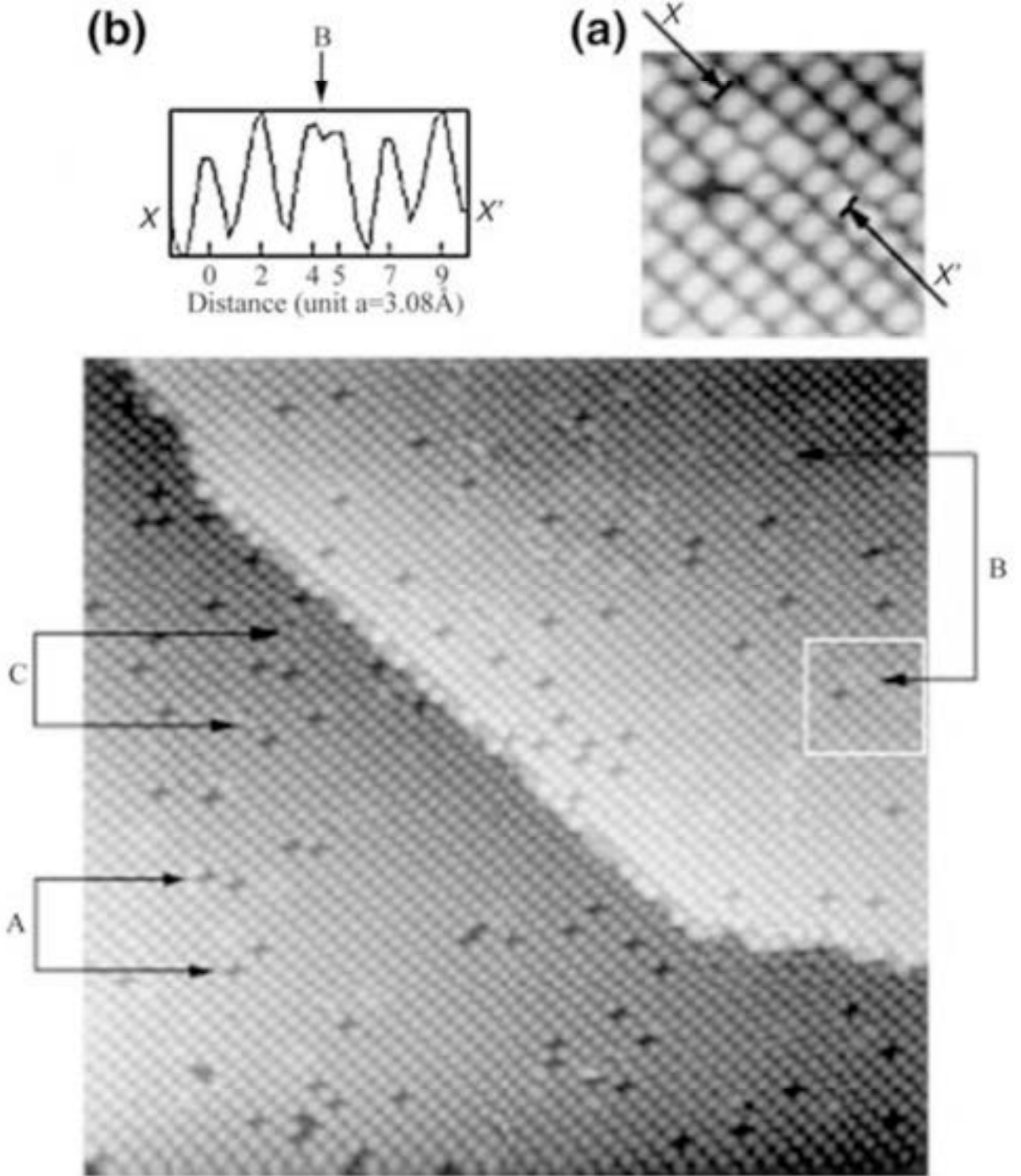


Şəkil 1.2.1 3C-SiC politipinin (001) səthində mümkün (3x2), (5x2) və (7x2) struktur halları [105, s.4549]

İndividual Si atomlarınının 3C-SiC nanohissəciklərinin (100)-(3x2) səthində müşahidəsi STM analizləri ilə mümkün olmuşdur [284, s.2014]. Təcrübələrdə istifadə olunan 3C-SiC nanohissəcikləri yüksək təmizliyə və çox aşağı defekt sıxlığına malikdir. STM təsvirlərindən məlum olmuşdur ki, Si – Si rabitə oxuna perpendikulyar istiqamətdə (3x2) səth istiqamətində əyilmələr eyni istiqamətdədir (**Şəkil 1.2.2**).

Bu isə təbii olaraq öz növbəsində səthdə daha çox atomların bu halda formalaşmasına imkan yaradır. Belə olan halda nanohissəciyin səthində ilk təbəqədə mövcud atomlarda üç tip kənarçıxma halları müşahidə oluna bilər: birincisi tək atomun kənarçıxması (A – tip defekt), ikincisi çüt atomun (dimer) kənarçıxması (B – tip defekt) və nəhayət üçüncüsü çüt atomun (dimer) fərqli bucaqlarda

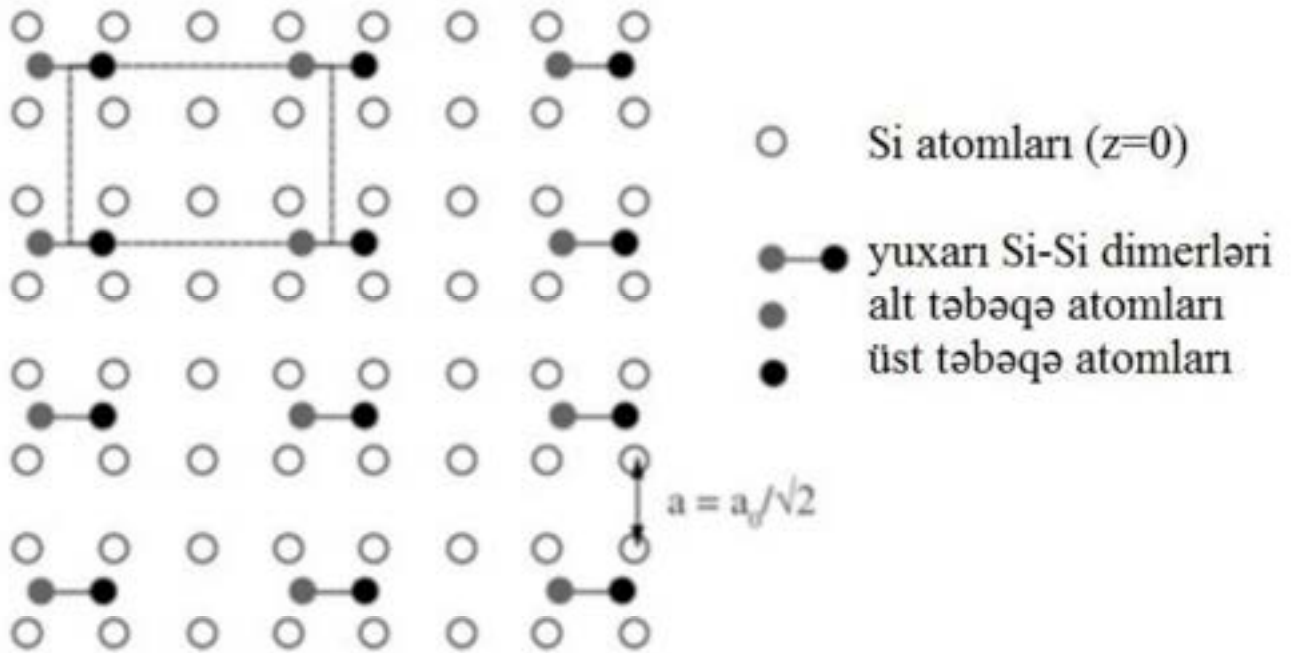
kənaraxıması (C – tip defekt) [142, c.1, s.85].



Şəkil 1.2.2 3C-SiC (100)-(3x2) nanohissəcik səthində A, B və C tip defektlərin yaranmasının STM təsviri (40x40nm, a – A tip defektin böyüdülmüş halı, b – B tip defekt cütünün xx' istiqamətində atomik profili) [284, s.2014]

Bu halı aydınlaşdırmaq üçün illustrasiya edilmiş şəkli model kimi (dimer

modeli) qısa olaraq nəzərdən keçirək (Şəkil 1.2.3). Bu model STM topoqrafiyasında mövcud individual Si atomlarını çox yaxşı xarakterizə edir.

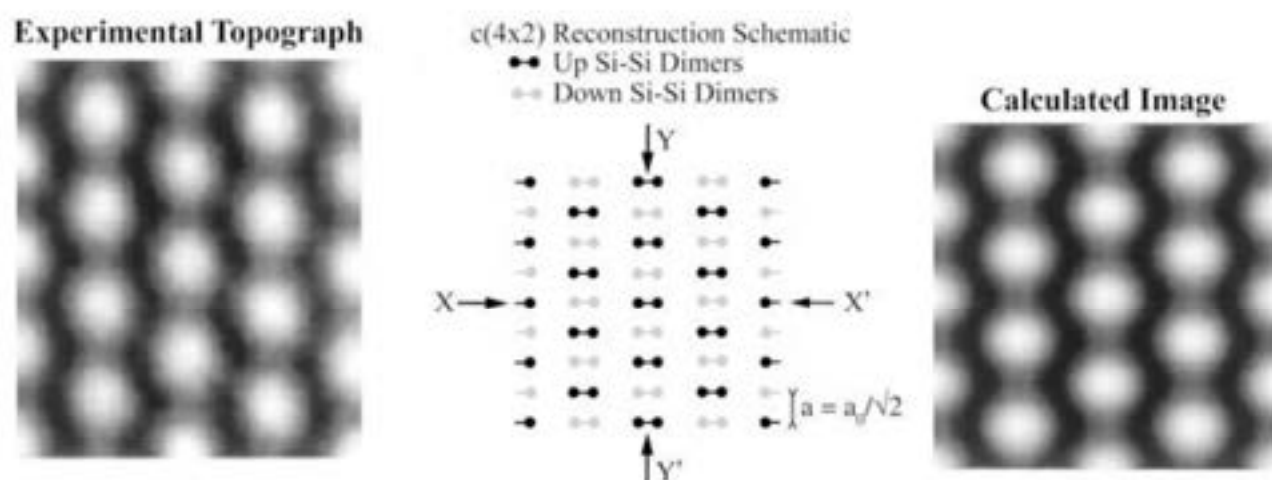


Şəkil 1.2.3 3C-SiC (100) səthində 3x2 Si – Si dimerlərinin sxematik təsviri.

Öncəki STM tədqiqatlarından fərqli olaraq bu model Si atomlarının ilkin yanaşmada 1/3 hissəsini əhatə edir [142, c.1, s.85]. Hansı ki, digər STM tədqiqatlarında silisiumun dimer cütləri də daxil olmaqla Si atomlarının ümumilikdə 2/3 hissəsi əhatə edilir [105, s.4550]. Ümumi yanaşmada polyar 3C-SiC(100) səthində mümkün fərqli beş konfigurasiyanın strukturu və elektronik xüsusiyyətləri ədəbiyyatlarda şərh edilmişdir [105, s.4551; 142, c.1, s.195; 271, s.13125; 284, s.2014]. Məlum olmuşdur ki, (2x1) səthində Si – ilə bitən rabitələrdən daha çox fərqli variasiyalarda C – ilə bitən rabitələrə rast gəlinir. Bununla yanaşı, 3C-SiC(100)-(4x2) səthinin rekonstruksiyasında mümkün hallar atomik-həssaslıqda STM tədqiqatları ilə öyrənilmişdir [299, s.908]. Təcrübi olaraq alınmış STM topoqrafiyaları nəzəri hesablamalarla demək olar ki tam uzlaşır (Şəkil 1.2.4). Mövcud topoqrafiyalardan dimer modelini sətirlərlə izah etmək olar [142, c.1, s.86].

Şəkildə dimer sətirləri yuxarı və aşağı olmaqla dalğalanaraq iki hissəyə ayrılır və sətdə mümkün gərginliyi nisbətən azaldır. Qeyd edək ki, 3C-SiC(100) və Si(100)

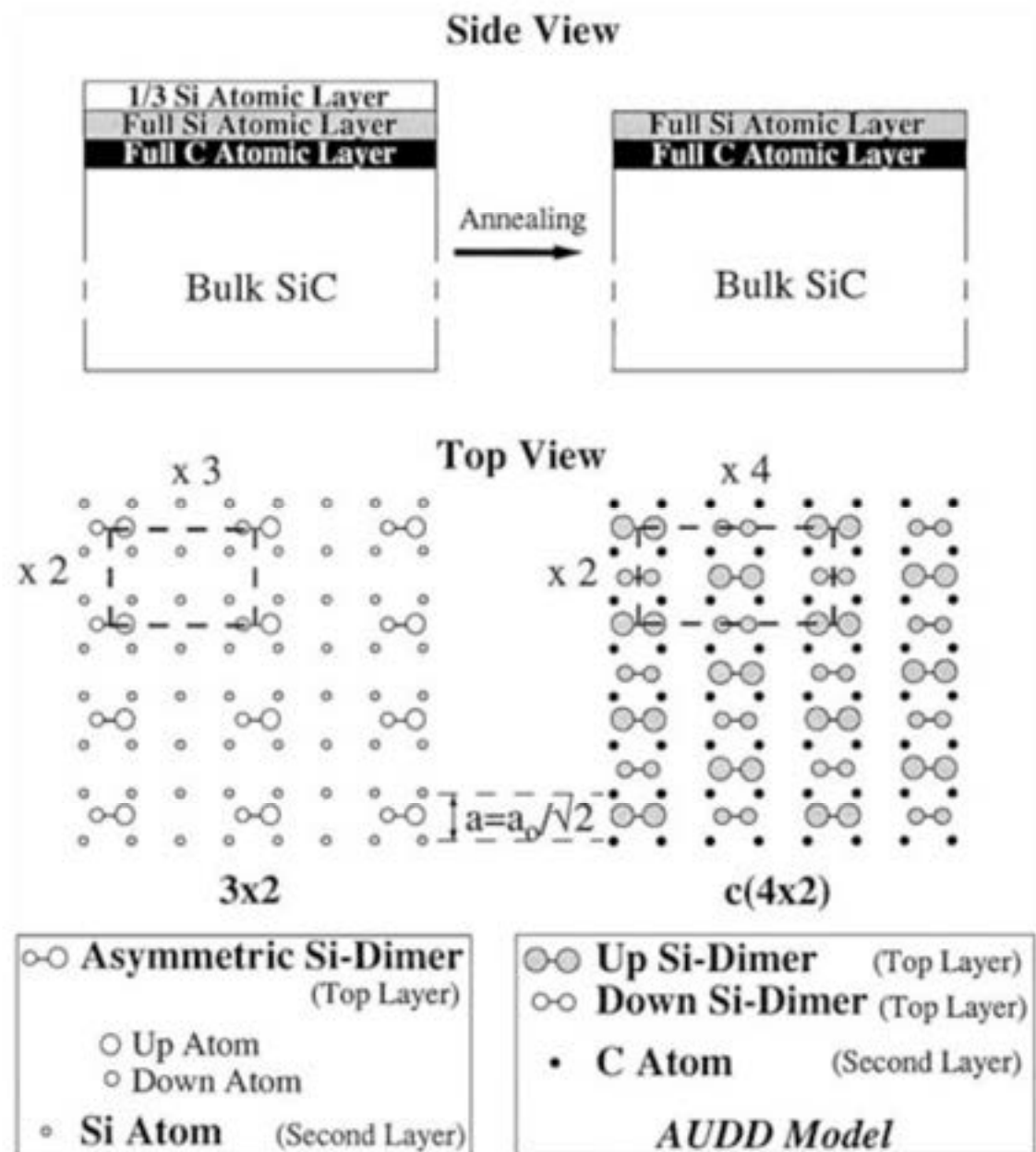
– $c(4 \times 2)$ səthlərində Si atomu ilə səth rekonstruksiyası tamamilə fərqlidir. STM analizlərindən məlum olmuşdur ki, Si(100) ilə müqayisədə 3C-SiC(100) səthində mümkün Si atomu ilə kənarçıxmalar daha dayanıqlı olur [300, s.2498]. Digər tərəfdən məlum olmuşdur ki, müəyyən temperaturlarda (1000C – dən yuxarı temperaturlarda) dəmləmə üsulu ilə səthdə mövcud Si atomlarının düzülüşünə təsir etmək olar [142, c.1, s.87]. Eyni zamanda temperaturun təsir ilə səthdə faza dəyişmələri müşahidə etmək mümkündür. Belə ki, məlum olmuşdur ki temperaturun təsiri ilə 3C-SiC(100)-(3x2) səth konfigurasiyasından 3C-SiC(100)- $c(4 \times 2)$ halına çevirmə mümkündür [142, c.1, s.88]. Məlum olmuşdur ki, səth konfigurasiyasının (3x2) – dən $c(4 \times 2)$ –yə çevrilməsində rekonstruksiya prosesində seçilmiş Si atomları iştirak edir. Bu tip iki səth konfigurasiyasının çevrilməsi sxematik olaraq **şəkil 1.2.5** –də təsvir edilmişdir.



Şəkil 1.2.4 3C-SiC(100)-(4x2) səthində Si dimerlərinin təcrübi STM topoqrafiya və nəzəri təsviri (yuxarı və aşağı dimerlərin sxematik təsviri) [299, s.910]

Göstərilən halda Si dimer sətirinin $c(4 \times 2)$ səthində Si atomu ilə müqayisədə bir qədər uyğunsuzluq mövcuddur. Həmçinin 3C-SiC(100) səthinin yüksək – həssaslıqda STM tədqiqatlarından mövcud karbon zəncirində C – ilə bitən hallar müşahidə edilmişdir [68, s.5869]. Lakin uyğun ədəbiyyatlarda qeyd edilmişdir ki, karbon zəncirində termal sabillik temperaturun təqribən 1200S qiymətinə qədərdir. C

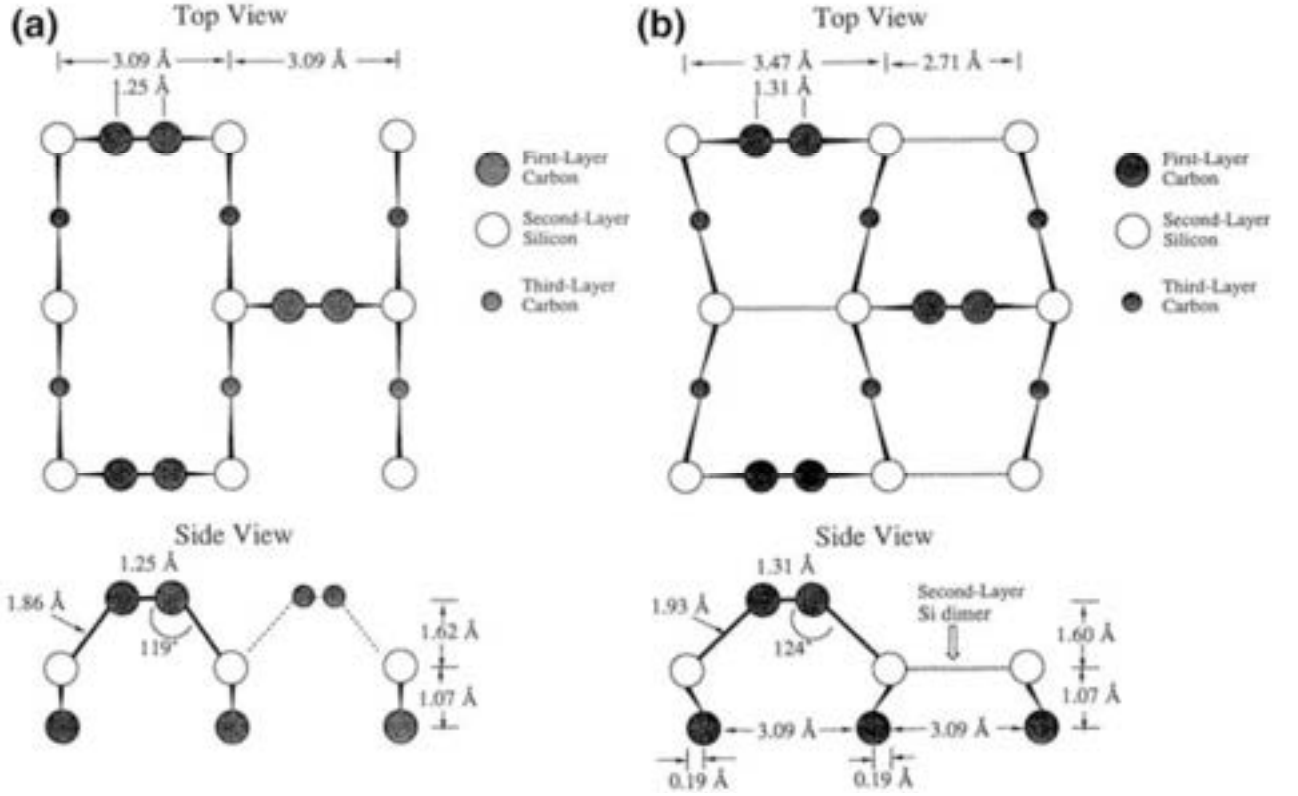
– C dimerində sp^3 birqat rabitəsi üçqat $C \equiv C$ sp rabitəsinə perpendikulyar istiqamətdə $c(2 \times 2)$ səth rekonstruksiyasını əmələ gətirir. Mövcud səth atomlarının sıxlığı qızma temperaturunun artması ilə artır və səthdə antifəza rabitələri yaratmır.



Şəkil 1.2.5 Nanohissəcik səthində $3C\text{-SiC}(100)\text{-(}3 \times 2\text{)}$ və $3C\text{-SiC}(100)\text{-}c(4 \times 2)$ rekonstruksiya olunmuş səthlərinin sxematik təsviri [300, s.2499].

Aşağı enerjili elektron difraksiyasının (LEED) dinamik hesablamalarının köməyiylə $3C\text{-SiC}(100)\text{-}c(2 \times 2)$ səthinin atomik strukturu ətraflı öyrənilmişdir [254,

s.11159]. Bir çox səth tədqiqatlarında yüksək vakuum altında və yüksək temperaturun (1125K – dən yüksək) təsiri ilə, $c(2 \times 2)$ səthində mövcud silisium atomları sistemdən uzaqlaşdırırlar. Lakin bu halda da, nümunə səthi silisium rabitələri arasında C_2 qruplarının formalaşmasına səbəb olur (Şəkil 1.2.6).



Si sublimasiyası dedikdə, zəif rabitəli silisium dimerlərinin $c(2 \times 2)$ səthində formalaşması başa düşülür, həmsi ki, C_2 qruplarının yaranması zamanı bu dimerlər mövcud olmur. Ehtimal olunur ki, yüksək temperatur təsiri ilə burdada zəifləmiş Si rabitələri yaranır və bunlar da öz növbəsində Si sublimasiya dimer qruplarını yaradır [254, s.11161]. Aşağı enerjilərdə 3C-SiC (100) $c(2 \times 2)$ səth rekonstruksiyasının hesablamalarından məlum olmuşdur ki, səthdə mövcud üçqat rabitəli karbon dimerləri qonşu silisium dimerləri ilə birbaşa əlaqəlidir [352, s.265]. Bundan əlavə olaraq, əsas stabil strukturlardan olan (3×2) səthinin rekonstruksiyasında $1/3$ monotəbəqədə (monolayer) silisium dimer sütunları əsas rola malikdir. Digər

tədqiqatlarda, 3C-SiC (100) – c(2x2) səhinin orbital molekulyar kalasterlər yanaşması ilə hesablamalarından tək-dominant strukturlarda C-1s və Si-2p polyarizasiyalarının üstünlük təşkil etdiyi məlum olmuşdur [190, s.991]. Bu halda da səthdə mövcud sütunun əsasını təşkil edən üçqat rəbitəli C dimerlərinin Si dimerləri ilə əlaqəli olması aşkarlanmışdır. C dimerlərinin elektron strukturu valent elektrondan fotoemmissiya yanaşması ilə öyrənilmişdir [142, c.1, s.89]. Molekulyar dinamik simulyasiyadan məlum olmuşdur ki, nanokristalın yetişmə mühitindən və temperaturdan asılı olaraq, 3C-SiC nanohissəciklərinin səhini təşkil edən C(100) karbon atomları ilə bitən rəbitələr c(2x2) və p(2x1) rekonstruksiylarından asılı olaraq fərqlidir [47, s.5090]. Bundan əlavə olaraq, 3C-SiC (100) – c(2x2) səhinin rekonstruksiyasında mövcud C atomları ilə bitən rəbitələr STM və səth nüvələrindən fotoelektron difraksiya yanaşmaları ilə öyrənilmişdir [359, s.1640]. Bu tədqiqatlardan səthdə mövcud C rəbitələrində C-C arasında anomal 1.22Å uzunluqlu rəbitələr aşkarlanmışdır. Üçqat rəbitəli C dimerləri arasındakı bucaq fotoemmissiya üsulu ilə öyrənilmiş və məlum olmuşdur ki, rəbitələr p orbitinə paraleldir. Bu isə öz növbəsində, üçqat rəbitəli C dimerlərinin səth rekonstruksiyasında daha çox dayanıqlı olmasının əsasını təşkil edir.

3C-SiC(111)-(3x3) səhinin rekonstruksiyası STM, LEED, həlloqrafik LEED və nəzəri sıxlıq funksiyaları kimi bir neçə metodlar ilə genişmiqyaslı tədqiq edilmişdir [304, s.758]. STM metodu ilə vahid qəfəsdə alt təbəqədə olan atom haqqında fikir söyləmək mümkün olmuşdur. LEED və nəzəri sıxlıq yanaşması ilə alt təbəqələrdə “yerdəyişmiş” silisium atomları ilə kovalent rəbitədə olan Si ilə bitən rəbitələr haqqında mülahizə yürütmək mümkün olmuşdur. Bu yerdəyişmə vahid qəfəsdə qopmuş rəbitlərin (111) səhində (n x n) rekonstruksiyasının mexanizmini izah etməyə imkan verir. Qeyd edək ki, silisium karbidin digər heksaqonal politipində də (3x3) rekonstruksiyasının olması mümkün haldır [279, s.10337]. Belə ki, 3C-SiC, 4H-SiC və 6H-SiC səhinin (3x3) rekonstruksiyası LEED, difraksiya intensivliyinin həlloqrafik təsviri, STM və Auger elektron spektrometr üsulları ilə tədqiq edilmişdir [279, s.10338]. Aparılan tədqiqatlardan məlum olmuşdur ki, ümumi yanaşmada yarımkəçirici səhində (3x3) rekonstruksiyasının yaranması səthdə yeni tip rəbitə

qırılmalarına gətirib çıxarır [142, c.1, s.90]. 6H-SiC(0001) – (3x3) səthinin (3x3) rekonstruksiyasında modifikasiya olunmuş Si rabitələri STM ilə araşdırılmışdır [174, s.49]. 6H-SiC politipinin hər bir qəfəsində səthdə olan bir Si atomu və alt atomları heksoqonal strukturda formalaşmışdır. Rekonstruksiya halında verilmiş modelə əsasən bütün qəşəf 11Si atomlarından ibarətdir [174, s.50]. Bu halda üç dimer, səthdə ilk təbəqədə üç atom və bir səth atomu mövcuddur. Vahid qəfəsdə mümkün üç qırılmış rabitələrin biri səth atomu, digər ikisi isə alt təbəqə atomları ilə ola bilər. STM tədqiqatları ilə 6H-SiC politipinin (0001) səthində Si ilə bitən və (000 $\bar{1}$) səthində C ilə bitən səth atomları öyrənilmişdir [185, s.142]. Aparılan tədqiqatlardan məlum olmuşdur ki, 850⁰C temperaturda dəmləmə zamanı (3x3) səth rekonstruksiyası meydana çıxdığı halda, temperaturun 950⁰C qiymətində ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) səth rekonstruksiyası çevrilməsi baş verir. Qeyd etmək lazımdır ki, (3x3) rekonstruksiyasında səth atomlarının 4/9 və ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) rekonstruksiyasında isə səth atomlarının 1/3 monotəbəqəsi mövcuddur [185, s.142]. Silisium selinin təsiri altında (3x3) səthinin 900⁰C temperaturda dəmləmə prosesində (0001) səthində (9x9) rekonstruksiyası müşahidə edilmişdir. Silisium seli olmadan temperaturun 1150⁰C qiymətində dəmlənmə zamanı (0001) səthində (6x6) rekonstruksiyası aşkar edilmişdir [185, s.143].

Hissəcik ölçülərinin 100nm – dən kiçik qiymətlərində 6H-SiC (0001) səthində oksidləşmə və digər səth prosesləri müşahidə edilmişdir [303, s.177]. Məlum olmuşdur ki, nano ölçülərdə səthdə mövcud açıq rabitələr hidrosil qrupları yarada bilər. Lakin temperaturun təsi ilə açıq rabitələrdən oksigen və digər kənar maddələr uzaqlaşdırıla bilər və ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) rekonstruksiyasında C-C rabitələrinin sıxlığını artırmaq olar [303, s.178]. 6H-SiC (0001) səthində Si ilə bitən rabitələrin ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) rekonstruksiyası STM üsulu ilə öyrənilmişdir [237, s.641]. STM təsvirləri struktur modelinə əsasən Si-C ikili rabitələrində mümkün Si və ya C səth atomlarının 1/3 təbəqəsinin olmasını təstiqlədi. ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) səthində bir neçə hallarda fərqli tip defektlərin yarana biləcəyi məlum olmuşdur. 6H-SiC (0001) ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) səthində ilkin yanaşmada ümumi enerji hesablamaları ilə səthin kimyəvi vəziyyəti və səth

atomlarının adsorbsiya qabiliyyəti öyrənilmişdir [232, s.17001]. İlin halda temodinamik kimyəvi potensial yanaşması ilə məlum olmuşdur ki Si səth atomları C səth atomları ilə müəisədə daha çox dayanıqlıdır. Hər iki Si və C səth atomları mövey olaraq H_3 vəziyyətindən T_4 vəziyyətinə keçirlər. Hesablamalardan məlum olmuşdur ki, Si- T_4 vəziyyətində səth atomunun açıq rabitə enerjisi valent rabitəsinin maksimum enerjisindən (0.35eV) kifayyət qədər böyük qiymətə (1.2eV) malikdir [232, s.17001]. Bucaq altında fotoemmissiya spektroskopiyası ilə $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ səth rekonstruksiyası öyrənilmişdir [145, s.478]. Aparılan tədqiqatlarda 4H və 6H politipləri oxşar nəticələr vermişdir. Digər tədqiqatlarda olduğu kimi, bu araşdırmada da səth atomlarının açıq rabitə enerjisi (1eV) valent rabitə enerjisinin maksimum qiymətindən (0.2eV) böyük qiymət almışdır [145, s.479]. Fotoemmissiya spektroskopiyası ilə 6H-SiC(0001) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}_{R30^\circ}$ və $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}_{R30^\circ}$ səth rekonstruksiyaları tədqiq edilmişdir [144, s.13793]. Rekonstruksiya olunmayan (1x1) səthi uyğun olaraq 950⁰C və 1150⁰C temperaturlarda dəmlənmə nəticəsində rekonstruksiya olunmuş səthlərə çevrilir. Qeyd edək ki, $\sqrt{3}$ rekonstruksiyasının spektral xüsusiyyətləri Si və ya C səth atomlarının struktur modeli ilə izah edilə bilmir. Digər tərəfdən, $6\sqrt{3}$ rekonstruksiyasında C atomlarının konsentrasiyası həddindən artıq çoxdur. Nəzərə almaq lazımdır ki, burada karbon qrafit halında deyil və qrafitləşmə prosesi yüksək temperaturda dəmlənmədən sonra yaranır. Seçilmiş sıxlıq yanaşması ilə 6H-SiC (0001) səthinin $\sqrt{3} \times \sqrt{3}_{R30^\circ}$ rekonstruksiyası nəzəri olaraq tədqiq edilmişdir [272, s.10562]. Si və C atomları ilə bitən rabitələr hər ikisinin səth rekonstruksiyası nəzəri olaraq araşdırılmışdır. Si və ya C atomlarının üçqat simmetriyası və Si və ya C səth atomlarının səth rekonstruksiyasının ümüumilikdə səkkiz modeli verilmişdir [272, s.10563]. Si ilə bitən səthlərdə, Si səth atomunun optimal səth strukturunun T_4 vəziyyəti təcrübi nəticələrlə uzlaşır. Lakin C ilə bitən rabitələr üçün, səth atomlarının $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ rekonstruksiyasında optimal konfigurasiyaları öyrənilməmişdir. Yarımkəçirici yanaşmasında, 6H-SiC (0001) $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ səthinin hər iki n və p-tip materialları STM üsulu ilə tədqiq edilmişdir [262, s.1001]. STM tədqiqatlarından məlum olmuşdur ki, hər iki halın fəza quruluşu eynidir.

Digər tədqiqatlardan məlum olmuşdur ki, silisium karbid 424GPa təzyiq altında Yunq modulunun qiymətinə əsasən mükəmməl dayanıqlığa malik materialdır [307, c.1, s.22]. Göstərilən şəraitdə SiC kimyəvi sabitdir və digər materiallarla müqayisədə otaq temperaturunda tam olaraq stabildir. Eyni zamanda SiC 3100K kimi çox yüksək ərimə temperaturuna malikdir və yalnız xüsusi qatışıqların köməyi ilə temperaturun 1000K qiymətlərində əritmək mümkündür [58, c.1, s.229-249; 93, c.1, s.163; 135, c.1,s.15, 307, c.1, s.75]. Beləliklə, hər hansı materialın normal şəraitdə SiC daxilinə diffuziya etdirilməsi demək olar ki, qeyri mümkündür. Digər yarımkeçirici materiallarda olduğu kimi bu materialların da bəzi tətbiq sahələrində aşqarlanmaya ehtiyacları var və bu aşqarlanma yalnız fərqli metodlarla mümkündür. Bir sözlə, temperaturun təsiri altında bu tip materialların aşqarlanması demək olar ki, mümkün deyil.

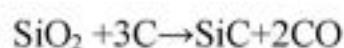
Yüksək gərginliklərdə istifadəsi zamanı SiC mükəmməl davamlılığa malikdir. Lakin xarici elektrik sahəsinin müəyyən limit (E_{max}) qiymətlərindən sonra SiC dağılmalara məruz qala bilər [307, c.1, s.103; 285, s.1482; 291, s.175]. Qeyd etmək önəlidir ki, SiC üçün elektrik sahəsinin limit qiyməti təmiz silisium üçün limit qiymətdən təqribən 5-10 dəfə böyükdür [307, c.1, s.104]. Eyni zamanda E_{max} -ın qiyməti istənilən halda aşqar elementin konsentrasiyasından asılıdır. Bəzi ədəbiyyatlarda aşqar konsentrasiyasının 10^{16} sm^{-3} qiymətində SiC üçün $E_{max} = 2.49\text{MV/sm}$ qiymətinin alınması şərh edilmişdir [171, s.90; 307, c.1, s.104]. Lakin silisium üçün anoloji aşqar konsentrasiyasında $E_{max} = 0.401\text{MV/sm}$ qiymətini alır [34, c.1, s.9-61]. Yüksək tezliklərdə istifadəsi zamanı SiC – in önəmli fiziki parametrlərindən biri də dirift sürətidir. Ümumi yanaşmada SiC üçün dirif sürəti silisiumla müqayisədə təqribən iki dəfə çox olub politipdən asılı olaraq $2 \times 10^7 \text{ sm/san}$ qiyməti ətrafında dəyişir [18, c.3, s.177; 19, s.15; 307, c.1, s.74]. Dirift sürətinin böyük olaması SiC – in mikrodalğalı qurğularda ideal material kimi tətbiq imkanlarını artırır.

SiC – in ekstrimal mühidə tətbiqi zamanı digər önəmli parametr də termal keçiricilikdir. Ümumi halda adətən, temperaturun artması ilə cihazların iş qabiliyyəti zəifləyir və hər bir cihaz üçün limit işləmə temperaturu mövcuddur. Bu halda ən

önəmli parametr, daşıyıcıların yürüklüyüdür ki, bu da adətən bu tip materiallarda temperaturun artması ilə azalır [307, c.1, s.49]. Bir çox ədəbiyyatlarda otaq temperaturunda SiC – də termal keçiriciliyin misin termal keçiriciliyindən böyük olması qeyd edilir [307, c.1, s.50, 343, s.670]. Bu isə onu deməyə əsas verir ki, SiC otaq temperaturunda istifadə üçün müvafiq metallardan daha əlverişlidir. Belə ki, termal keçiricilik otaq temperaturunda mis üçün 4 Vt/sm·K, gümüş üçün 4,18 Vt/sm·K qiymətini aldığı halda, SiC üçün 4,9 Vt/sm·K qiyməti ətrafında dəyişir [46, c.8, s.73; 307, c.1, s.70]. Qeyd edək ki, SiC üçün termal keçiricilik politipdən, nümunənin təmizlik dərəcəsiindən və kristalın ölçmə istiqamətindən asılı olaraq otaq temperaturunda 3-5 Vt/sm·K aralığında dəyişir.

1.3. Müxtəlif üsullarla SiC nanohissəciklərinin alınması

Nano ölçülərdə SiC hissəciklərinin sintez metodlarını analiz etməzdən öncə qısa olaraq sadəcə silisium karbidin necə formalaşdığını ümumi şəkildə nəzərdən keçirək. SiC birləşməsini almaq üçün günümüze qədər bir neçə metodlar işlənilib hazırlanmışdır. İlk dəfə SiC birləşməsi Açenson tərəfindən 1891 – ci ildə sintez edilmişdir [99, s.179]. Belə ki, Açenson yüksək temperaturlu peçdə yüksək təmizliyə malik SiO₂ – ni karbon ilə reduksiya edərək ilk dəfə SiC birləşməsini almışdır.



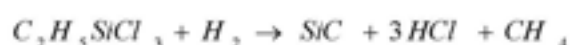
Bu üsulla, 2373K temperaturda α -SiC və 1273K-1873K temperaturlarda isə β -SiC almaq mümkündür. Lakin hal – hazırda Açenson üsulu ilə SiC sintez etmək iqtisadi cəhətdən əlverişsiz hesab edilir. Müasir zamanda daha səmərəli üsullarla SiC sintez etmək üçün metodlar işlənilib hazırlanmışdır ki, onlardan da sinterləmə, birbaşa konversiya, qaz fəzada reaksiya, polimer pilyorizi və s. göstərmək olar. Sinterik üsulla sintez zamanı bir neçə bərkitmə mexanizmi, yüksək təzyiq və s. alt kateqoriyalardan istifadə edilir [179, s.331]. Birbaşa konversiya üsulunda isə proses birbaşa reaksiya – rabitələri ilə əlaqəli olur (metallik silisium və karbon reaksiyası) [179, s.332]. Nəhayət bu metodlar içərisində ən geniş istifadə olunanı qaz fəzasında reaksiya

üsuludur. Qaz fəzasında reaksiya üsulunun ən geniş yayılmış növü kimyəvi buxar yaratma metodudur ki, bu üsulla da kifayət qədər təmiz və kristallik SiC almaq mümkündür [98, s.131; 346, s.12]. Polimer poliriz metodu ilə adətən məsaməli və fiber SiC birləşməsinin alınmasında istifadə edilir [326, s.773; 349, s.683].

Yüksək temperatur və təzyiqliq texnologiyalarından istifadə edərək kifayət qədər möhkəm və sıx SiC almaq mümkündür. Lakin bu metodla sintez olunan SiC nisbətən baha başa gəlir deyə Al_2O_3 və Y_2O_3 kimi əlavə oksidlərdən istifadə edərək nisbətən aşağı temperaturlarda SiC- in sintezi mümkündür [179, s.332]. Lakin bu metodla sintez zamanı alınmış SiC – in qatılığı nisbətən aşağı olur. Bundan əlavə olaraq, bu metodla sintez zamanı materialın tərkibində əlavə qatışıqların qalması son məhsulun təmizlik dərəcəsini aşağı salır.

Birbaşa reaksiya ilə SiC almaq üçün isə metallik silisium və karbon buxar və ya maye halında qatışdırılır. Bu üsulla sintez zamanı proses maye halda aparıldıqda qalıq silisium atomları səbəbindən alınmış məhsulun qatılığı çox aşağı olur. Lakin proses buxar halında aparıldıqda qalıq silisiumun miqdarını nisbətən azalmaq mümkündür.

Kimyəvi buxar yaratmaqla SiC – in sinezi zamanı hər hansı əlavə qatışıqdan istifadə etmədən 1173K-1373K kimi kifayət qədər aşağı temperaturlarda yetərinə təmiz halda bərk SiC birləşməsinin alınması mümkündür. Bu zaman metiltrixlorsilan (CH_3SiCl_3) və ya etiltrixlorsilan ($C_2H_5SiCl_3$) qazı ilə hidrogen daşıyıcı qazın kombinasiyasından istifadə edilir [179, s.332]. tipik olaraq kimyəvi buxarla SiC birləşməsi aşağıdakı reaksiyalarla sintez olunur:



Qeyd edək ki, etiltrixlorsilan reaksiyasında alınmış metan $CH_4 \rightarrow C + 2H_2$ reaksiyası ilə asanlıqla sərbəst hidrogen və karbona parçalana bilir. Bu halda isə, əgər etiltrixlorsilanı reaksiya obyektini kimi seçsək, o zaman alınmış sərbəst karbon SiC

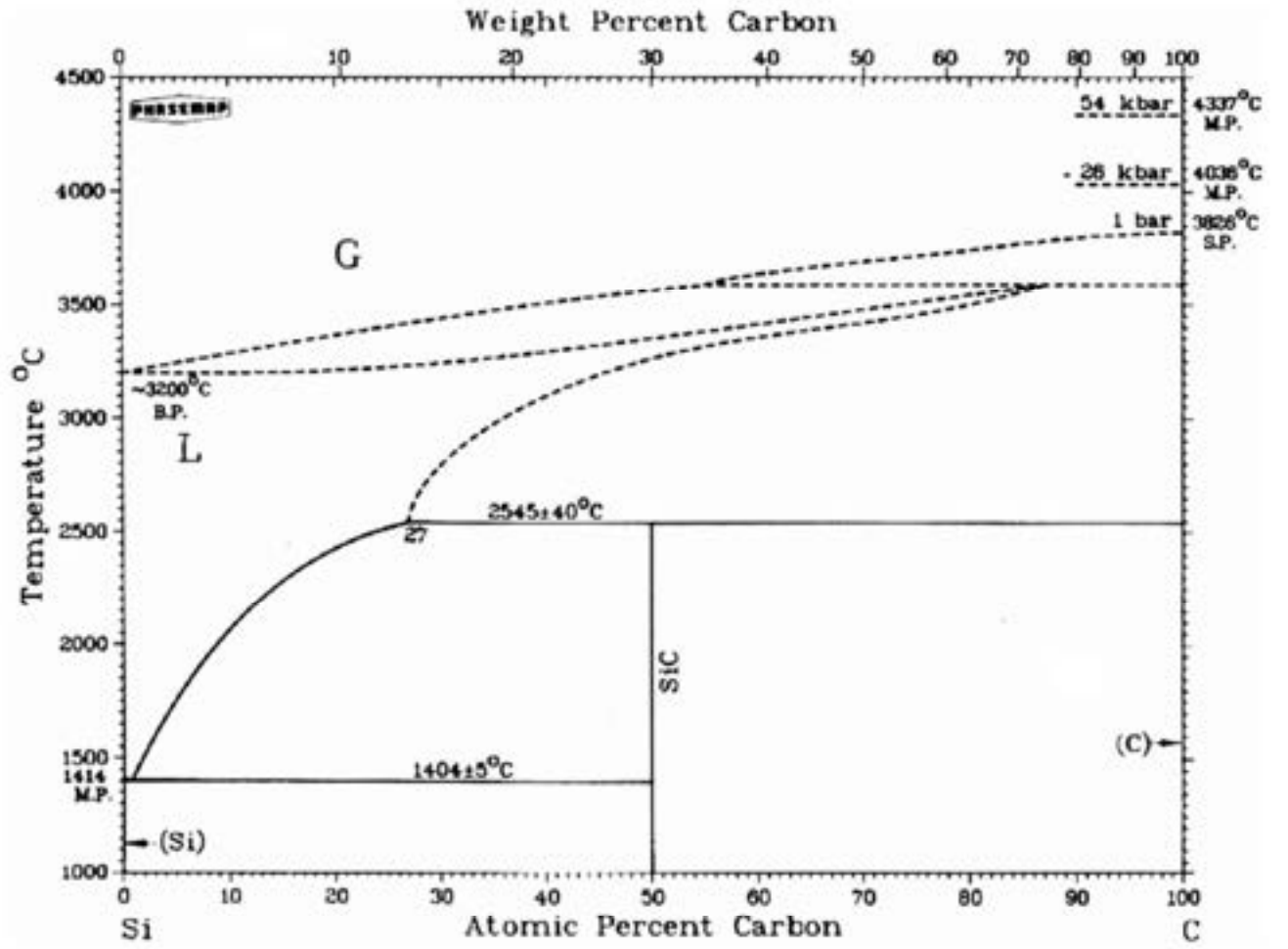
birləşməsinin alınmasında karbon artıqlığı yaradacaq. Məhz bu məqsədlə, kimyəvi buxar üsulu ilə SiC sintezində “axıntı” metodundan istifadə edirlər, hansı ki bu metodla kifayət qədər təmiz və bircins SiC almaq mümkündür. Bir çox ədəbiyyatlarda bu metodla qəbuledilən mikrostruktura malik SiC sintezi ətraflı şərh edilmişdir [179, s.332]. İlk zamanlar bu metdola sintez olunan SiC birləşməsinin mikrostrukturunda məsamələrin olması arzuolunmaz idi [98, s.131; 326, s.773; 346, s.12; 349, s.683]. Çünki, bu mikroməsamələr sonrakı istifadəsi zamanı SiC - in fiziki və kimyəvi xassələrinə təsir edir. Lakin temperaqtur altında mövcud mikroməsamələrin konsentrasiyasını azaltmaq mümkündür. Hal – hazırda yüksək təmizliyə malik SiC birləşməsi təqribən 1500K temperaturda sintez edilir. Müasir texnologiyaların köməyi ilə, sadalanan metodlarla kifayət qədər təmiz, sıxlığı nəzəri sıxlığa (3.2g/sm^3) yaxın, kristallik və stabil SiC birləşməsinin sintezi mümkündür.

Yüksək təmizlikdə və mükəmməl kristallik SiC sintez etmək üçün mütləq şəkildə Si-C sisteminin faza diaqramı nəzərə alınmalıdır. Məhz bu məqsədlə, Si – C sisteminin faza diaqramını qısa olaraq nəzərdən keçirək (Şəkil 1.3.1).

Dioqramı şərh etməzdən əvvəl qeyd edək ki, SiC kimyəvi birləşməsi sadəcə olaraq kovalent rabitədən ibarət deyil, burda həmçinin Si və C atomları arasında elektromaqnit rabitə mövcuddur. Bu və buna bənzər digər kiçik effektlər sintez prosesində temperatur sürüşməsinə səbəb olur. Ədəbiyyatlarda SiC birləşməsi üçün termal dekompozisiya temperaturu 2818K kimi qeyd edilir [234, s.487]. Bu halda, dioqrama əsasən SiC birləşməsinin alınması müəyyən təzyiqdə buxar halında Si, SiC₂ və Si₂C komponentlərinin iştirakı ilə qaz fazada mümkündür [179, s.333]. Buxar daxilində olan digər SiC, Si₂ və Si₃ komponentləri prosesin istiqamətinə demək olar ki, təsir etmir. Alınmış məhsulda β-SiC - in dissosasiya dərəcəsinin qiyməti bir neçə ədəbiyyatda nəzərdən keçirilmişdir [98, s.131; 179, s.333; 234, s.486; 326, s.773; 346, s.14; 349, s.683]. Göstərilən ədəbiyyatlarda β-SiC sintesində Si üçün dissosasiya dərəcəsi aşağıdakı kimi ifadə edilmişdir.

$$p_{Si} = 7.59 \cdot 10^{12} \exp \left[- \frac{60926}{T} \right]$$

burada p_{Si} Si – in buxar təzyiqinin (Pa) dissosiasiya dərəcəsi və T isə temperaturdur (K).



Şəkil 1.3.1 Si – C sisteminin tarazlıq halında faza diaqramı [234, s.486]

Qeyd edək ki, alınmış β -SiC birəşməsinin statistik arqon atmosferində dekompozisiya dərəcəsi temperaturun $2173K < T < 2373K$ aralığı üçün aşağıdakı kimi qiymətləndirilir [179, s.333].

$$k_d = 2.95 \cdot 10^{13} \exp \left[-\frac{56252}{T} \right]$$

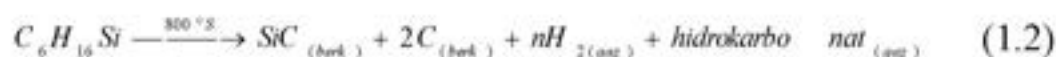
burada k_d dekompozisiya dərəcəsi ($\mu\text{qr}/\text{m}^2\text{san}$), T isə temperaturdur (K).

İndi isə nano ölçülərdə SiC hissəciklərinin sadalanan metodlara əsasən necə

sintez olduğunu qısa olaraq nəzərdən keçirək. SiC nanohissəcikləri ümumi yanaşmada adətən, buxar fəzada lazer metodu ilə və ya hər hansı kimyəvi reaksiyalarla sintez olunur. Bunlarla yanaşı, ultrasonik metodla silisium karbid nanohissəciklərinin alınması da geniş istifadə olunan metodlardandır. Kimyəvi buxar üsulu ilə sintez zamanı silisium karbidin yüksək təmizlikdə alınması mümkündür. Rentgenfaza analizlərindən məlum olmuşdur ki, bu üsulla sintez zamanı əsasən 3C-SiC politipi dominantlıq təşkil edir [142, c.1, s.132]. Bu üsulla sintez olunan nanomaterialın ölçüsünün təqribən 10-20nm aralığında olması məlum olmuşdur [142, c.1, s.136]. Lakin bu üsulla, daha kiçik ölçülərdə SiC sintezi zamanı materialın tam olaraq amorflaşması gedir. Bu isə bu üsulun digərləri ilə müqayisədə zəif cəhətidir.

Nano ölçülərdə SiC politiplərin sintez etmək üçün istifadə olunan digər metod isə elektrokimyəvi metoddur ki, bu halda nanohissəcik xüsusi maye daxilində alınır. Kolloidal halda alınmış SiC politipləri yüksək dayanıqlığa malik olur. Bu üsulla kifayət qədər kiçik ölçülü SiC nanohissəcikləri almaq mümkündür. Lakin bu halda alınan nanohissəciklər maye daxilində asılı halda qalırlar və bir müddət sonra nanohissəciklərdə mobilizasiya prosesi gedir. Eyni zamanda nanohissəcikləri mayədən istənilən alda ayırdıqda mobilizasiya qaçılmazdır.

Digər IV qrup elementlərinin nanohissəcikləri kimi, SiC nanohissəciklərini də həlledici əsaslı kimyəvi sintez metodu ilə sintez etmək mümkündür [85, s.2081]. Güclü kimyəvi rabitə nəticəsində SiC böyük ərimə temperaturuna malik olduğu üçün bu üsul iqtisadi cəhətdən daha əlverişli hesab edilir. Belə ki, bu üsulla nisbətən aşağı temperaturlarda (800-1000°C) aşağıdakı reaksiyalara uyğun olaraq SiC nanohissəciklərin sintez etmək mümkündür [251, s.1798].



Bu üsulla ölçüləri təqribən 6-12nm olan kristallik 3C-SiC nanohissəcikləri

alına bilər. Bu metodla sintez zamanı, karbotermal prosesin baş verməsi qaçılmazdır ki, bu da öz növbəsində alınmış nanohissəciyin bircinsliyinə və ölçülərinə birbaşa təsir edir.

Son zamanlar nano ölçülərdə SiC hissəcikləri sintez etmək üçün ən geniş yayılmış metodlardan biri lazer metodudur. 3C-SiC nanohissəciklərini lazer metodu ilə sintez etmək üçün yüksək təmizlikli silisium karbid materialı lazer şüaları ilə bombardman edilir. Proses etanol daxilində aparılır və lazerlə şüalanma nəticəsində aktiv karbon atomları silisium atomları ilə reaksiyaya girir və nəticədə SiC və Si nanohissəcikləri alınır. Xüsusi qatqı ilə asılı halda olan Si atomları sistemdən çıxarılır və yüksək təmizlikli SiC nanohissəcikləri alınır. Təcrübə zamanı metanol və toluolun nisbətinin 7:1 kimi olması nanokristallik β -SiC poltipinin çıxımının artmasına səbəb olur. Bu üsulla kifayət qədər təmizliyə malik və kiçik ölçülərdə nanokristallik β -SiC poltipinin alınması mümkündür. Bununla yanaşı birbaşa lazerlə xüsusi maye daxilində qəlpələrə parçalanma üsulu ilə də nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin alınması mümkündür. Bu üsulla yüksək təmizliyə malik hətta 10nm – dən kiçik ölçülərdə də nanohissəcik sintez etmək olar [142, c.1, s.159; 191, s.5091].

1.4. Silisium karbidin ionlaşdırıcı mühitlərdə tətbiq imkanları və mümkün radiasiya effektləri

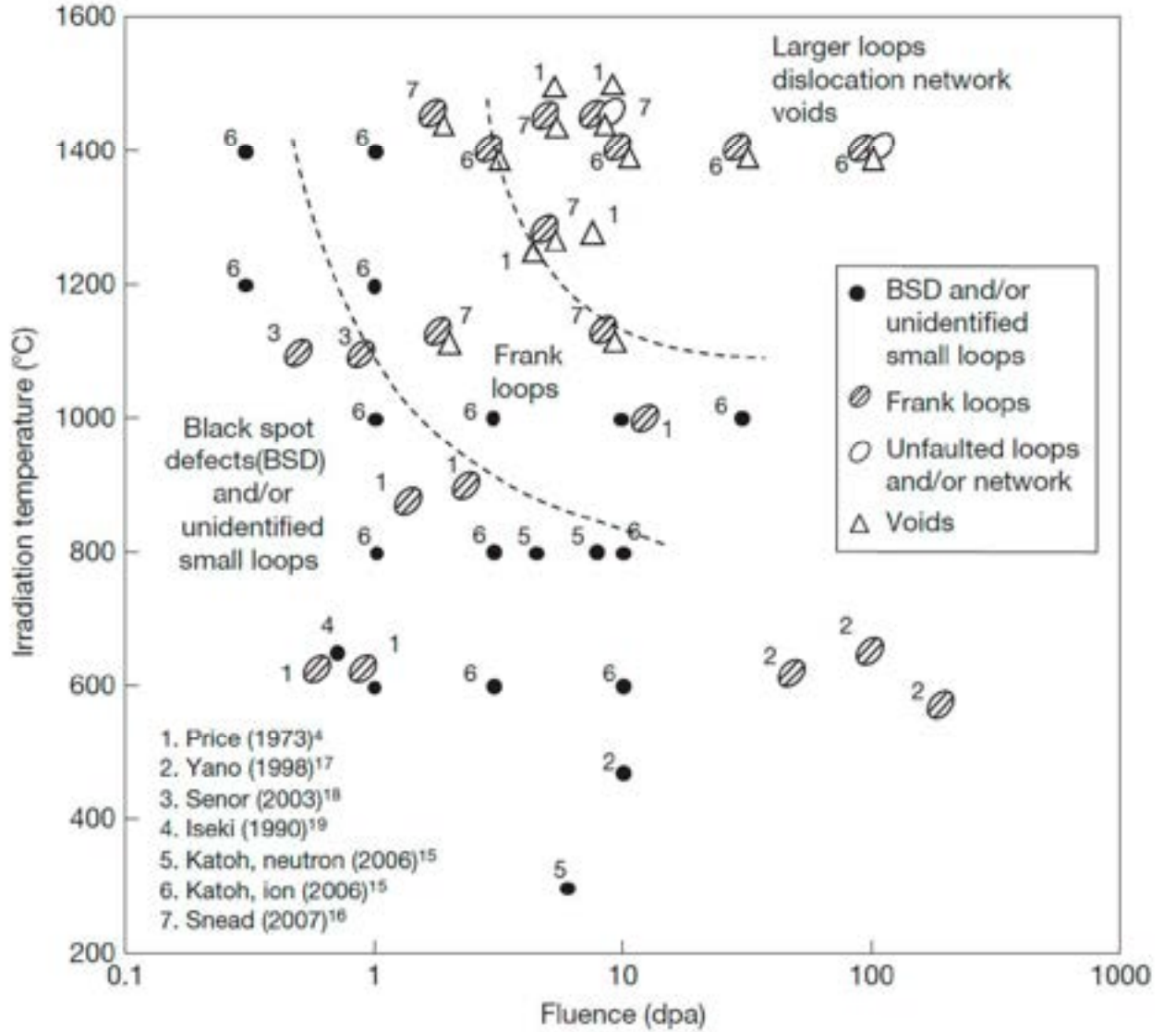
Yüksək ərimə temperaturu və təzyiq altında kimyəvi və fiziki stabilliyi nəticəsində son zamanlar silisium karbid nüvə texnologiyalarında geniş tətbiq olunur [23, s.467; 39, s.92; 87, s.18; 90, s.25; 118, s.56; 133, s.268; 166, s.227; 194, s.355; 278, s.370]. adətən SiC yüksək təzyiq və temperaturlarda işləyən reaktorlarda yanacaq elementinin qazla soyudulan hissələrində örtük elementi kimi istifadə edilir. Belə ki, reaktorun yanacaq elementi ətrafında iki qrafit arasında əsasən reflektor material kimi istifadə edilir. Bu halda SiC – in istifadəsində əsas məqsəd reaktor daxilində yaranmış yüksək təzyiq və ionlaşdırıcı mühitdə kifayət qədər kimyəvi davamlılığın təmin olunmasıdır. Bundan əlavə SiC kompozit halında da nüvə reaktorlarında və yüksək temperaturlu soyutma sistemlərində struktur materialı kimi

geniş istifadə olunur. Yanacaq elementi ətrafında SiC – in kompozit və monolit termal izaliyator kimi mümkün tətbiq imkanları araşdırılmaqdadır [162, s.382; 186, s.47; 191, s.5091; 200, s.307; 223, s.52; 267, s.103]. Bundan əlavə, hər iki halda SiC – in sürətli, maye soyutma sistemli və su soyutma sistemli reaktorlarda genişmiqyaslı tətbiq imkanları araşdırılmaqdadır [21, s.17211; 67, s.39; 178, s.1197; 183, s.126; 218, s.102; 240, s.457; 318, s.46; 339, s.1098]. Nüvə reaktorlarında istifadəsi zamanı SiC əsasən neytron şüalanmanın təsirinə məruz qalır. Belə ola halda isə, neytronlarla şüalanmanın SiC üzərində yaratdığı radiasiya effektlərinin öyrənilməsi diqqət mərkəzində olur. Neytronlarla şüalanmanın təsir altında SiC – də mümkün şişmə halları aşağı və orta temperaturlar intervalında (293K-1273K) kifayət qədər öyrənilmişdir [116, s.359; 179, s.351; 217, s.331; 228, s.504; 317, s.380; 328, s.132; 355, s.277; 360, s.75]. Ümumi yanaşmada bu materiallar nüvə reaktorlarında yanacaq elementinin örtüyü kimi araşdırılmışdır və son zamanlar bu materialların nüvə texnologiyalarında tətbiqi üçün kompozitləri öyrənilir [54, s.128; 67, s.40; 219, s.410; 243, s.625; 276, s.2801; 318, s.46; 339, s.1098]. Araşdırmalar nəticəsində məlum olmuşdur ki, təmiz halda SiC digər kompozitlərlə müqayisədə nisbətən daha çox dayanıqlığa malikdir [179, s.329]. Məhz bu səbəbdən təmiz SiC digər qatışıqları və kompozitləri ilə müqayisədə daha çox diqqət mərkəzindədir.

Təmiz SiC- in mikrostrukturunda şüalanmadan sonra baş verən dəyişikliklər son zamanlar genişmiqyaslı araşdırılmaqdadır [52, s.2187; 163, s.433; 179, s.352; 310, s.758]. Mikrostrukturların formalaşma təsviri şüalanma dozası və temperaturun funksiyası kimi müxtəlif müəlliflərin nəticələri əsasında şəkildə göstərilmişdir (**Şəkil 1.4.1**).

Bütün mülahizələrə baxmayaraq, SiC daxilində neytronlarla şüalanma nəticəsində defekt miqrasiyası və şişmə halları çox az öyrənilmişdir. Bir neçə yüz Kelvin temperaturda neytronlarla şüalanma nəticəsində SiC mikrostrukturunda fərqli tip klasterlərin yaranması mümkündür [179, s.353; 187, s.377; 269, c.4, s.216]. 423K temperatur ətrafında neytronlarla şüalanma zamanı kristal strukturun amorflaşması mümkündür [179, s.352]. Bu proses hər iki halda, ion şüalanma və neytronlarla şüalanma hallarında mümkündür. Bəzi ədəbiyyatlarda ionla şüalanma zamanı hətta

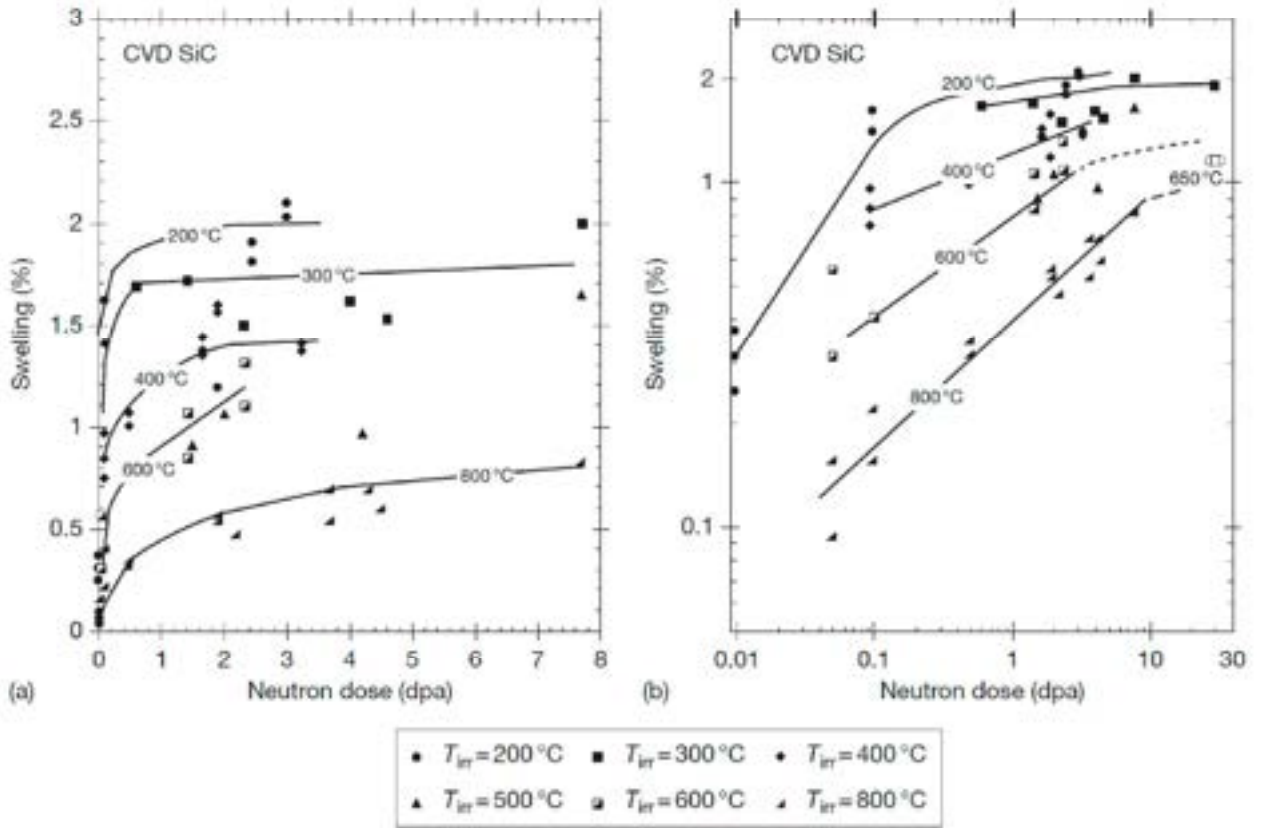
323K kimi aşağı temperaturlarda da amorflaşma halının loqaritmik artması göstərilmişdir [159, s.1221]. Göstərilmişdir ki, ion və neytronlarla birlikdə şüalanma temperaturun 323K qiymətində təqribən 10,8% amorflaşma yarada bilər [179, s.352; 269, c.4, s.217].



Şəkil 1.4.1 Kubik SiC – də neytron şüalanma və daxili ion şüalanmanın təsiri ilə mikrostruktur dəyişikliyi diaqramı [269, c.4, s.216].

Qeyd etmək lazımdır ki, amorflaşma dərəcəsi əsasən şüalanma dozasından, şüalanma müddətindən və temperaturdan kəskin asılıdır. Temperaturun 423K – dən böyük qiymətlərində kritik amorflaşmadan sonra nümunələrdə şüşmə halları başlayır və doyma həddinə qədər loqaritmik xarakter daşıyır. Fərqli şüalanma

temperaturlarında şişmə halı şüalanma dozasının funksiyası kimi **şəkil 1.4.2** – də təsvir edilmişdir.



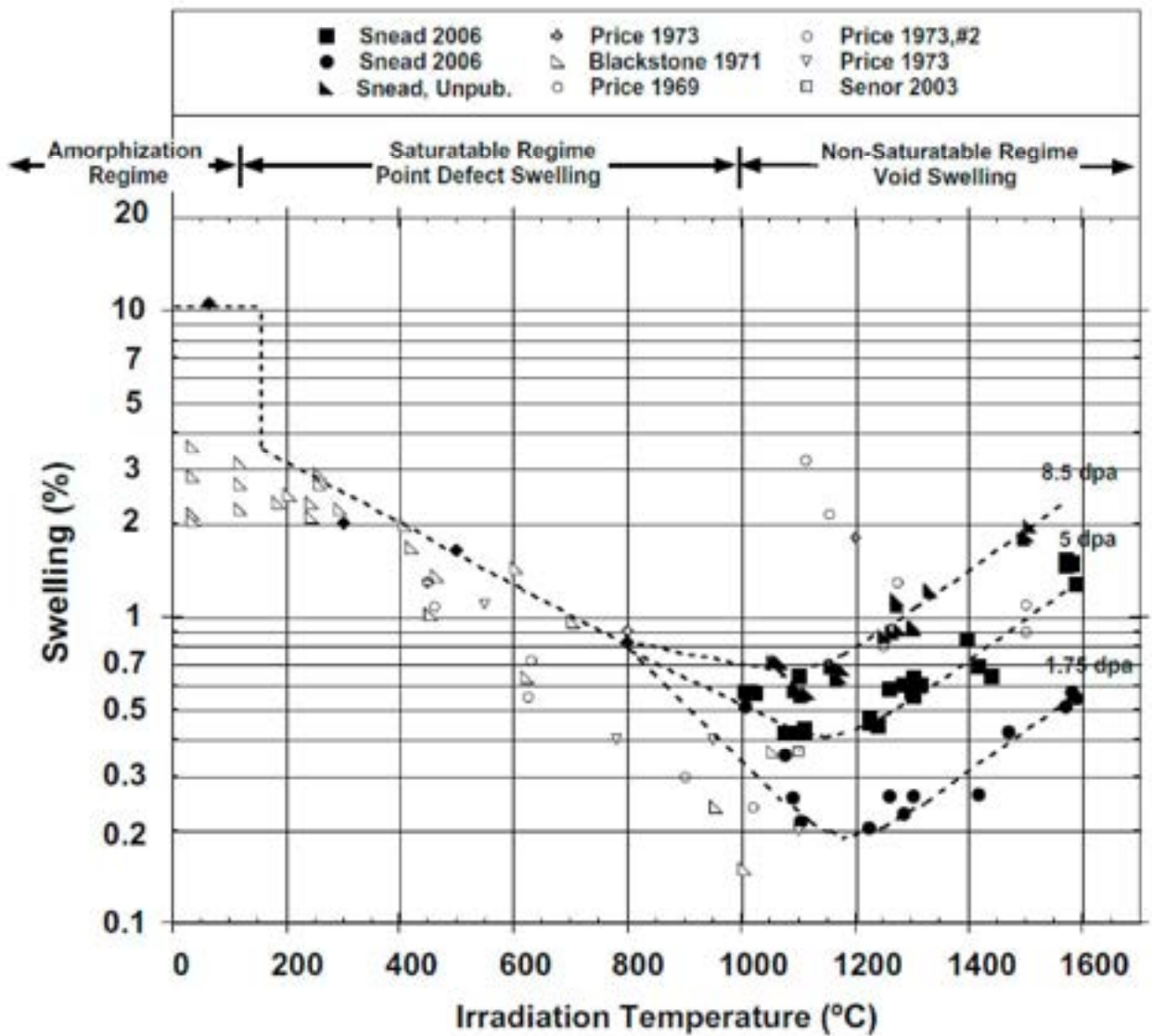
Şəkil 1.4.2 SiC daxilində neytronlarla şüalanma nəticəsində nöqtəvi defekt və amorflaşma prosesindən sonra şişmə hallarının doyma əyriləri [179, s.353]

Şəkildən görüldüyü kimi, şüalanma dozasının 1 dpa qiymətində şişmə halının dağılıqlığı temperaturun 473K qiymətində 1073K qiyməti ilə müqayisədə beş dəfəyə qədər çoxdur. Şüalanma temperaturunun artması ilə şişmə halının azalması bir çox ədəbiyyatlarda temperaturun təsiri ilə Frenkel defektlərinin rekombinasiyası ilə əlaqələndirilir [179, s.353; 269, c.4, s.218]. Digər amil isə, göstərilən təcrübədə şişmə halı kifayət qədər aşağı dozalarda nəzərdən keçirilmişdir. Belə ki, nəzərə alsaq ki, real tətbiqi zamanı material illərlə ionlaşdırıcı mühitdə qalır, o zaman Frenkel defektlərinin rekombinasiyası şişmə halına çox az təsir edəcəkdir [269, c.4, s.218]. Qeyd edək ki, kifayət qədər yüksək dozalarda neytron seli ilə şüalanma zamanı Frank düyünləri aşağı temperaturlarda da yarana bilər [269, c.4, s.219]. Bu isə öz növbəsində materialda şişmə hallarının yaranmasına başqa səbəbdir. Eyni zamanda

yüksək dozalarda şüalanma zamanı SiC daxilində vakansiya hallarının yaranması qaçılmazdır. Ədəbiyyatlarda 1523K temperaturda neytron seli ilə şüalanma zamanı SiC daxilində yaranan boşluqlar ətraflı şərh edilmişdir [269, c.4, s.219]. Qeyd edilmişdir ki, SiC daxilində boşluq halları temperaturun 1273K qiymətindən başlayaraq formalaşmağa başlayır. Lakin sürətli vakansiya yaranma prosesi, 1673K temperatur və 10dpa dozadan sonra müşahidə olunur. Pozitron anihilisasiya və elektron paramaqnit rezonansı tədqiqatlarından məlum olmuşdur ki, kubik SiC üçün silisium vakansiyası temperaturun 1073K-1173K qiymətlərindən ehtibarən formalaşır [269, c.4, s.219]. Şəkil 1.4.3 – də müxtəlif müəlliflərin yanaşması ilə fərqli temperaturda amorflaşma, nöqtəvi defektlərin və boşluqların yaranması fərqli şüalanma dozalarında qabarma halının funksiyası kimi təsvir edilmişdir. Qeyd edək ki, bu əyrilər yüksək təmizlikli SiC birləşməsi üçün limit haldır.

Şəkildən göründüyü kimi, qabarma halı temperaturun 1073K-1473K aralığında doyma halında deyil. Baxmayaraq ki, aşağı temperaturlarda nöqtəvi defektlərin yaranma prosesində doyma halı müşahidə olunur. Temperaturun 1273K qiymətindən yuxarı qiymətlərində SiC birləşməsi üçün qeyri doyma halı açıq aşkar müşahidə olunur. Qeyd edək ki, əyrilər fərqli müəlliflərin nəticələrinə əsasən 1.75 , 5.0 və $8.5 \cdot 10^{25}$ n/m² kimi üç müxtəlif dozalar üçün tərtib edilmişdir (enerjisi $E > 0.1$ MeV olan neytronlar üçün).

Temperaturun 1373K-1473K aralıqlarında həcmi qabarmalar minimum səviyyədədir və şüalanmanın 1.75 , 5.0 və 8.5 dpa dozasına mütənasib olaraq 0.2% , 0.4% və 0.7% kimi artır. Burdan görünür ki, dozanın 8.5 dpa qiymətində də yüksək temperaturlarda doyma halı müşahidə olunmur [179, s.356]. Bəzi ədəbiyyatlarda bu hal, yüksək temperatur və dozalarda SiC daxilində silisium vakansiyasının artması ilə əlaqələndirilir [269, c.4, s.220]. Bu hal temperaturun 1773 K və 1873 K qiymətlərinə qədər araşdırılmışdır. Temperaturun 1773 K qiymətində qabarma halı 1.75 , 5.0 və 8.5 dpa dozalarda uyğun olaraq 0.4% , 1% və 2% kimi müəyyən edilmişdir. Snead və həmmüəllifləri 1773 K temperaturda qabarmanın artmasını SiC və qrafit səthində qarşılıqlı təsirlə əlaqələndirmişdir [179, s.355].



Şəkil 1.4.3 Yüksək temperaturlarda SiC – in neytron seli ilə şüalanması zamanı müxtəlif aralıqlarda qabarma hallarının yaranma əyriləri ($1.75 \cdot 10^{25} \text{ n/m}^2$, $5 \cdot 10^{25} \text{ n/m}^2$ və $8.5 \cdot 10^{25} \text{ n/m}^2$, $E > 0.1 \text{ MeV}$) [269, c.4, s.220]

Belə ki, qrafitlə sərhəddə itirilən silisium atomları yenidən bərpa oluna bilmir. SiC ionlaşdırıcı mühitdə tətbiqi zamanı amorflaşma rejiminin 423K – dən kiçik, nöqtəvi defektlərin 423 K – 1023K aralığında və doymama halının (eyni zamanda boşluqların yaranma aralığının 1273K-dən yüksək temperaturlarda olmasını) 1073K-dən yuxarı temperaturlarında olmasını nəzərə almaq lazımdır. Qeyd edilən ədəbiyyatlardan alınmış əyrilər tam olaraq qabarma hallarını izah etmir, lakin ilkin yanaşmada məqbuk hesab edilə bilər.

1.5. Ədəbiyyat xülasəsinin nəticələri və dissertasiya işinin mövzusunun əsaslandırılması

Müasir zamanda SiC – in müxtəlif politipləri üzərində genişmiqyaslı tədqiqat işləri aparılmaqdadır [40, s.499; 81, s.158; 177, s.123; 245, s.38; 263, s.11; 289, s.95; 290, s.177; 330, s.109]. SiC yüksək temperaturlarda istifadə oluna bilən, mükəmməl mexaniki xassələrə malik, oksidləməyə davamlı (oxidation resistance) materialdır. Bu mükəmməl xassələrin əsasını Si və C atomları arasındakı güclü kovalent rabitə təşkil edir. Əlavə olaraq, SiC ionlaşdırıcı şüalanmaya qarşı nisbətən davamlı material kimi geniş tətbiq olunur və genişmiqyaslı araşdırılmaqdadır [12, s.207; 176, s.242; 188, s.392; 301, s.176; 338, s.23; 344, s.270; 347, s.371; 357, s.71; 365, s.16]. Lakin, nano ölçülərdə SiC hissəcikləri üzərində radiasiya effektləri və neytron çevrilmələri öyrənilməmişdir. Buna paralel olaraq, metallar, yarımkəçiricilər və oksidlər nano ölçülərdə son zamanlar dünya tədqiqatçıları tərəfindən sürətlə öyrənilməyə başlanılmışdır [15, s.014303; 75, s.311; 136, s.245406; 215, s.434; 257, s.75107; 324, s.125301; 358, s.520; 370, s.340]. Çünki, bütün tip nanomateriallar öz xassələrinə görə bütöv haldan (bulk materials) kəskin fərqlənirlər [75, s.312; 136, s.245406; 257, s.75107; 324, s.125301; 358, s.521; 370, s.340]. Nanomateriallar unikal kvant ölçü effektləri (quantum size effect), daxili və səth effektlərinə malikdirlər [29, s.199; 74, s.165314; 83, s.128; 351, s.211; 371, s.57]. Məhz bu səbəbdən nano ölçülərdə SiC üzərində ionlaşdırıcı şüalanma effektlərinin və xüsusən də neytron çevrilmələrinin öyrənilməsi son dərəcə aktual məsələdir. Ümumi yanaşmada SiC – in 200 – dən artıq politipi məlumdur ki, bunlar içərisində də elektronika sistemlərində ən geniş tətbiq olunanları heksoqonal (4H-SiC və ya 6H-SiC) və kubik (3C-SiC və ya β -SiC) modifikasiyalı politiplərdir. Bunlar nəzərə alınaraq işdə kubik modifikasiyalı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərindən istifadə edilmişdir. Nano 3C-SiC hissəcikləri mükəmməl xassələrinə görə nanokompazit, nanoelektronika və nanomexaniki sistemlərdə çox geniş tətbiq olunur [11, s.12; 25, s.16].

Nano ölçülərdə SiC hissəcikləri son zamanlar unikal fiziki və fiziki-kimyəvi xassələrinə görə dünya tədqiqatçılarının diqqət mərkəzindədir. Məlumdur ki, nano

ölçülərdə materialların fiziki xassələrinin idarə olunması çox çətin məslədir və olduqca aktual problemdir. Tədqim olunan dissertasiyada nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin bəzi fiziki xassələrinin neytron transmutasiyası ilə mümkün idarə olunma imkanları araşdırılmışdır.

Digər tərəfdən parçalanma - ərinti reaktorlarında və elektronika sistemlərində (Fission/Fusion reactor) geniş tətbiq olunan SiC – in fiziki və kimyəvi xassələrinə neytron selinin təsirinin öyrənilməsi çox önəmli məsələdir. Tədqim olunan işdə, nanokristallik SiC – in bir neçə fiziki parametrinə neytron selinin təsiri tədqiq olunmuşdur. Bu günə qədər, bir çox tədqiqatlarda ionlaşdırıcı şüalanmanın SiC üzərində yaratdığı effektlər öyrənilmişdir [57, s.125504; 138, s.161301; 151, s.115428; 201, s.24116; 213, s.54105; 216, s.197; 348, s.104103; 372, s.125203]. Lakin hələ də bu tip materialların bəzi fiziki xüsusiyyətlərinin (elektrik, dielektrik və s.) mexanizmində radiasiya effektləri tam olaraq öyrənilməmişdir. Nümunənin fiziki xassələrində neytron seli ilə şüalanma zamanı yaranan defektlər mühüm dəyişikliklər yaradır [33, s.144; 250, s.227; 295, s.107; 364, s.7227; 368, s.2165; 373, s.8521]. İlk olaraq müxtəlif müddətlərdə kəsilməz olaraq neytron şüalanmaya məruz qalmış nanohissəciklərdə yaranmış defektləri qısa olaraq nəzərdən keçirək. Belə ki, SiC nanohissəcikləri kubik modifikasiyaya malik Si və C atomlarından ibarətdir ki, neytron selinin qəfəs atomlarına təsiri zamanı bəzi atomlarda yüksək enerji təpilməsi (high energy recoils, primary knock-on atoms – PKA) müşahidə oluna bilər [48, s.462; 91, s. 282; 96, s.121; 106, s.469; 260, s.115; 277, s.768; 336, s.457]. PKA atomları ilə digər qonşu atomlar arasında enerji mübadiləsi zamanı nöqtəvi defektlər və ya klasterlər əmələ gəlir ki, bunlar da fundamental defektlərin əsasını təşkil edir.

Məlum olduğu kimi, neytronlar yüksüzdür və nüvə reaktorlarında neytron seli ilə şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərini təşkil edən atomların nüvələri birbaşa neytronlarla qarşılıqlı təsirdə olur. Bu isə nüvələrin çevrilməsinə və ya digər radiasiya effektlərinin yaranmasına gətirib çıxara bilər. Bütün proseslərdə neytronların nüvələr üçün mövcud effektiv en kəsikləri çox mühüm rola malikdir. Effektiv en kəsinin qiymətindən asılı olaraq prosesin hansı ehtimalla baş verməsi haqqda daha müfəssəl məlumat almaq mümkündür. Məhz bu səbəbdəndir ki, əkəsər

nüvə materialları üçün effektiv en kəsiyinin qiyməti müxtəlif metodların tətbiqi ilə nəzəri və praktiki hesablanır. Demək olar ki, bütün tip nüvələr üçün effektiv en kəsiyinin ədədi qiyməti çox kiçik qiymətlər alır. Bunun nəticəsidir ki, effektiv en kəsiyi “barn”larla ifadə olunur ($1b = 10^{-28}m^2$). Digər tərəfdən effektiv en kəsiyi qarşılıqlı təsirin növündən asılı olaraq dəyişir. Neytron seli ilə şüalanma zamanı neytronların Si və C atomları ilə qarşılıqlı təsiri nəticəsində nöqtəvi və ya klaster defektlər yarana bilər. 3C-SiC nanomaterialının qəfəslərində olan hədəf atomlarının şüalanma zamanı əlavə enerji alması nümunənin dielektrik xassələrində dəyişikliyə səbəb olur.

Eyni zamanda məlumdur ki, 3C-SiC çox yüksək ərimə temperaturuna malikdir və işçi oblastı yüksək temperaturlarda istifadə olunan cihaz və qurğularda iqtisadi cəhətdən son dərəcə əlverişli material sayılır. Fərqli temperaturlarda tətbiqi zamanı bu tip birləşmələrin termik davamlılığının öyrənilməsi son dərəcə maraqlıdır. Digər tərəfdən, materiallar nano ölçülərdə çox böyük xüsusi səth sahəsinə (Specific Surface Area - SSA) malik olduqları üçün, fərqli fiziki xüsusiyyətlərə malik olurlar. Nano ölçülərdə digər materiallarda olduğu kimi, silisium karbidin də özünəməxsus funksional və yeni fərqli fiziki xassələri mövcuddur [153, s.1993; 157, s.125; 161, s.9451; 226, s.385; 286, s.831; 337, s.5628]. Bu xüsusiyyətləri nəzərə alınaraq, nanokristallik SiC üzərində ionlaşdırıcı şüalanma effektlərinin öyrənilməsi aktualdır. Nanomateriallarda xüsusi səth sahəsinin böyük olması səthdə istilik daşınmasında, fiziki proseslərdə və xüsusən də termofiziki proseslərdə kəskin fərqin yaranmasına səbəb ola bilər. Nano ölçülərdə klassik termodinamikadan fərqli yeni hallar müşahidə olunur ki, bu da yeni interdisiplinar nanotermodinamik nəzəriyyənin meydana gəlməsinə səbəb olmuşdur [59, s.15; 70, s.40; 210, s.67; 258, s.154; 261, s.314; 332, s.82]. Hazırda nanotermodinamik nəzəriyyənin bir neçə modeli vardır. Ümumi yanaşmada bu nəzəriyyə makroskopik və nanoskopik nəzəriyyələr arasında sanki körpü rolunu oynayır. Son zamanlar, nanotermodinamik nəzəriyyənin köməyi ilə, nanomateriallarda ölçüdən asılı olaraq termofiziki xassələrinin dəyişməsi genişmiqyaslı araşdırılır. Təqdim olunan işdə, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində termik işlənmə sürətindən, neytronlarla şüalanma müddətindən və temperaturdan asılı

olaraq baş verən müxtəlif tip termik proseslərin kinetik təhlilli aparılmışdır. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin termik parametirləri 300-1270 K temperatur intervalında fərqli termik işlənmə sürətlərində süalanmadan öncə və sonra müqayisəli öyrənilmişdir.

Kubik modifikasiyalı 3C-SiC nanohissəcikləri öz mükkəməl fiziki xassələrinə görə ərinti reaktorlarında çox geniş tətbiq potensialına malikdir [23, 143, s.136; 167, s.748; 243, s.625; 296, s.89; 356, s.292]. Oksidləşməyə müqavimətinin çox olması və yüksək temperaturlarda şüalanmaya davamlılığı 3C-SiC – in tətbiq imkanlarını artırır. Günümüzə qədər bir neçə tədqiqat işlərində silisium karbidə neytron şüalanmanın təsiri öyrənilmişdir [39, s.94; 95, s. 77; 231, s.1163]. Neytron şüalanmanın təsiri nəticəsində nanokristallik 3C-SiC - də yaranan fərqli tip defektlər onun fiziki xasəllərində dəyişikliyə səbəb olur. Lakin, şüalanma nəticəsində yaranan bu defektlərin təbiəti günümüzə qədər tam olaraq ətraflı öyrənilməmişdir. Nanomaterialların strukturunu və quruluşunu öyrənmək üçün ən geniş istifadə olunan metod TEM və ya SEM analizidir ki, dissertasiyada da bu üsullardan istifadə edilmişdir. SiC nanomaterialı bir neçə tədqiqatçı tərəfindən fərqli yanaşmalarla TEM və ya SEM metodları ilə öyrənilmişdir [117, s.657; 148, s.150; 149, s.675; 227, s.3052; 235, s.443; 255, s.265; 281, s.59]. TEM cihazında çox böyütmələrdə kristalda mövcud atomların aşkar müşahidə olunması, struktur haqqında daha müfəssəl məlumat verməyə imkan verir. Nanomaterial üzərində radiasiya effektlərini daha yaxşı başa düşmək üçün TEM və ya SEM qurğularından geniş istifadə olunur [167, s.748; 296, s.89]. Həmçinin, TEM analizləri ilə ionlaşdırıcı şüalanma nəticəsində nanomaterialda yaranan yeni defekt və ya kalasterlər vizuallaşdırıla bilər.

Nanomateriallarda proseslər bir neçə atom və ya atomlar qrupu tərəfindən getdiyindən, onların təmizlik dərəcəsinin yüksək olması çox önəmlidir. Sintez olunmuş materialların fərqli texnologiyalarda tətbiq imkanları, birbaşa onun təmizlik dərəcəsi ilə asılıdır. Günümüzə qədər, bir neçə metod və vasitələrlə sintez olunmuş materialların təmizlik dərəcəsi artırılmaqdadır. Nanomaterialların texnologiyalarda tətbiq imkanlarının genişlənməsi məqsədi ilə, bu tip materialların təmizlik dərəcəsinin artırılması istiqamətində intensiv tədqiqatlar aparılır [46, c.8, 346; 141,

s.2335; 154, s.328; 274, s.87; 294, s.250; 314, s.259; 363, s.403]. Təqdim olunmuş işdə 2×10^{13} n/sm²san intensivlikli neytronların təsiri altında 18 nm ölçülü 3C-SiC nanomaterialında neytron selinin təsiri nəticəsində əmələ gələn radioaktiv nüvələrin aktivliklərinin integral dozadan və şüalanmadan sonrakı parçalanma vaxtından asılılıqları tədqiq olunub. Alınmış nəticələr əsasında silisium karbid nanomaterialının tərkibində olan qarışıqların keyfiyyət və kəmiyyət identifikasiyası aparılıb. Günümüzdə 99-99,9% aralığında təmizliyə malik nano silisium karbid yüksək təmizlikli SiC nanomaterialı hesab edilir və bu təmizliyə malik nümunələr geniş tətbiq sahəsinə malikdir. Təcrübələr əsasında məlum olmuşdur ki, istifadə olunan nanomaterial 99.35+% təmizliyə malikdir ki, bu da yüksək təmizliyə malik SiC nanomaterialı hesab oluna bilər. Amma nümunənin tərkibində təqribən 0.65% - dən az qarışıq var və bu ilk baxışdan çox kiçik görünsə də nanomiqyasda və atomar tərtibində bu çox böyük rəqəmdir. Belə ki, nəzərə alsaq ki, bir qram SiC nanotozunda təqribən $1,7 \times 10^{22}$ ədəd atom səviyyəsində hissəcik var onda 0.65 faizin nə qədər böyük rəqəm olduğu aşkar görünür (təqribən 1.1×10^{20} qarışıq hissəciyi). Düzdür 0.65% qarışıq nümunənin fiziki parametrlərinə çox az təsir edir, amma reaktorda şüalanma zamanı bu qarışıq özünü aşkar şəkildə biruzə verir və onların tərkiblərinin tədqiqi çox əhəmiyyətlidir. Belə ki, məhz bu qarışıqın təsiri nəticəsində təcrübələr aparılan nümunələrin aktivliyi 3GBq - ə qədər artmışdır. Belə olan halda isə, neytron seli ilə şüalanmış nanomaterialın aktivliyi azalana qədər (təqribən 500 saat müddətində) digər eksperimentlərin aparılması mümkün deyil. Belə ki, TRİGA Mark II tipli tədqiqat nüvə reaktorunda aparılan oxşar eksperimentlərdə “soyuma vaxtı” qeyd edilir [119, s.3086; 120, s.753; 123, s.30; 124, s.23; 125, s.44; 126, s.191; 127, s.99; 128, s.995; 129, s.1830002; 130, s.1750068]. Təqdim olunan işdə aktivliyi yarıdan izotoplar və uyğun izotopların aktivliyinin standart azalma qanunauyğunluğu verilmişdir.

Nano ölçülərdə materialların fiziki xassələrinə təsir etmək üçün istifadə olunan ən mükəmməl metodlardan biri də neytronlara təsir etməkdir. Neytron seli ilə nanomaterialın qəfəs atomlarında asanlıqla aşqar elementi yerləşdirmək olur. Təbii olaraq yaranmış yeni aşqar elementlər nanomaterialın fiziki xassələrində dəyişikliyə

səbəb olacaqdır. Fiziki xassələrin və elektron proseslərin öyrənilməsi üçün ən geniş yayılmış üsullardan biri də V-A xarakteristikasıdır [16, s.33; 71, s.1562; 109, s.214103; 209, s.12; 283, s.1957; 325, s.95701]. Ümumi yanaşmada, silisium karbidin V-A xarakteristikası dünya alimləri tərəfində genişmiqyaslı araşdırılmışdır [31, s.233505; 71, s.1562; 170, s.442]. Lakin nano ölçülərdə silisium karbidin V-A xarakteristikası az öyrənilmişdir. Xüsusi halda isə, neytron selinin V-A xarakteristikasında, cərəyan – müqavimət, gərginlik – müqavimət və Fowler–Nordheim asılılıqlarında yaratdığı effektlər öyrənilməmişdir. Təqdim olunan işdə, neytronlarla şüalanma nəticəsində 3C-SiC nanokristallarının fiziki xassələrində baş vermiş dəyişikliklər eyni zamanda V-A xarakteristikası ilə də öyrənilmişdir. Əlavə olaraq, cərəyan – müqavimət, gərginlik – müqavimət, Fowler–Nordheim, gərginlik – güc və xüsusi güc-cərəyan sıxlığı asılılıqları da şüalanmadan əvvəl və sonra müqayisəli təhlil edilmişdir.

3C-SiC nanokristalları yarımkeçirici kimi tətbiq olunarkən qadağan olunmuş zolağın eni (bandgap) çox mühüm əhəmiyyətə malikdir. Ümumi yanaşmada, SiC politipindən asılı olaraq 2.4eV – 3.2eV kimi çox geniş qadağan olunmuş zolaq eninə (wide bandgap) malik materialdır [119, s.3086; 126, s.193; 142,]. Otaq temperaturunda 3C-SiC nanokristallarının qadağan olunmuş zolağın eni 2.2eV ətrafındadır [142, c.1, s.8]. Qadağan olunmuş zolağın eni 3C-SiC nanokristallarının yarımkeçirici kimi fiziki xassələrinin əsas xarakteristikasıdır. Neytronlarla şüalanma zamanı, neytron çevrilmələri, rabitə sürüşməsi (dangling bonds), defekt və ya əlavə yükdaşıyıcıların yaranması 3C-SiC nanokristallarının yarımkeçiricilik xüsusiyyətlərinə təsir edir. Neytron çevrilmələri nəticəsində yaranmış ³¹P izotopu, 3C-SiC nanokristallarında n tip aşqar olur ki, bu da birbaşa fiziki xassələrə təsir edir [112, s.421; 173, s.1163; 179, s.351; 282, s.1098; 297, s.524]. 3C-SiC nanokristalları neytronlarla şüalanarkən yaranan defektlər nümunənin dielektrik xassələrdə mühüm dəyişikliklər yaradır. Neytronlarla şüalanmış 3C-SiC nanokristallarının dielektrik parametrlərinin şüalanma müddəti, tezlik və temperaturdan asılılığı aşkar olunub. Müxtəlif müddətlərdə kəsilməz olaraq neytronla şüalanmaya məruz qalmış nanohissəciklərdə yaranmış defektlər nümunələrin dielektrik parametrlərində

dəyişikliklərə səbəb olur.

Son zamanlar, nano 3C-SiC hissəcikləri unikal xassələrinə görə nanokompazit, nanoelektronika və nanomehanika sistemlərdə çox geniş tətbiq olunur. Yarımkəçirici kimi, nano ölçülərdə silisium karbidin tətbiqi zamanı onun p və ya n tip aşqarlanması müasir zamanda aktual məsələdir. Texnoloji baxımdan, neytron seli ilə nano ölçülərdə silisium karbidin aşqarlanması mükəmməl üsuldür. Təbii olaraq neytron seli ilə aşqarlanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fiziki xassələrində dəyişikliklər müşahidə olunur. Neytron seli ilə aşqarlanma materialın elektrik, dielektrik və digər fiziki xassələrində kəskin dəyişikliklər yaradır. Aşqarlanma zamanı materialın elektrik xassələrində baş verən dəyişiklikləri öyrənmək üçün ən mükəmməl üsullardan biri də kompleks impedans spektroskopiyası metodudur [17, s.1657; 44, s.1361; 49, s.2689; 66, s.539; 69, s.91; 76, s.187; 164, s.195; 233, s.238; 205, s.101; 244, s.2557; 321, s.1562; 335, s.1591]. Neytronlarla şüalanma nəticəsində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaranan yeni aşqar elementlər (^{31}P və ya ^{32}S) impedans spektrlərində dəyişikliyə səbəb olur. Ümumi yanaşmada nanomaterialların fiziki xassələrinin idarə edilməsi çox mürəkkəb və önəmli məsələdir. Təqdim olunan dissertasiya işinə uyğun aparılan təcrübələr göstərmişdir ki, neytron seli ilə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin bir çox fiziki xassələrini idarə etmək mümkündür [119, s.3086; 120, s.753; 123, s.30; 124, s.23; 125, s.44; 126, s.191; 127, s.99; 128, s.995; 129, s.1830002; 130, s.1750068, 129, s.]. Belə ki, neytron selinin təsir müddəti ilə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaranan aşqar elementlərin konsentrasiyasını idarə etmək olar. Yeni yaranmış aşqar elementlərin konsentrasiyasının dəyişməsi, birbaşa nanomaterialın fiziki xassələrinin dəyişməsinə səbəb olur. Şüalanma müddəti ilə aşqarlanma konsentrasiyası dəyişdirilərək nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedans spektrləri müqasili öyrənilmişdir. Nano ölçülərdə 3C-SiC hissəciklərinin impedans spektrlərində aşqarlanma zamanı (şüalanma müddətinə mütənasib olaraq) mümkün dəyişikliklər analiz edilmişdir. Kompleks impedans spektroskopiyası ilə nanomaterialın elektrik xassələri, keçiriciliyin təbiəti və metal – yarımkəçirici keçidi ətraflı təhlil edilmişdir.

Müxtəlif üsullarla aşqarlanma zamanı kristallik SiC – in strukturunda fərqli

tip arzuolunmaz defektlər əmələ gəlir [28, s.3038; 266, s.15; 367, s.268]. Baxmayaraq ki, müasir zamanda, SiC – in neytronlarla aşqarlanması digər üsullarla müqayisədə daha əlverişli hesab edilir, eyni zamanda neytronlarla aşqarlanma zamanı kristallik SiC – də defektlər yaranır və elektronikada tətbiqi zamanı bu tip defektlərin öyrənilməsi çox önəmlidir [36, s.165206; 45, s.015502; 63, s.2952; 131, s.965; 132, s.1298; 178, s.1197; 236, s.125207; 246, s.16479; 268, s.103; 298, s.892]. Yeni yaranmış defekt konsentrasiyası nanomaterialın fiziki xassələrində kəskin dəyişikliyə səbəb ola bilər. Neytronlarla şüalanma zamanı nanokristallik SiC – də yarana biləcək əsas defektlər Si və ya C vakansiyası və digər keçid elementlərinin aşqarlanması ola bilər. Nanomaterialda yaranan defektləri öyrənmək üçün ən geniş istifadə edilən üsullardan biri ESR (elektron spin resonans) spektroskopiyaya (ESR, və ya elektron paramaqnit resonans EPR) üsuludur. Neytronla şüalanma zamanı paramaqnit mərkəzlərin konsentrasiyasının dəyişməsi maddənin elektrik və dielektrik xassələrində dəyişikliklərə səbəb olur [119, s.3086; 120, s.753; 123, s.30; 124, s.23; 125, s.44; 126, s.191; 127, s.99; 128, s.995; 129, s.1830002; 130, s.1750068]. İşdə EPR üsulu ilə paramaqnit defektlərin, sərbəst radikalların və sərbəst elektronların konsentrasiyası və təbiəti öyrənilmişdir. Nanokristallik 3C-SiC nümunəsində paramaqnit mərkəzlərin konsentrasiyası neytronla şüalanma müddətinin (1, 5, 10 və 20 saat şüalanma) funksiyası kimi nəzərdən keçirilmişdir.

II FƏSİL

FİZİKİ XASSƏLƏR VƏ NEYTRONLARLA ŞÜALANDIRMA

METODİKALARI

Nanokristallik SiC hissəciklərinin neytron seli ilə modifikasiya olunma üsulları bu fəsildə ətraflı öyrənilmişdir. Təcrübələrdə istifadə olunan TRİGA Mark II tipli tədqiqat nüvə reaktoru neytron mənbəsi kimi nəzərdən keçirilmişdir. Neytron selinin təsiri nəticəsində nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin aktivlik analizlərinin metodiası şərh edilmişdir. 3C-SiC nanokristallarının struktur və nanoskopik xüsusiyyətlərinin analizi üçün istifadə olunan HRTEM, TEM, FESEM, SEM, SAED və EDP metod və avadanlıqları haqqında qısa məlumat verilmişdir. 3C-SiC nanokristallarının termal parametrlərinin öyrənilməsi üçün istifadə olunan üsul və qurğular nəzərdən keçirilmişdir. Eyni zamanda, 3C-SiC nanokristallarının EPR, elektrik və dielektrik xassələrinin öyrənilmə metodikaları və qurğular haqqında qısa icmal bu fəsildə nəzərdən keçirilmişdir. Bu fəsildə nanokristallik SiC hissəciklərinin neytron seli ilə modifikasiya olunma üsulları, HRTEM, TEM, FESEM, SEM, SAED, EDP, EPR, elektrik və dielektrik xassələrinin öyrənilmə metodikaları və qurğuları nəzərdən keçirilmişdir. Təcrübələrdə neytron mənbəsi kimi istifadə olunan Jozef Stefan İnstitutunun (JSI) TRİGA Mark II tipli tədqiqat nüvə reaktorunun strukturu və şüalandırılma metodikaları şərh edilmişdir. Təcrübələr aparılan reaktorun maksimal gücü 250kVt – dır və nüvəsi diametri 2 m və hündürlüyü 6.25 m olan aliminium silindir çən daxilində yerləşir. Neytron mənbə kimi istifadə olunan TRİGA Mark II tipli tədqiqat nüvə reaktorunun nüvəsi dairəvi konfigurasiyaya malikdir. Belə ki, reaktor nüvəsi mərkəzdən başlayaraq cəmi altı konsentrik halqalardan təşkil olunmuşdur. Ümumilikdə JSI TRİGA Mark II reaktorunun daxilində 91 mümkün vəziyyət mövcuddur ki, bu da neytron mənbəsinin yerləşdirilməsi, idarə çubuqları, şüalandırma kanalları və sair müxtəlif məqsədlər üçün istifadə edilir. Təcrübələr

aparılan mərkəzi kanalda (kanal A1) tam güc rejmində neytron selinin sıxlığı 2×10^{13} n/sm²san kimidir.

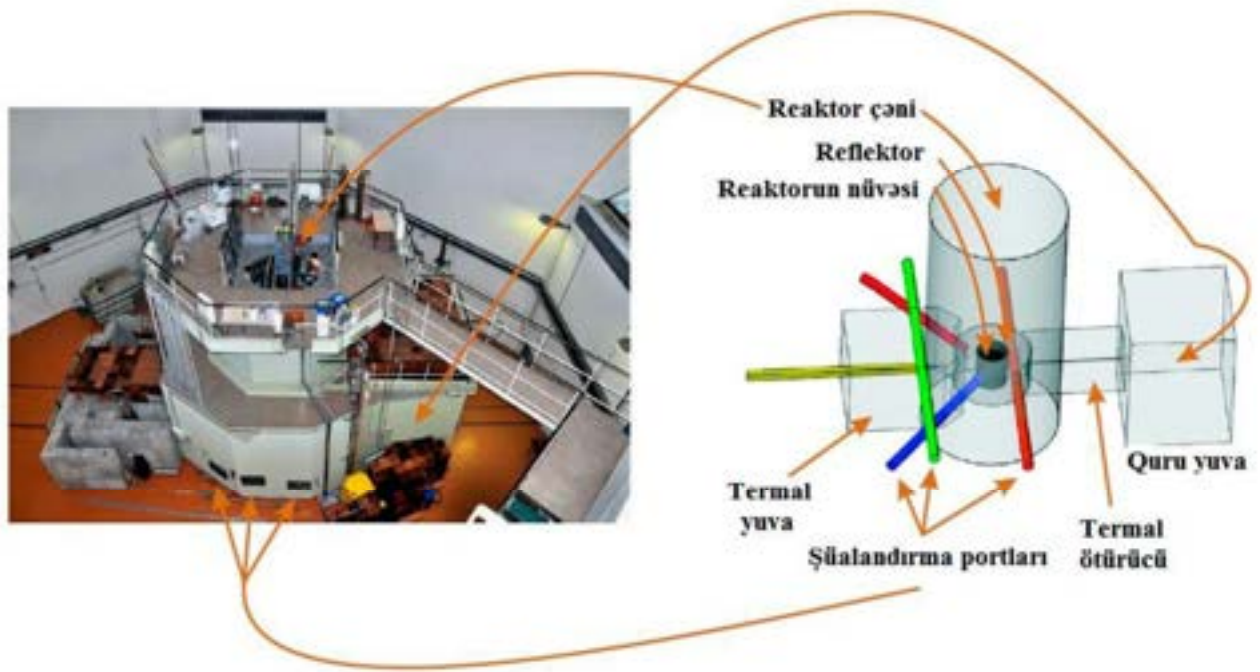
Neytron selinin təsiri nəticəsində nanomaterialın aktiliyi təqribən 3GBq - ə qədər artmışdır ki, bunu da yaranan səbəblər araşdırılmışdır. 3C-SiC nanokristallarının təmizlik dərəcəsi və qatışıq elementlərinin tərkibini öyrənmək məqsədi ilə aparılan k_0 əsaslı instrumental neytron aktivləşmə analizləri (k_0 -INAA) metodikası bu fəsildə ətraflı izah edilmişdir. Dissertasiyada 3C-SiC nanokristallarının strukturunu, radiasiya defektlərini, digər ionlaşdırıcı şüalanma effektlərini öyrənmək üçün istifadə olunan HRTEM, TEM, FESEM, SAED, EDP və SEM metodları şərh edilmişdir. Eyni zamanda nanomaterialın termik xassələrini öyrənmək üçün istifadə olunan DSC, DTA, TGA və TG üsulları bu fəsildə verilmişdir. Bu fəsildə, həmçinin 3C-SiC nanokristallarının elektrik və dielektrik xassələrinin öyrənilməsi üçün istifadə olunan üsul nəzərdən keçirilmişdir. Düzdür, hal – hazırda geniş tezlik aralığında dielektrik spektroskopiyasının aparılması üçün universal metod yoxdur. Amma, hər bir aralıq üçün müəyyən metodlar mövcuddur və hər birinin öz üstünlükləri vardır ki, dissertasiya işində də məqsədə nail olmaq üçün seçilmiş aralıqda üstün metoddan istifadə edilərək təcrübələr aparılmışdır. Bununla yanaşı, 3C-SiC nanokristallarının volt – amper (V – A) xarakteristikalarını öyrənmək üçün istifadə olunan metod bu fəsildə şərh edilmişdir. İstər dielektrik spektroskopiyası və istərsə də volt – amper (V – A) xarakteristikalarını öyrənmək üçün istifadə olunan kompüterlə əlaqələndirilmiş sxem təsvir edilmişdir. İmpedans spektroskopiyası və volt – amper (V – A) xarakteristikalarını öyrənmək üçün istifadə olunan qurğular “LabView” və digər oxşar proqramlarla idarə edilmiş və təcrübi nəticələr emal üçün kompüterə ötürülmüşdür. Fəsildə həmçinin, 3C-SiC nanokristalları daxilində yaranan defekt və paramaqnit mərkəzlərin öyrənilməsi məqsədilə istifadə olunan EPR spektrometrinin sxematik təsviri verilmişdir. Ümumi yanaşmada, bu fəsildə bütün təcrübələrdə istifadə olunan qurğu və avadanlıqların sxematik təsviri verilmişdir.

2.1 TRİGA Mark II tipli tədqiqat nüvə reaktoru neytron mənbəsi kimi

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərini neytron seli ilə modifikasiya etmək məqsədilə TRİGA Mark II tipli tədqiqat nüvə reaktorundan istifadə edilmişdir. Təcrübələrdə istifadə olunan Jozef Stefan İnstitutunun (JSİ) TRİGA Mark II tipli tədqiqat nüvə reaktoru digər TRİGA reaktorlara uyğun konfigurasiyada inşa edilmişdir. JSİ TRİGA Mark II reaktorunun maksimal iş gücü 250kVt – dır. Reaktor iş rejimində olarkən, soyutma sistemi olaraq yüngül sudan istifadə olunur. Ümumi yanaşmada reaktorun fotosəkili və bəzi hissələrinin sxematik təsviri şəkildə verilmişdir (**Şəkil 2.1.1**).

Təcrübələr aparılan reaktorun nüvəsi diametri 2 m və hündürlüyü 6.25 m olan alüminium silindir çən daxilində yerləşir. Neytron mənbə kimi istifadə olunan reaktor nüvəsi dairəvi konfigurasiyaya malikdir. Belə ki, reaktor nüvəsi mərkəzdən başlayaraq (uyğun olaraq A – dan F - ə kimi nömrələnmişdir) altı konsentrik halqalardan təşkil olunmuşdur. Ümumilikdə JSİ TRİGA Mark II reaktorunun daxilində 91 mümkün vəziyyət mövcuddur. Bu vəziyyətlər neytron mənbəsinin yerləşdirilməsi, idarə çubuqları, şüalandırma kanalları və sair müxtəlif məqsədlər üçün istifadə edilir. Reaktor 250kVt iş rejimində olarkən onun fotosəkili və nüvənin üstən sxematik təsviri **şəkil 2.1.2** – də təsvir edilmişdir [4, s.41].

Tədqiq olunan dissertasiya işində bütün nümunələr mərkəzi kanalda neytron seli ilə şüalandırılmışdır. JSİ TRİGA Mark II reaktorunun mərkəzi kanalı (Central Channel - CC) alüminium boru ilə əhatə olunmuşdur. Digər şüalandırma kanalları da, mərkəzi kanal ətrafında F15, F19, F22, F24 və F26 nömrələri ilə yerləşdirilmişdir. Bundan əlavə D8, E10 və E11 vəziyyətərində üçbucaq şüalandırma kanalı yerləşdirilmişdir. Belə ki, üçbucaq şüalandırma kanalı ölçüləri nisbətən böyük olan materialları şüalandırmaq üçün nəzərdə tutulmuşdur. Bunlardan əlavə reaktor daxilində neytron selinin sıxlığını mütəmadi öyrənmək və nəzarətdə saxlanmaq məqsədilə daxili diametri 8mm ilə 10mm aralığında dəyişən bir neçə ölçü yuvaları mövcuddur.



Şəkil 2.1.1 JSİ TRİGA Mark II reaktorunun üstədən fotosəkili və sxematik təsviri.



- | | |
|---|------------------------------------|
| ○ Yanacaq elementi 20% ²³⁵ U | ⊕ Sürətli pnevmatik ötürmə sistemi |
| ● İdarə çubuqları | ⊖ Bəzəli pnevmatik nəşil kanalı |
| ⊕ NS Neytron mənbə | ⊖ CC Mərkəzi şüalandırma kanalı |
| ⊖ IC Şüalandırma kanalları | ⊖ TC Uçbucaq şüalandırma kanalı |
| ● Ölçmə vəziyyətləri | |

Şəkil 2.1.2 JSİ TRİGA Mark II reaktorunun 250kVt iş rejimində fotosəkili və üstədən sxematik təsviri

JSİ TRİGA Mark II reaktorunun nüvəsini ətrafı qrafit reflektor ilə əhatə edilmişdir. Qrafit reflektor üzərində tangensial və radial şüa borusu üçün iki hissədə

yuva mövcuddur. Hər iki şüa borusu qarşı qarşıya olmaqla “termal yuva” və “termal quru yuva” kimi iki şüalandırma hissəsinə xidmət edir. Qeyd edək ki, hər iki boruda yalnız termal neytronlar mövcud olur və fiziki ölçüləri daha böyük olan obyektlərin şüalandırılması üçün nəzərdə tutulmuşdur.

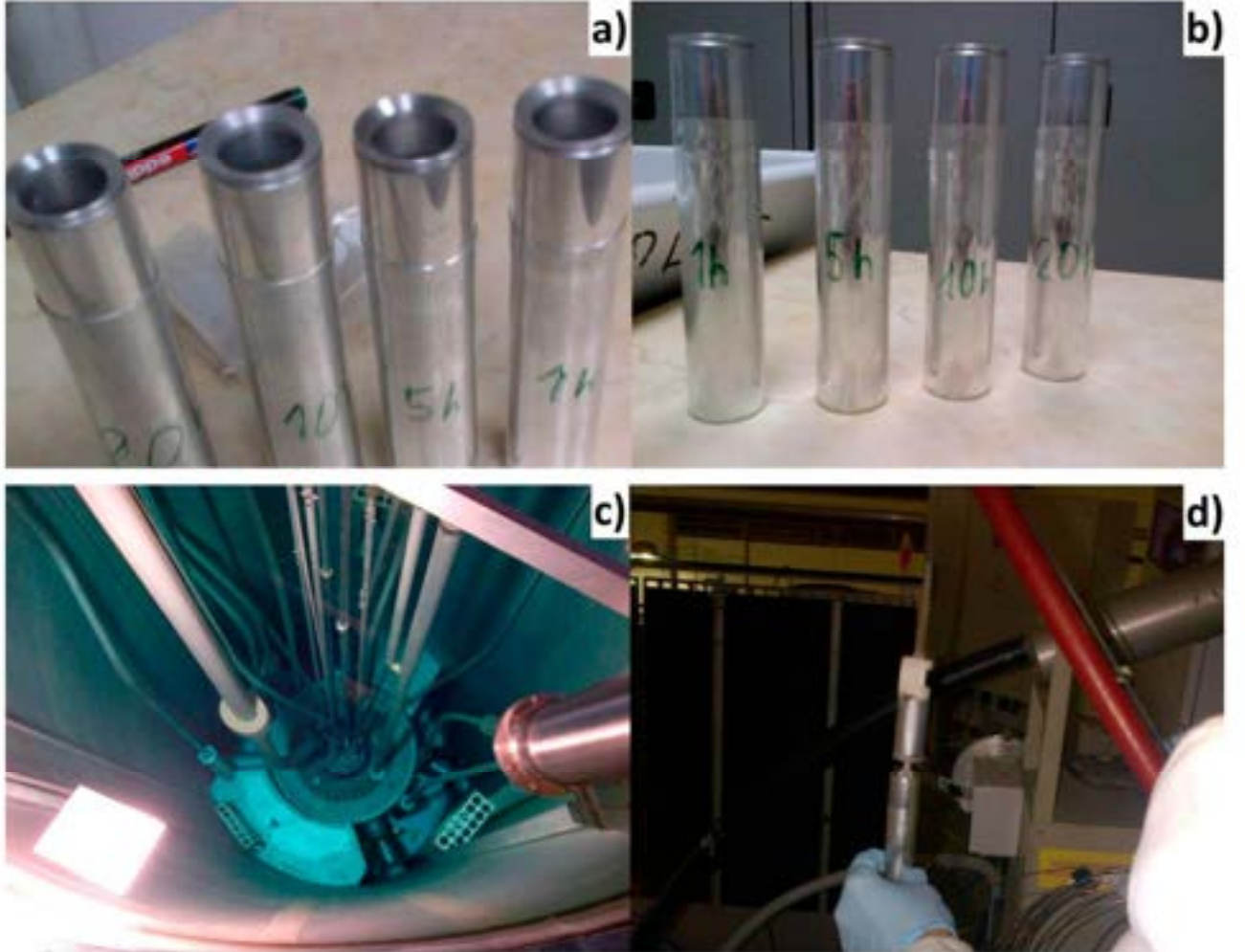
2.2 Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin neytron seli

ilə şüalandırılma və aktivlik analizləri metodiası

Təcrübələr zamanı istifadə olunan nümunələr məqsəddə asılı olaraq toz və tabletka halında Jozef Stefan İnstitutunun “Reaktor Mərkəzində” TRIGA Mark II yüngül su (light water pool type reactor) tipli tədqiqat nüvə reaktorunda mərkəzi (kanal A1) kanalda 2×10^{13} n/sm²san sel sıxlığına malik neytron seli ilə tam güc rejmində (250kVt) şüalandırılmışdır (Şəkil 2.2.1). Mərkəzi kanalda tam güc rejmində mövcud neytron selinin parametrləri termal neytronlar üçün 5.107×10^{12} n/sm²san (1 ± 0.0008 , $E_n < 625\text{eV}$), epitermal neytronlar üçün 6.502×10^{12} n/sm²san (1 ± 0.0008 , $E_n \sim 625\text{eV} \div 0.1\text{MeV}$), sürətli neytronlar üçün 7.585×10^{12} n/sm²san (1 ± 0.0007 , $E_n > 0.1\text{MeV}$) və nəhayət bütün neytronlar üçün mərkəzi kanalda sel sıxlığı 1.920×10^{13} n/sm²san (1 ± 0.0005) kimidir [20, s.141; 88, s.236; 94, s.27; 108, s.141; 155, s.129; 169, s.156; 193, s.484; 319, s.408; 320, s.34, 334, s.57]. Qeyd edək ki, neytron selinin sıxlığı və enerjisi mütəmadi olaraq ölçülür və nəzarətdə saxlanılır. Neytron selinin sıxlığı, parametrləri və onların ölçülmə metodları dövrü nəşirlərdə vaxtaşırı dərc edilir [20, s.141; 22, s.24; 88, s.237; 94, s.28; 108, s.141; 155, s.128; 169, s.156; 193, s.484; 319, s.408; 320, s.34; 333, s.139; 375, s.95; 376, s.79].

Nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri məqsəddən asılı olaraq tabletka və toz halında xüsusi formada hazırlanaraq reaktorun kanalına uyğun yüksək təmizliyə malik alüminium silindərlə yerləşdirilir. Sonra alüminium silindir reaktorun mərkəzi kanalına yerləşdirilmişdir, hansı ki bu kalanda neytron selinin sıxlığı 2×10^{13} n/sm²san kimidir. Təhlükəsizlik məqsədilə şüalandırma ilkin mərhələdə 5 dəqiqə aparılmışdır və nümunənin aktivlik dərəcəsi, şüalanmaya həssaslığı və digər lazimi parametrləri

analiz edilmişdir. Analizlər nəticəsində məlum olmuşdur ki, sözügedən nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin 20 saata qədər şüalandırılmasında ciddi təhlükə mövcud deyil və nümunələr 1, 5, 10 və 20 saata qədər kəsilməz olaraq neytron seli ilə şüalandırılmışdır.



Şəkil 2.2.1 3C-SiC nanokristallarının JSI TRIGA Mark II reaktorunun kanallarına uyğun nümunələr (a və b) və neytron seli ilə şüalandırma məqsədilə reaktora yerləşdirilmə (c və d) proseslərinin təsviri

Neytron seli ilə şüalandırma təhlükəsizlik məqsədilə avtomatik ötürmə sisteminin köməyi ilə aparılmışdır. Məlumdur ki, neytron seli ilə modifikasiya olunan zaman nümunənin tipindən asılı olaraq müəyyən aktivliyə malik olur və onun yaxınlığında işləmək və ya şüalanmış nümunə ilə dərhal sonra təmasda olmaq sağlamlıq üçün təhlükəlidir. Nümunə ilə, şüalanmadan dərhal sonra təmasda

olmamaq məqsədilə avtomatik şüalandırma robotlarından istifadə olunur. Belə ki, şüalandırılacaq nümunə avtomatik ötürmə robotunun yuvasına yerləşdirilir və uzaqdan idarə edilərək reaktor kanalına endirilir. Şüalanma müddəti tamamlandıqdan sonra nümunələr sözügedən robotun köməkliliyi ilə, reaktorun kanalından uzaqlaşdırılır və aktivliyi daima nəzarətdə saxlanılır. 3C-SiC nanokristalları şüalanmadan sonra xüsusi plastik qablarda yerləşdirilmişdir (Şəkil 2.2.2). Aktivlik yalnız yol verilən həddən aşağı olduqdan sonra onlara yaxınlaşmaq olar və onları isti sahədən (hot area) harasa daşımaq olar, bir şərtlə ki, isti ərazini tərk etməyəsən. Ümumiyyətlə nümunə üzərində hər hansı digər təcrübənin aparılması məqsədilə onun isti ərazidən çıxarılması üçün aktivliyinin yol verilən həddən aşağı omasından əmin olunmalıdır. Bütün bu tip ölçmələr və spektroskopik analizlər isti ərazi daxilində aparılır və aktivlik azaldıqdan sonra nümunələrin digər təcrübələrin aparılması üçün başqa laboratoriyalara daşınmasına icazə verilir.



Şəkil 2.2.2 3C-SiC nanokristallarının şüalanmadan sonra plastik qablarda fototəsviri.

$3C\text{-SiC}$ nanokristallarının JSİ TRİGA Mark II reaktorunda şüalanması nəticəsində aktivliyi təqribən 3GBq - ə qədər artmışdır. Bu işə nümunələrin bir neçə gün isti ərazidə saxlanması və müvafiq analizlərin aparılmasına zərurət yaradır. Ümumiyyətlə, bu aktivliyi yaradan əsas səbəb şüalandırılan nümunə daxilində olan əlavə qatışıq elementləridir. Belə ki, məlumdur ki, müasir zamanda ideal təmiz materialın alınması mümkün deyil. Bu məqsədlə dissertasiyada $3C\text{-SiC}$ nanokristallarının k_0 əsaslı instrumental neytron aktivləşmə analizləri (k_0 -based Instrumental Neutron Activation Analysis – k_0 -INAA) aparılmışdır. Qeyd edək ki, k_0 -INAA metodu ilə analizlər zamanı həssaslıq dərəcəsi 10^{-2} pikoqram (təqribən 10^{-12} - $10^{-15}\%$) tərtibindədir.

Qeyd edək ki, toz halında nano SiC – in sıxlığı $\rho_{\text{toz}} = 0,03 \text{ q/sm}^3$ (qabda sıxlığı təqribən $\sim 0,1 \text{ q/sm}^3$), kütləsi təqribən $\sim 1,28 \text{ q}$ olan nümunə xüsusi presformada sıxılaraq xüsusi formaya salınıb və onun parametrləri belədir: $\rho_{\text{tablet}} = \sim 3.2 \text{ q/sm}^3$, $V_{\text{tablet}} \sim 0,4 \text{ sm}^3$, $S_{\text{tablet}} \sim 4.5 \text{ sm}^2$. Nümunələr neytron selinin $2 \times 10^{13} \text{ n/sm}^2$ san intensivliyində şüalandırılıb. Tədqiq olunan nümunələrin udulma dozasının qiymətləri toz və tablet şəklində olan nümunələrin həndəsi ölçüləri, şüalanmanın intensivliyi, şüalanma vaxtları, təsir edən neytron selinin sıxlığı və neytronların energetik spektrlərinə əsasən təyin edilmişdir. Tablet halında olan nümunələrə düşən neytron selinin qiyməti $1,3338 \times 10^{17} \div 2,6676 \times 10^{18}$ neytron/tabletka intervalında dəyişir.

k_0 -INAA metodu ilə nanomaterialın aktivliyi öyrənilərkən 0.051 q $3C\text{-SiC}$ nanokristalları yüksək təmizliyə malik polietilen silindərə yerləşdirilmişdir (SPRONK system, Lexmond, The Netherlands). k_0 -INAA təcrübələri aşağı yaşama müddətinə malik və yuxarı yaşama müddətinə malik radioizotoplar üçün ayrı ayrılıqda, iki halda aparılmışdır. Aşağı yaşama müddətinə malik radioizotoplar üçün polietilen silindərə yerləşdirilmiş $3C\text{-SiC}$ nanokristalları standart Al-0.1%Au (IRMM-530R) ilə birlikdə JSİ TRİGA Mark II reaktorunun karusel qurğuda (karusel qurğu (carousel facility – CF) reaktorun termal kanalına bərkidilmiş və pneqmatik sistemlə avtomatik rejimdə idarə olunaraq neytron seli ilə şüalanmış nümunəni bir anda dedektora göndərən sistemdir) 5 dəqiqə termal neutronlarla ($1.1 \times 10^{12} \text{ n/sm}^2 \text{ san}$)

şüalandırılmışdır. Nisbətən yuxarı yaşama müddətinə malik radionuklidləri təyin etmək üçün isə polietilen silindərə yerləşdirilmiş 3C-SiC nanokristalları standart Al-0.1%Au ilə birlikdə CF – da 12 saata qədər şüalandırılmışdır.

Aşağı yaşama müddətinə malik radioizotopları qeyd edilmək üçün, 5 dəqiqə şüalanmış nümunələr spektroskopik analizləri tam sazlanmış HPGe dedektorunda aparılmışdır. Spektroskopik analizlər soyuma müddətinin (cooling time) 6dəq, 25dəq və 180dəq kimi aralıqlarında mütəmadi olaraq aparılmışdır. Nisbətən yuxarı yaşama müddətinə malik radioizotopları müəyyənləşdirmək üçün isə analoji spektroskopik ölçmələr 12 saat neytron seli ilə şüalandırılmış nümunələr üzərində müvafiq olaraq 2, 7 və 28 gün soyuma vaxtı ilə aparılmışdır. Radionuklidin təbiətini müəyyən etmək üçün istifadə olunan pik sahəsinin analizlərində HyperLab 2002 proqramından istifadə edilmişdir. Element konsentrasiyasını hesablamaq üçün $f = 27.11$ (termal epitermal neytron seli nisbəti) və $\alpha = -0.0042$ (ideal 1/E paylanması mövcud epitermal neytron selinə nisbəti) qiymətlərindən istifadə edilmişdir. Eyni zamanda element konsentrasiyasını hesablamaq üçün Windows əməliyyat sistemində Kayzero proqram paketi tətbiq edilmişdir. Ümumiyyətlə, neytronla qarşılıqlı təsirdən sonra nano SiC – in tərkibində yaranan radionuklidlər “Ortec HPGe detectors (Coaxial, Low and Well-Type)” və “Canberra coaxial HPGe detector” spektrometrlərində analiz olunub. Şüalanmış nümunələrin radioaktivliyi, izotop tərkibi və qarışıq elementlərinin miqdarları [37, s.16; 103, s.704; 204, c.1, s.5; 305, c.4, s.53] metodikası üzrə təyin edilib.

2.3 3C-SiC nanokristallarının struktur və nanoskopik tədqiqi üsulları

Nanomaterialların strukturunu və quruluşunu öyrənmək üçün son zamanlar ən geniş istifadə olunan metod HRTEM, TEM, FESEM və ya SEM analizləridir. HRTEM və TEM cihazlarında anksrem tərtiblərə qədər böyütmələr mümkündür ki, bu da kristalda mövcud atomların aşkar müşahidə olunması və düzülüşü haqqında daha müfəssəl məlumat verməyə imkan verir. Eyni zamanda, nanomaterial üzərində radiasiya effektlərini nanomiqyaslarda müşahidə etmək üçün HRTEM, TEM,

FESEM və ya SEM qurğularından istifadə etmək məqsədyönlüdür. Belə ki, HRTEM, TEM, FESEM və ya SEM qurğularının köməyi ilə, ionlaşdırıcı şüalanma nəticəsində nanohissəcik daxilində və ya səthində yaranan yeni defekt və ya kalasterlər vizuallaşdırıla bilər.

Ümumi yanaşmada TEM qurğusunda materialın səthinin analizi elektron selinin nümunə səthindən səpilməsi və difraksiyasına əsaslanır. Ümumi yanaşmada TEM qurğusu elektronun dalğa xüsusiyyətinə əsasən obyektə qeyd edir. Beləliklə, TEM daxilində səpilən və ya difraksiya olunan şüallar dedektor ekranda qeyd edir. Lakin bu halda, nəzərə almaq lazımdır ki, dalğa kristal daxilindən keçərkən müəyyən sürüşmələr meydana gələ bilər. Birbaşa şüanın amplitudasını ϕ_0 və növbəti difraksiya olunmuş şüa üçün uyğun olaraq ϕ_{z_1} , ϕ_{z_2} və s. kimi qəbul etsək və nəzərə alsaq ki hər şüa faza ilə mütənasibdir, o zaman ümumi dalğa funksiyasını aşağıdakı kimi yaza bilərik

$$\psi^T = \phi_0 e^{2i\pi x_0 r} + \phi_{z_1} e^{2i\pi x_{z_1} r} + \phi_{z_2} e^{2i\pi x_{z_2} r} + \dots \quad (2.1)$$

burada, x_0 və x_{z_i} dalğa vektorunu xarakterizə edir və adətən sadəcə olaraq x kimi yazılır. Bu tənlikdə x_0 yazılaraq vektorun 0 nöqtəsindən başlanması, x_{z_i} yazılması isə G_1 nöqtəsindən başlanması və s. kimi başa düşülür. Qeyd edək ki, burada x_0 və x_{z_i} dalğa vektorları vakuumba kristal daxili ilə müqayisədə daha çox olur. Beləliklə əgər prosesə kristal daxilində baxılırsa, o zaman dalğa vektorlarının qiymətində çox kiçik dəyişiklik etmək lazımdır. Adətən bu fərq çox kiçik olduğu üçün nəzərə alınmır və bəzi xüsusi hallarda nəzərə alınarkən dalğa vektoru sadəcə olaraq x kimi yazılır. Sadəlik üçün adətən nəzərə alınır ki, kristal daxilində yalnız iki dalğa mövcuddur: biri ilkin dalğa və digəri difraksiya olunan dalğa. Difraksiya olunan dalğa deyərəkən biz burada yalnız ən güclü dalğanı nəzərə tuturuq, digər zəif dalğaları ϕ_{z_i} - ni xarakterizə edərkən nəzərə almırıq. Beləliklə, ϕ_{z_1} və ϕ_{z_2} - nin dz qalınlığında kiçik dəyişmələrini nəzərə alaraq aşağıdakı bərabərliyi yaza bilərik [64, c.2, s.225]:

$$d\phi_z = \left\{ \frac{\pi i}{\xi_z} \phi_0 e^{2\pi i(z_0 - z_0)r} + \frac{\pi i}{\xi_0} \phi_z \right\} dz \quad (2.2)$$

$$d\phi_0 = \left\{ \frac{\pi i}{\xi_0} \phi_0 + \frac{\pi i}{\xi_z} \phi_z e^{2\pi i(z_0 - z_0)r} \right\} dz \quad (2.3)$$

burada, $z_0 - z_0$ ϕ_0 şüası daxilində səpilməmiş ϕ_z şüasına əsasən vektorial dəyişmə və buna uyğun olaraq $z_0 - z_0$ ϕ_z şüası daxilində səpilməmiş ϕ_0 şüasına əsasən vektorial dəyişməni xarakterizə edir. ξ_0 dalğanın özü istiqamətində səpilməsini və ξ_z dalğanın g difraksiya vektoruna uyğun bucaq altında səpilməsini xarakterizə edən kəmiyyətdir. Əgər dinamik difraksiya halından danışırıqsa, ilkin və səpilən dalğaların amplitudası sabit miqdarlarla dəyişir və hər iki dalğa dinamik olur [53, c.2, s.16-21; 62, c.1, s.78; 64, c.2, s.225; s.242]. Bu halda, aşağıdakı bərabərliyi yaza bilərik [64, c.2, s.225]:

$$\frac{d\phi_z}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_z} \phi_0 e^{-2\pi i s z} + \frac{\pi i}{\xi_0} \phi_z \quad (2.4)$$

$$\frac{d\phi_0}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_0} \phi_0 + \frac{\pi i}{\xi_z} \phi_z e^{2\pi i s z} \quad (2.5)$$

burada, s və z sadəcə olaraq dalğanın geometrik parametrləridir. Bir çox ədəbiyyatlarda son iki münasibət Hovi-Velan tənliyi kimi tanınır, hansı ki, TEM qurğusunda difraksiya təməli Hovi və Velan tərəfindən qoyulmuşdur [64, c.2, s.225]. Nadir hallarda bu tənliklər Darwin-Hovi-Velan bərabərliyi adlandırılır, hansı ki, Hovi və Velandan öncə Darwin ilk dəfə rentgen şüaları haqqında dinamik nəzəriyyəni vermişdir. Hovi-Velan tənliyində aşağıdakı kimi kiçik dəyişmələr aparsaq,

$$\phi_{o(mb)} = \phi_o e^{\frac{-\pi z}{\zeta_o}} \quad (2.6)$$

$$\phi_{z(mb)} = \phi_z e^{2\pi i z - \frac{\pi z}{\zeta_z}} \quad (2.7)$$

buradan, Hovi-Velan tənliyləri üçün alırıq:

$$\frac{d\phi_{z(mb)}}{dz} = \frac{\pi i}{\zeta_z} \phi_{o(mb)} + 2\pi i s \phi_{z(mb)} \quad (2.8)$$

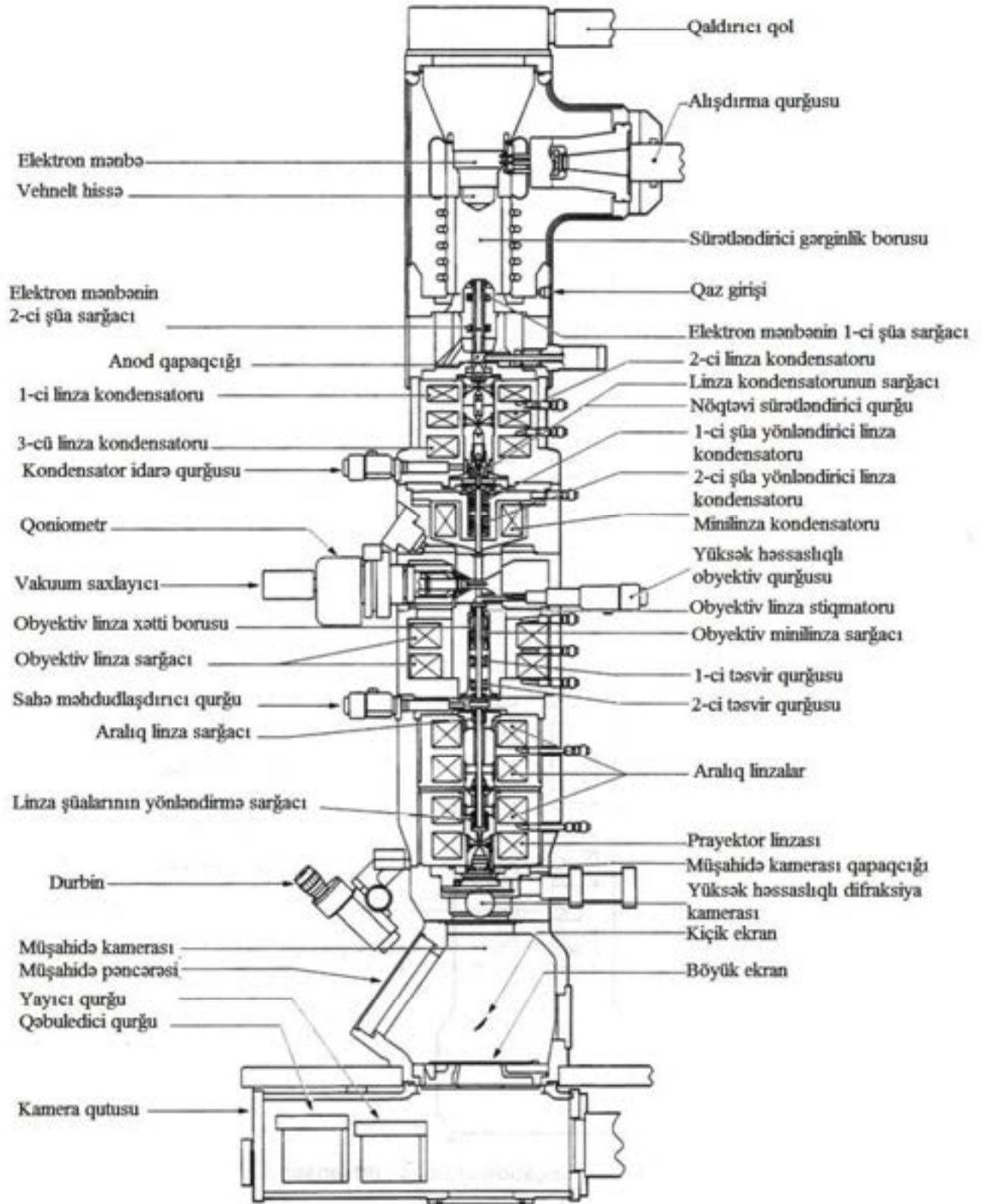
$$\frac{d\phi_{o(mb)}}{dz} = \frac{\pi i}{\zeta_z} \phi_{z(mb)} \quad (2.9)$$

Qeyd edək ki, bu halda ϕ_o və $\phi_{o(mb)}$ (eyni zamanda ϕ_z və $\phi_{z(mb)}$) yalnız faza faktoru ilə bir – birindən fərqlənirlər. ϕ_o üçün son iki tənliyin kombinasiyasından aşağıdakı diferensial tənliyi alırıq [64, c.2, s.225]:

$$\frac{d^2\phi_o}{dz^2} - 2\pi i s \frac{d\phi_o}{dz} + \frac{\pi^2}{\zeta_z^2} \phi_o = 0 \quad (2.10)$$

Anoloji yanaşma ilə ϕ_z üçün də diferensial tənlik almaq olar [53, c.2, s.42-47; 62, c.1, s.80; 64, c.2, s.226; 242, c.1, s.137].

İlkin və şüalanmadan sonra nümunələrin TEM, SAED və EDP analizləri “TEM, Jeol JEM-2010F” cihazında effektiv gərginliyin 200 kV qiymətində aparılmışdır (Şəkil 2.3.1). TEM qurğusunda analizlər nümunə mis-karbon ilə üzünib vakuüm quruducusunda quruduklduqdan sonra yüksək vakuümə aparılmışdır. Həmçinin nümunələrin ilkin və neytron selinin təsirinə məruz qaldıqdan sonra sahə emmissiyalı SEM şəkilləri “FE-SEM, Jeol JSM-7600” cihazında effektiv gərginliyin 7 – 10 kV və iş məsafəsinin 8mm (working distance - WD) qiymətində çəkilmişdir.



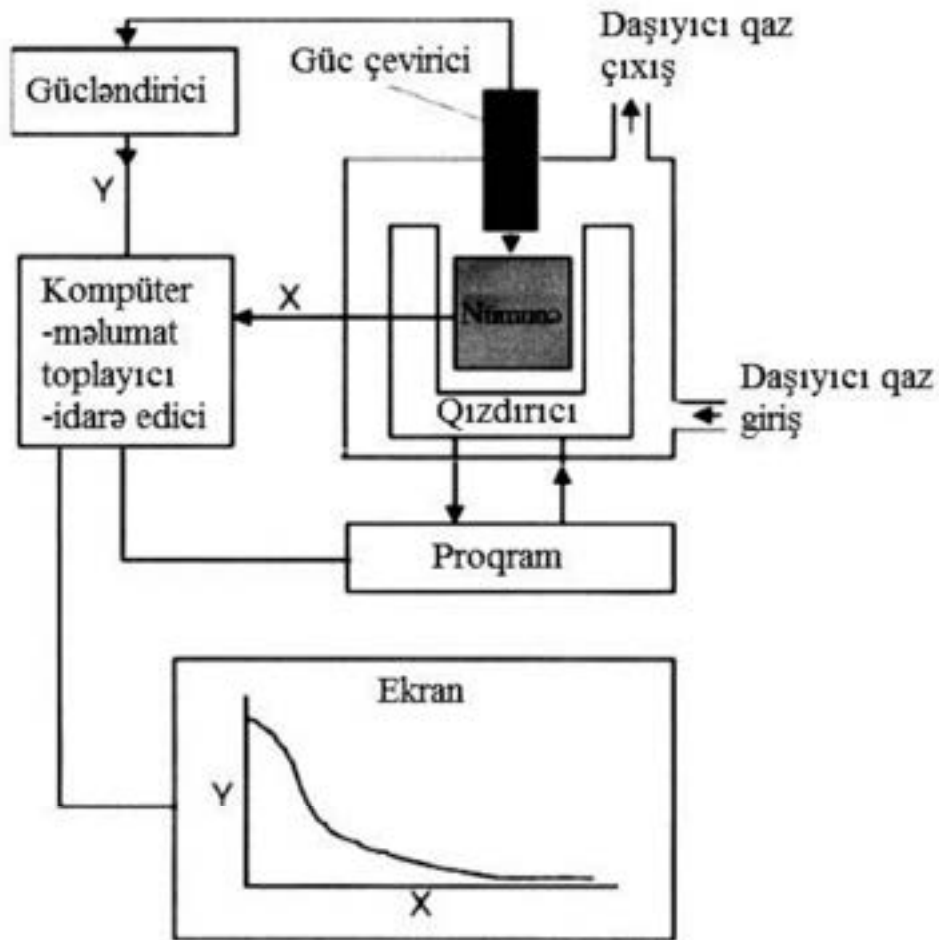
Şəkil 2.3.1 TEM qurğusunun en kəsiyinin sxematik təsviri.

SEM analizləri birbaşa nümunə üzərində üzlənmə olmadan və ətraf mühitin təsirini minimuma endirmək məqsədilə vakuumda aparılmışdır. Digər tərəfdən, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin strukturu “Rigaku MiniFlex 600, Benchtop X-ray Diffractometer” cihazında öyrənilmişdir. Rentegenstruktur analizləri toz halında olan nümunələrin qurğunun yuvasına yerləşdirilməklə aparılmışdır. Cihazın qeyd etdiyi səpilmə bucağına əsasən təcrübələr aparılan nümunənin strukturu haqqında informasiya əldə edilmişdir. Sadalanan analizlərdən təstiq olunmuşdur ki, təcrübədə istifadə olunan nanomaterial $120 \text{ m}^2/\text{q}$ xüsusi səth sahəsinə, 18 nm ölçülü hissəciklərə və $0.03 \text{ q}/\text{sm}^3$ (həqiqi sıxlıq $3.216 \text{ q}/\text{sm}^3$) sıxlığa malik kubik modifikasiyalı silisium karbid nanohissəcikləridir (US Research Nanomaterials, Inc., TX, USA).

2.4 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin termal parametrlərinin ölçmə üsulları

Müasir zamanda materialların termal parametrlərini ölçmək üçün bir neçə metodika işlənib hazırlanmışdır və onların hər birinin üstün və çatışmayan cəhətləri mövcuddur [77, c.1, s.3; 113, c.2, s.11; 50, s.494; 212, c.6, s.83; 239, c.14, s.85; 342, c.2, s.37]. Aparılan təcrübənin məqsədindən asılı olaraq fərqli yanaşmalarla nümunənin termal parametrlərini öyrənmək olar. Təqdim olunan dissertasiyada məqsədə uyğun olaraq, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin termik parametrləri “Perkin Elmer” STA 6000 cihazında tədqiq edilmişdir. “Perkin Elmer” STA 6000 cihazında işçi oblast $16-1000 \text{ }^\circ\text{C}$, termik işləmə sürəti $5^\circ\text{C}/\text{dəq}$, $10^\circ\text{C}/\text{dəq}$, $15^\circ\text{C}/\text{dəq}$ və $20^\circ\text{C}/\text{dəq}$, PolyScience analizatoru və “digital temperature controller” soyuducu sistemidir. “Pyris Manager” proqram təminatından istifadə olunaraq kinetik parametrlər təyin olunmuşdur. “Perkin Elmer” STA 6000 cihazı eyni zamanda həm kütlə dəyişməsinə, həm də, sistemdə baş verən istilik mübadiləsinə ölçməyə imkan verir. Cihazın bu xüsusiyyətinin köməyi ilə asanlıqla eyni zamanda nümunənin DSC, DTA, TGA və TG kimi parametrlərini öyrənmək mümkündür. Cihaz müasir temperastur sensoru və kütlə qeydedicisi ilə təchiz olunmuşdur və bu təcrübələrdə nəticələrin mükəmməl olmasına imkan yaratmışdır. Cihaz “SaTurnA” sensor texnologiyası ilə təchiz olunmuşdur ki, bu da təcrübə müddətinin azalmasına və eyni

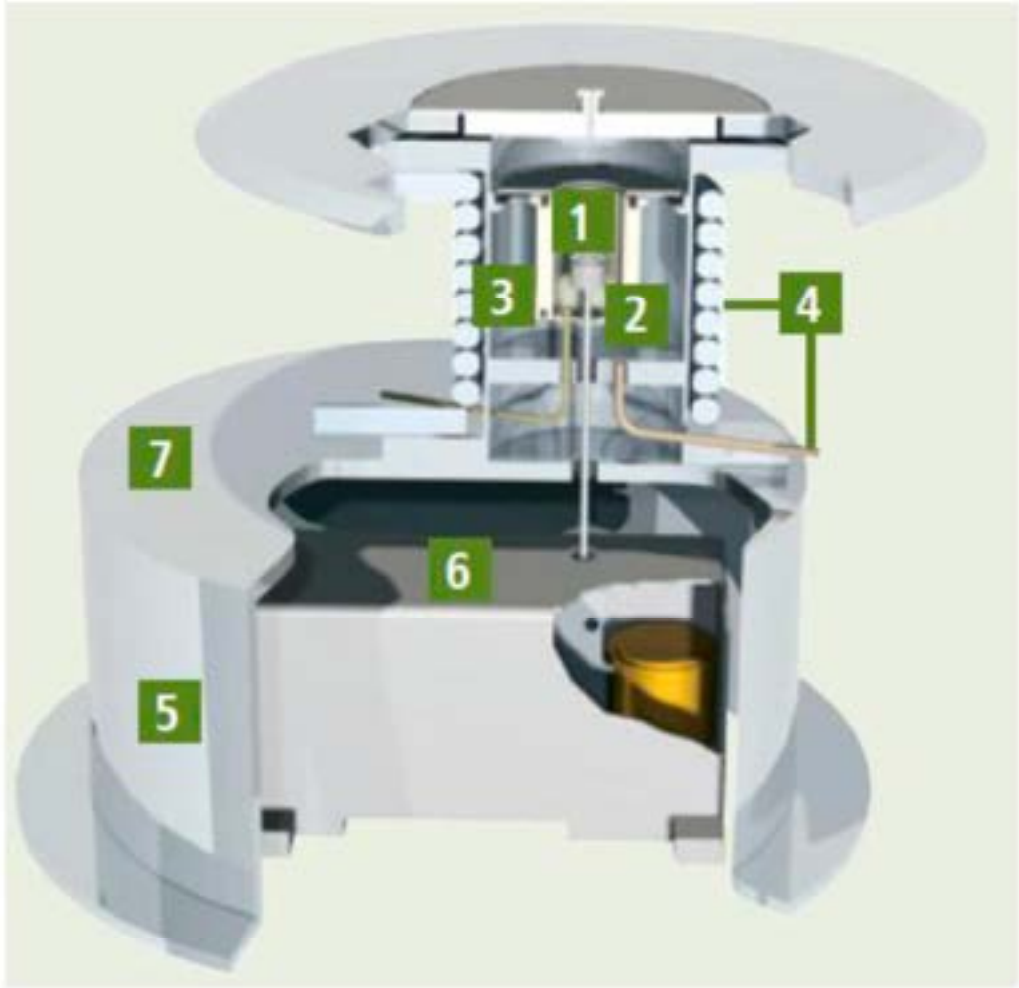
zamanda həssaslığın artmasına xidmət edir. Bu sensor texnologiyası birbaşa nümunə yerləşdirilən yuvanın aşağı tərəfində yerləşir və yüksək dəqiqliklə DTA nəticələrinin əldə olunmasına imkan yaradır. Təcrübələr zamanı qızma nəticəsində sistemdə yaranan əlavə qaz qatışıqlarını cihazdan uzaqlaşdırmaq məqsədilə fərqli təsirsiz qazlardan istifadə oluna bilər. Mövcud təcrübələrdə, yanma məhsullarının sistemdən xaric edilməsi və kondensasiya prosesinin qarşısının alınması məqsədi ilə arqon təsirsiz qazından istifadə edilmiş və sistemə 20 ml/dəq sürət ilə verilir. Sistemə verilən qaz həm də qızma prosesində oksidləşmənin qarşısını bir qədər alır. Ümumi yanaşmada termal parametrlərin ölçülməsi üçün istifadə olunan qurğunun sxematik təsviri **şəkil 2.4.1**-də verilmişdir.



Şəkil 2.4.1 Termal parametrlərin ölçülməsi məqsədilə istifadə olunan qurğunun sxematik təsviri.

Şəkildən göründüyün kimi, sistemə verilən təsirsiz qaz bütün nümunəni əhatə edir və nümunənin termal parametrləri xüsusi proqramların köməyi ilə birbaşa

kompyuterdə qeyd edilir. Xüsusi halda isə, “Perkin Elmer” STA 6000 cihazının sxematik təsviri **şəkil 2.4.2** – də verilmişdir.



Şəkil 2.4.2 Perkin Elmer STA 6000 cihazının iç quruluşunun sxematik təsviri

Şəkilə 1 – nümunə yerləşdirilən yuvadır və temperatur idarəsi və digər ölçmələr bu hissədə aparılır. 2 – SaTurnA sensor texnologiyasıdır, hansı ki, bu sensorla birbaşa nümunənin temperaturu və digər termal parametrlərinin ölçüləməsinə nəzarət edilir. Vertikal halda nümunə asanlıqla sistemə yerləşdirilə bilər və həmin andan etibarən eyni zamanda vertikal yerləşdirilmiş bu sensorla nümunənin vəziyyəti nəzarətdə saxlana bilər. Bəzi növ STA 6000 cihazlarında eyni anda 45 – dən çox nümunə ölçməyə imkan vardır. 3 – möhkəm alüminium soba korroziya qarşısıdır və digər kənar effektləri sistemdən uzaqlaşdırmaq məqsədilə yerləşdirilmişdir. Eyni zamanda cihazın bu hissəsi yüksək izotermallığa malikdir və mükəmməl temperatur

dəyişmələrini təmin edir. 4 – təcrübələr müddətində cihazın temperatur balansını saxlamaq məqsədilə soyuducu sistemlə əlaqələndiricidir. Eyni zamanda bu sisteminin köməyi ilə nümunənin temperaturu tez bir zamanda aşağı salına bilər. 5 – paslanmayan polad divarlardır, hansı ki, ümumi sistemi termal izolyasiya etmişdir və sistem daxili ilə xarici mühitin istilik mübadiləsinin qarşısını alır. 6 – təcrübələr aparılan mühitin bircinsliyini təmin etmək məqsədilə sistemə verilən və sistemdən kənarlaşdırılan qaz axınına nəzarət edən yuvadır. Eyni zamanda qızma prosesində nümunə üzərində yaranabiləcək əlavə qaz halında maddələrin sistemdən uzaqlaşdırılmasını təmin edir. 7 – təcrübələr zamanı sistemə ötürülən təsirsiz qaz mühitinin sistemdə saxlanmasını və hərəkətini təmin edir. Hansı ki, bu qaz sistemdə mövcud qatışıqların qovulmasına və qızma nəticəsində yaranacaq yeni qaz qatışığının konsentrasiyasını idarə etməyə imkan verir.

Qeyd edək ki, real halda nümunə temperaturunu tam olaraq xətti idarə etmək demək olar ki mümkün deyil. Belə olan halda, temperatur fluktuasiyaları nəzərə alınaraq aşağıdakı bərabərliyi yazmaq olar [113, c.2, s.26]:

$$T = T_0 + \beta t + B \sin \omega t \quad (2.11)$$

burada, T – nümunənin faktiki temperaturu, T_0 – təcrübələr başlayarkən nümunənin ilkin temperaturu, β – temperaturun dəyişmə sürəti, B – modullaşma amplitudası, ω – modullaşmanın bucaq tezliyidir. Bu bərabərliyi zamana əsasən diferensiallasaq, alarıq:

$$\frac{dT}{dt} = \beta + \omega B \cos \omega t \quad (2.12)$$

Xüsusi istilik tutumu (C_p) üçün $C_p = Q / \Delta T$ olduğunu nəzərə alsaq, son bərabərliyə uyğun olaraq, vahid zamanda istilik miqdarı (Q) dəyişməsi üçün alarıq [77, c.1, s.54; 113, c.2, s.26; 150, c.10, 141; 212, c.6, s.3; 239, c.14, s.88; 342 c.2, s.4]:

$$\frac{dQ}{dt} = C_p (\beta + \omega B \cos \omega t) \quad (2.13)$$

Xüsusi halda, əgər sistemin temperatur dəyişməsi olmasa, başqa sözlə $\beta=0$ olarsa, aşağıdakı bərabərliyi alarıq:

$$\frac{dQ}{dt} = C_p \omega B \cos \omega t \quad (2.14)$$

Mümkün ən sadə halda, istilik axınının amplitudası son bərabərliyə uyğun olaraq aşağıdakı kimi yazıla bilər [113, c.2, s.33]:

$$A_{ist} \cos \omega t = C_p \omega B \cos \omega t \quad (2.15)$$

burada A_{ist} istilik axını modulasiyasının amplitudasıdır. Əgər nəzərə alsaq ki, ωB qızma dərəcəsi modulunun amplitudasıdır, o zaman xüsusi istilik tutumu üçün aşağıdakı bərabərliyi yazıla bilər:

$$C_p = \frac{A_{ist}}{A_{qz}} \quad (2.16)$$

burada, A_{qz} qızma dərəcəsi modulunun amplitudasıdır. Əgər təcrübələr aparılarkən, qızma prosesində digər kimyəvi qatışıqlar iştirak etmirsə, bu zaman reaksiya sürəti yalnız temperaturla mütənasib olacaqdır [77, c.1, s.56; 113, c.2, s.54; 150, c.10, s.141; 212, c.6, s.4; 239, c.14, s.89; 342 c.2, s.7]. Bu zaman kimyəvi qarşılıqlı təsir nəticəsində meydana gələn istilik temperaturun funksiyası $h(T)$ kimi xarakterizə oluna bilər. Bu halda vahid zamanda sistemdə daşınan istilik miqdarı aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$\frac{dQ}{dt} = C_p(\beta + \omega B \cos \omega t) - h(T_0 + \beta t + b \sin \omega t) \quad (2.17)$$

Tam olaraq xətti halda oalrsa, $h(T)=h_1+h_2T$ alarıq:

$$\frac{dQ}{dt} = (C_p\beta - h_1 - h_2T_0 - h_2\beta t) + B(C_p\omega \cos \omega t - h_2 \sin \omega t) \quad (2.18)$$

Ümumi halda sıra şəklində son bərabərliyi aşağıdakı kimi yazı bilərik [113, c.2, s.34]:

$$\begin{aligned} \frac{dQ}{dt} &= (C_p\beta - h[T_0 + \beta t]) + B(C_p\omega \cos \omega t - h'[T_0 + \beta t]\sin \omega t) \\ &- \frac{1}{2}B^2 h''[T_0 + \beta t]\sin^2 \omega t + \dots \end{aligned} \quad (2.19)$$

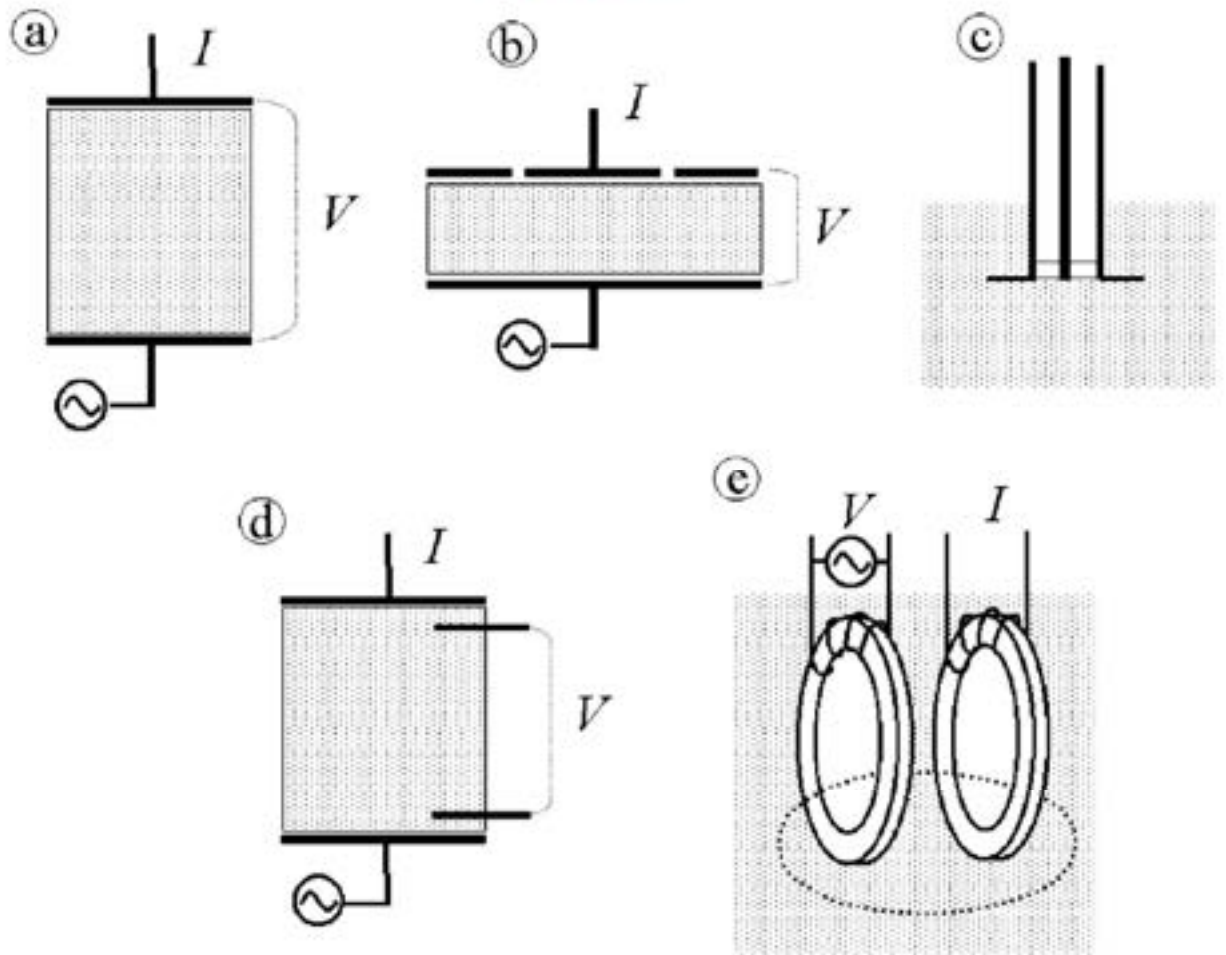
Burada nəzərə alsaq ki, B^2 , B^3 və s. B ilə müqayisədə çox-çox kiçikdir, o zaman prosesi ümumilikdə xətti qəbul etmək olar. Belə olan halda, istilik miqdarı dəyişməsinə (dQ/dt) xətti olaraq nəzərə almaq olar ki, bu da təcrübələrin aparılmasında nisbətən sadəliklə nəticələnir.

Təqdim olunan dissertasiyada aparılan təcrübələrdə, standart 177,78 mg alminium–oksid əsaslı pəndən istifadə olunmuşdur. Termocüt üzərində yerləşdirilmiş elektron qeydedici vasitəsi ilə nümunənin kütləsi 10^{-3} mq dəqiqliyi ilə təyin olunur və avtomatik rejimdə qeyd olunur. Proqram təminatı avtomatlaşdırılmış qaydada nümunə ilə dolu pənin kütləsi ilə boş pənin kütlə fərqin təyin edir. Təyin olunmuş kütlə proqram təminatında yaddaşda saxlanılır. Termik spektrlərdə yaranan endo və ekzotermik effektlərin parametrləri “Calculation” menyusundan istifadə olunmaqla hesablanılır. Təcrübələrdə alınmış və sonradan hesablanmış qiymətlərə uyğun alınan bütün nəticələr “OriginPro 9.1 pro” proqramında qrafik olaraq təsvir edilmişdir.

2.5 3C-SiC nanokristallarının elektrik və dielektrik xassələrinin

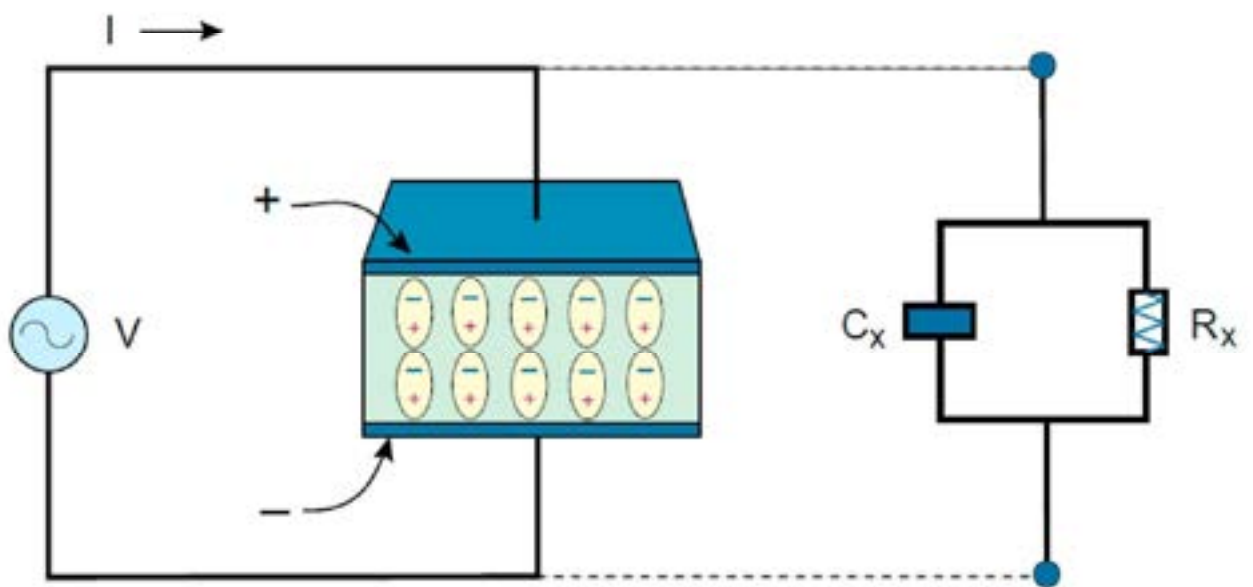
öyrənilmə metodikaları

Materialların elektrik və dielektrik xüsusiyyətlərini öyrənmək üçün günümüzə qədər bir neçə metod işlənib hazırlanmışdır. Hal – hazırda geniş tezlik aralığında dielektrik spektroskopiyasının aparılması üçün universal metod yoxdur. Bu baxımdan hər bir aralıq üçün müəyyən metodlar mövcuddur və hər birinin öz üstünlükləri vardır [168, s.1618]. Təcrübə aparılan nümunə və tezlik aralığından asılı olaraq iki elektrod, üç – termal, koaksial, dörd elektrod və elektromaqnitik kimi müxtəlif metodları göstərmək olar (Şəkil 2.5.1).



Şəkil 2.8 Müxtəlif dielektrik spektroskopiya metodları. a) iki elektrod metodu, b) üç – termal metod, c) koaksial üsul, d) dörd elektrod üsulu və e) elektromaqnitik metod.

Təqdim olunan dissertasiya işində təcrübələr əsasən tezliyin 0.1Hz – 2.5MHz intervalında aparıldığı üçün, məhz bu intervalda mövcud metodikadan istifadə edilmişdir. Belə ki, adətən tezliyin 10MHz-dən kiçik qiymətlərində paralel kantakt və ya iki elektrod metodundan geniş istifadə olunur (Şəkil 2.5.1a). Belə ki, bu halda təcrübə xətası minimum olmaqla yanaşı, həm də metodun istifadəsi digərləri ilə müqayisədə daha münasibdir [168, s.1618]. Təqdim olunan dissertasiyada istifadə olunan iki elektrod methodu bərk materialların dielektrik xüsusiyyətlərini öyrənmək üçün müəmməldir. Sadə yanaşmada nümunənin elektrik və dielektrik parametrlərini ölçmək üçün qurğunun sxematik təsviri şəkil 2.5.2-də verilmişdir. Səkində mövcud nümunənin tutumu (C_x) və müqaviməti (R_x) impedans analizdərin köməyi ilə təcrübi olaraq ölçülə bilər.



Şəkil 2.5.2 Dielektrik parametrlərinin ölçülməsi üçün sadə elektrik döviyyəsi

Təcrübədən alınmış qiymətlərin köməyi ilə digər elektrik parametrləri sadə yanaşmada asanlıqla hesablanabilir:

$$\epsilon' = \frac{C_x}{C_0} \quad (2.20)$$

$$\varepsilon'' = \frac{1}{\omega R_x C_0} \quad (2.20a)$$

$$\tan \delta = \frac{1}{\omega R_x C_x} \quad (2.20b)$$

burada, δ dielektrik itki bucağı, ε' və ε'' isə uyğun olaraq dielektirik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələri, C_0 vakuüm tutumu elektrodun sahəsi və nümunənin qalınlığına mütənasib olaraq aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$C_0 = \frac{S \varepsilon_0}{d} \quad (2.21)$$

burada, S – elektrodun sahəsi, d – nümunənin qalınlığı və ε_0 – vakuümdə dielektrik nüfuzluğu və ya dielektrik sabitidir ($8.854187817 \dots \times 10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1}$). Bu metodla ölçə zamanı nəzərə almaq lazımdır ki, elektrik sahəsinin elektrod kənarlarından daxil olaması (fringing effects) təcrübələrin xətasını artırır bilər (**Şəkil 2.5.3**).

Bu halda kənarlarda yaranan elektik sahəsi ellipsoidal olaraq qiymətləndirilə bilər və bu halda bəzi parametrlərin hesablanması qısa olara nəzərdən keçirək. Belə ki, ellipsoidal səth ilkin yanaşmada aşağıdakı kimi təsvir oluna bilər:

$$\frac{x^2}{R_x^2} + \frac{y^2}{R_y^2} + \frac{z^2}{R_z^2} = 1 \quad (2.22)$$

burada, R_x , R_y və R_z , uyğun olaraq x , y və z oxlarına mütənasib semioxlardır [**30, c.2, s.47**]. Əgər sistemə bircins E (E_x, E_y, E_z) dəyişən elektrik sahəsi (AC) tətbiq edilərsə, kompleks dielektrik nüfuzluğu (ε_p^*) və mühitin dielektrik nüfuzluğu (ε_s^*) nəzərə alınaraq çıxan (V_{out}) və daxil (V_{in}) olan elektrik potensialları Laplas tənliklərinə uyğun olaraq aşağıdakı kimi təsvir edilə bilər [**168, s.1621**].

$$V_{out} = - \sum_{k=x,y,z} E_k k \left\{ 1 - \frac{\varepsilon_p^* - \varepsilon_a^*}{\varepsilon_a^* + (\varepsilon_p^* - \varepsilon_a^*)L_k} L_k' \right\} \quad (2.23)$$

$$V_{in} = - \sum_{k=x,y,z} E_k k \frac{\varepsilon_a^*}{\varepsilon_a^* + (\varepsilon_p^* - \varepsilon_a^*)L_k} \quad (2.24)$$

burada,

$$L_k' = \frac{R_x R_y R_z}{2} \int_s^\infty \frac{ds}{(R_k^2 + s)R_s} \quad (2.25)$$

$$L_k = \frac{R_x R_y R_z}{2} \int_0^\infty \frac{ds}{(R_k^2 + s)R_s} \quad (2.26)$$

$$R_s = \sqrt{(R_x^2 + s)(R_y^2 + s)(R_z^2 + s)} \quad (2.27)$$

$$\sum_{k=x,y,z} L_k = 1 \quad (2.28)$$

burada, L_k k oxu istiqamətində depolyarizasiya faktoru adlanır [168, s.1621]. Digər tərəfdən elektrik sahəsinin kənarçıxmasının qarşısının alınması üçün üçlü elektroddan istifadə edilir və bu xəta nisbətən azaldıla bilər (Şəkil 2.5.4).

Lakin, bu halda nəzərə almaq lazımdır ki, effektiv elektrod sahəsi digər halda olduğu kimi sadə deyil və aşağıdakılar nəzərə alınaraq hesablanmalıdır:

$$A_e = \pi \left[r + \frac{dr}{2} \right]^2 \quad (2.29)$$

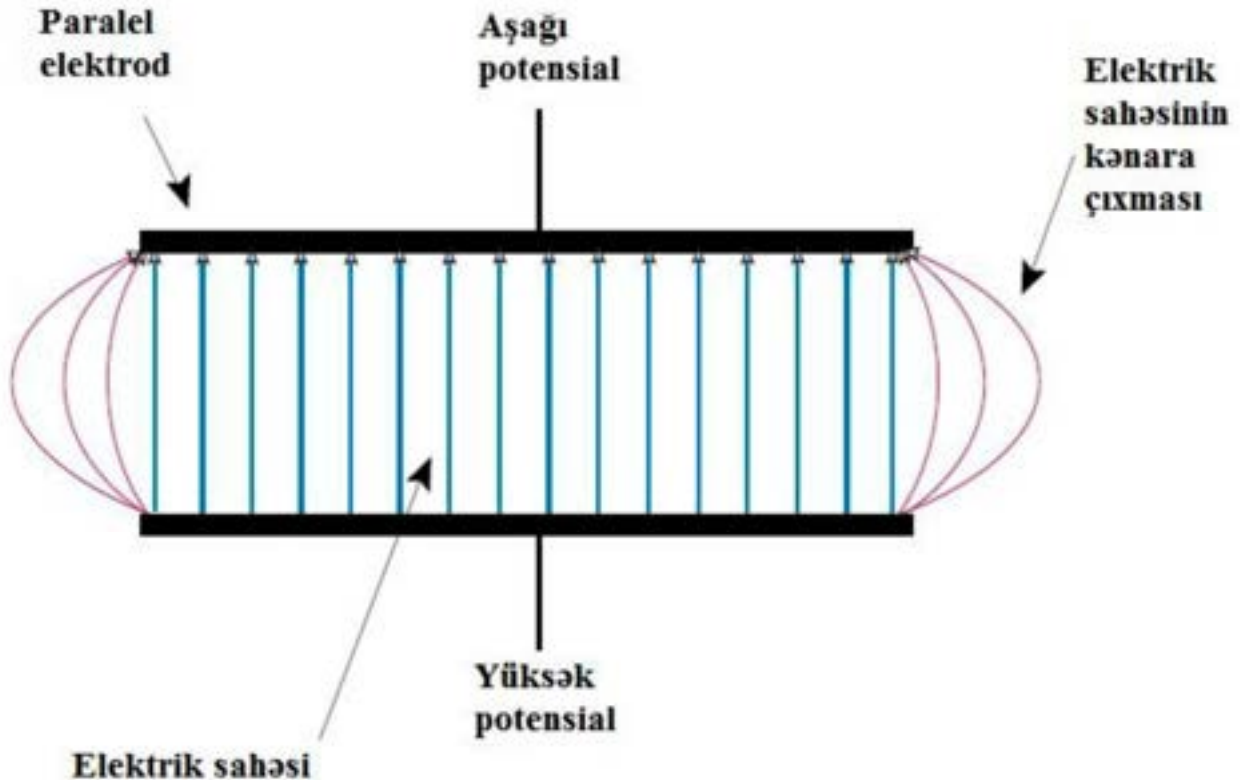
Dissertasiyada təcrübələr zamanı Vetstonun körpü mütodu seçilmiş tezlik aralığı üçün tətbiq edilmişdir (Şəkil 2.5.5).

Bu metod istifadə edilən zaman, nəzərə almaq lazımdır ki, cərəyan olmadıqda sistem tarazlıqda olur. Təcrübələr aparılan nümunənin naməlum Z_4 impedansı aşağıdakı bərabərliklə təyin edilə bilər [4, s.56]:

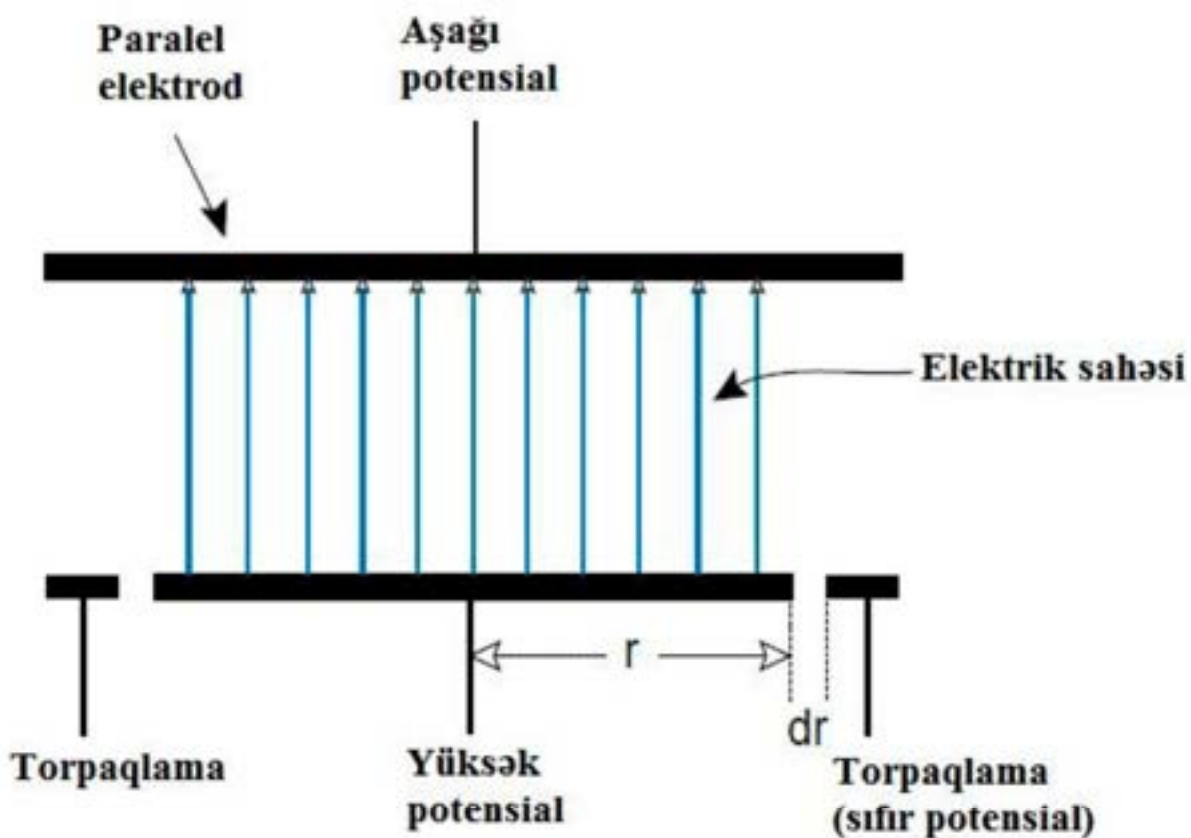
$$Z_4 = \frac{Z_1 Z_3}{Z_2} \quad (2.30)$$

Son tənliyi tərs halda aşağıdakı kimi yazıla bilər:

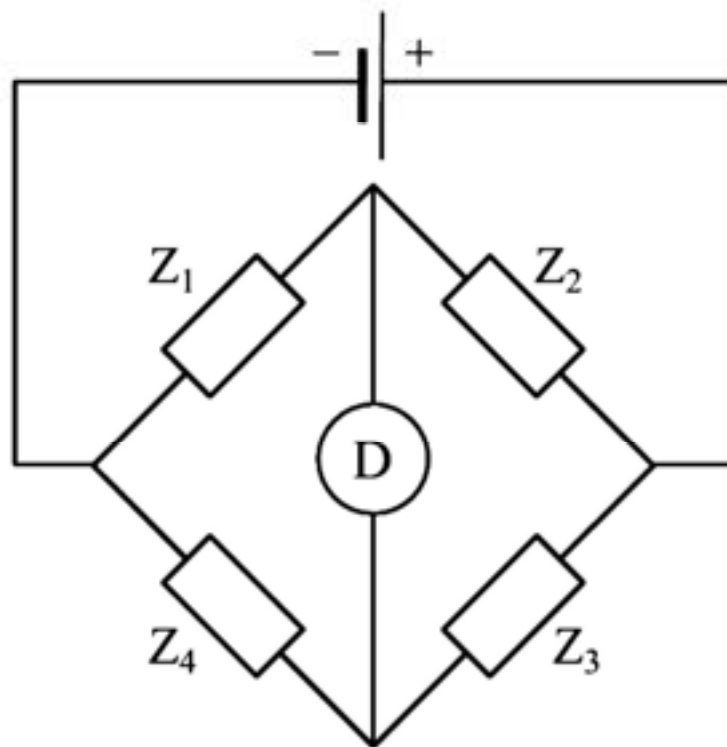
$$\frac{1}{Z_4} = \frac{Z_2}{Z_1 Z_3} \quad (2.31)$$



Şəkil 2.5.3 Elektrik sahəsinin elektrod kənarına çıxmasının sxematik təsviri

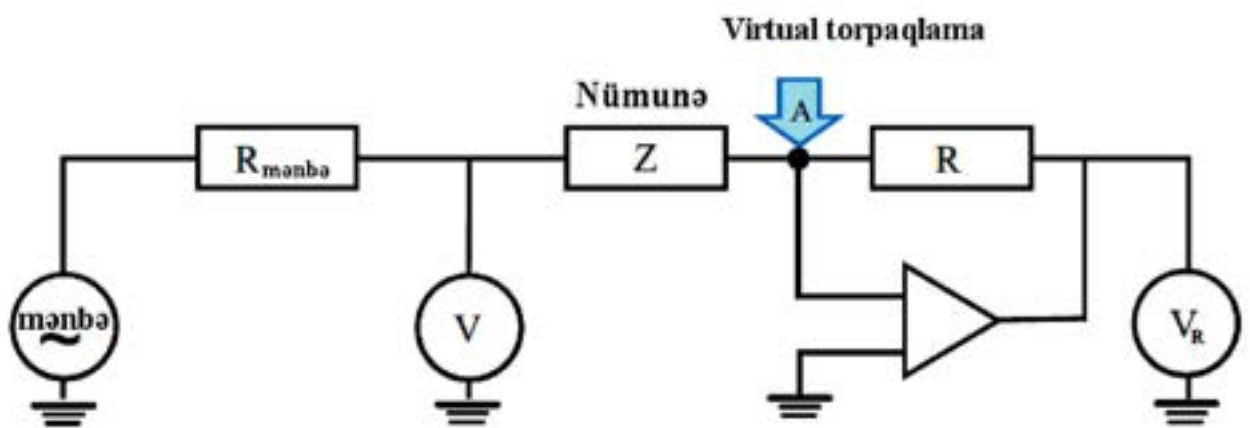


Şəkil 2.5.4 Elektrik sahəsinin kənarlaşmasının qarşısının alınması məqsədilə hazırlanmış üçlü elektrodun sxematik təsviri



Şəkil 2.5.5 Vetstonun körpüsündə təcrübələr aparılan nümunəni Z_4 elementi xarakterizə edir.

Təqdim olunan dissertasiyada bütün elektrik və dielektrik ölçmələri “Novocontrol Alpha High Resolution Dielectric Analyzer” cihazında dəyişən sahə üçün ($\sim 1V$) temperaturun 100 – 400 K intervalında və tezliyin 0.1Hz – 2.5MHz aralığında 88 müxtəlif sabit qiymətlərində aparılmışdır. Bu halda, təqdim olunan Vetstonun körpü metodu tezliyin 0.1Hz – 2.5MHz intervalında təcrübələrin aparılması üçün uyğundur [4, s.57; 78, s.214103; 79, s.1450012; 80, s.7; 206, s.12904]. Təcrübələr zamanı qurğu kompüterlə idarə edilir və avtomatik idarə sistemi sxematik olaraq **şəkil 2.5.6** - də təsvir edilmişdir [4, s.57; 78, s.214103; 80, s.22].

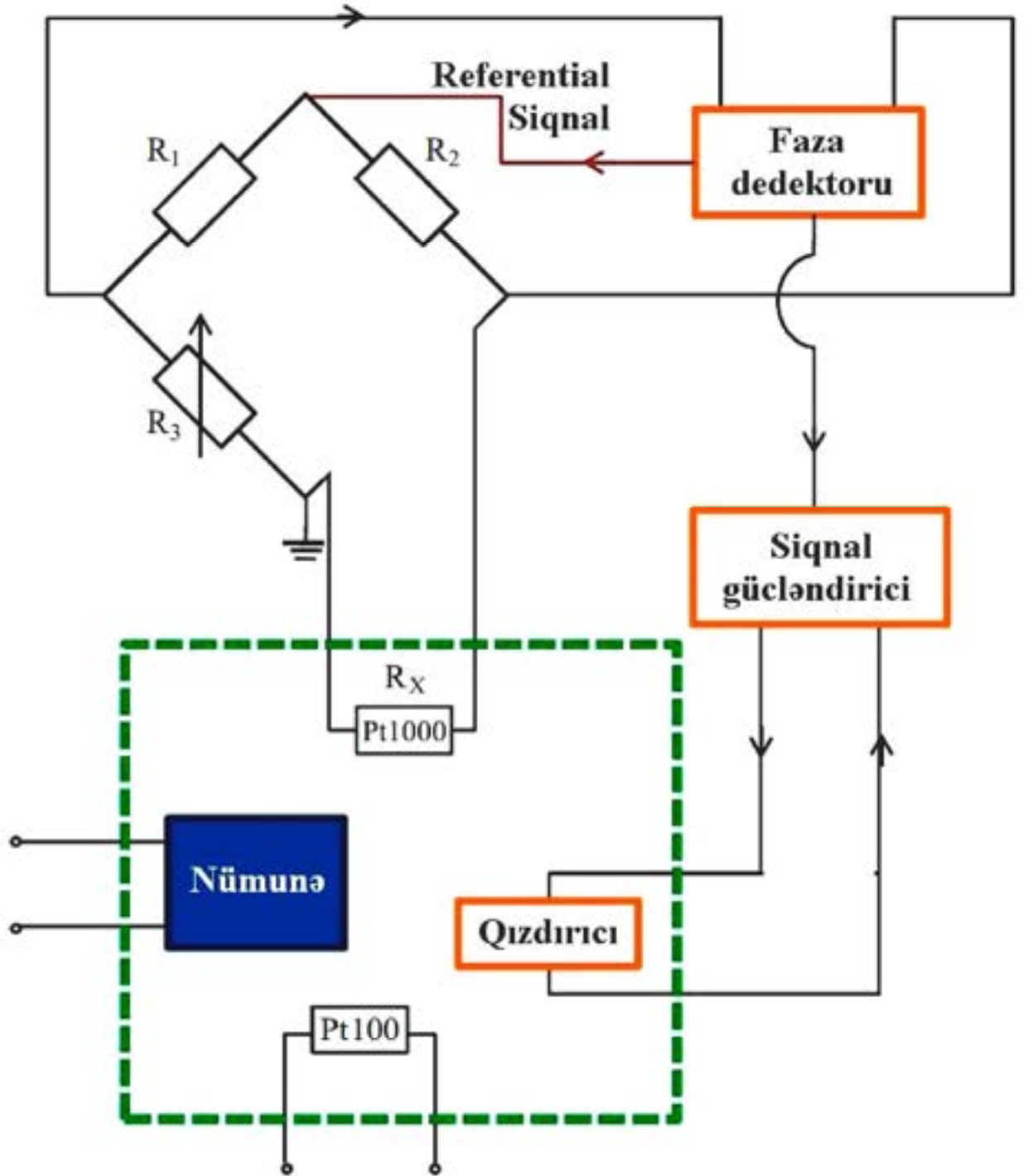


Şəkil 2.5.6 Avtomatik idarə sisteminin sxematik təsviri

Təcrübələrdə temperatur həssaslığı $10^{-2}K$ olmuşdur və bu həssaslıq körpü metodu ilə əldə edilmişdir. İstifadə olunan metodun sxematik təsviri **şəkil 2.5.7** – də verilmişdir [4, s.59].

R_x temperatur sensoru Vetston körpüsünə bərkidilib və Pt1000 rezistoru ilə əlaqəli olan birbaşa kompüterə bərkidilmiş R_3 rezistoru və hər biri 500Ω olan iki R_1 və R_2 rezistorları ilə temperatur avtomatik rejimdə və ya kompüterlə idarə olunur. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin elektrik və dielektrik xassələrini təcrübə olaraq ölçmək üçün ilkin olaraq nanomaterial Jozef Stefan İnstitutunun “Nazik təbəqələr və səthlər fizikası” laboratoriyasında xüsusi şəraitdə $3kN/sm^2$ təzyiqdə sıxılaraq hündürlüyü 2.2 mm və diametri 15 mm olan tabletka formasında hazırlanmışdır. 3C-SiC nanokristalları tabletka formasında reaktorun kanallarına uyğun alüminium

konteynerdə yerləşdirilmişdir. Hazırlanmış nümunələr mərkəzi kanalda 1, 5, 10 və 20 saat müddətlərində kəsilməz olaraq şüalandırılmışdır.



Şəkil 2.5.7 Təcrübələr aparılan kameranın (qırıq xətlər kamera sərhədləridir) temperaturunu idarə etmək üçün istifadə olunan qurğunun sxematik təsviri.

Neytron selinin təsiri nəticəsində nümunələrin aktivliyi 3 GBq – ə qədər

artmışdır. Bu səbəbdən bütün ölçmələr neytron selinin təsirindən təqribən 500 saat sonra aparılmışdır (aparılan təcrübələrdə soyuma vaxtı olaraq 500saat götürülmüşdür). Şüalanmadan sonra nümunələrin səthinə xüsusi şəraitdə gümüş kontaktlar vurulub və onun keyfiyyəti yoxlanılıb (Ögussa, Leitsilber 200). Sonra platin altlıq və üstlükdən istifadə edilərək nümunələrdə dielektrik itkiləri “Novocontrol Alpha High Resolution Dielectric Analyzer” cihazında dəyişən sahə üçün (~1V) temperaturun 100 – 400 K intervalında və tezliyin 0.1Hz – 2.5MHz aralığında ölçülmüşdür. Öncə qeyd etdiyimiz kimi, ölçmələr zamanı temperaturun hər hansı dərəcədə saxlanma dəqiqliyi 10^{-2} K kimi olmuşdur və bu dəqiqlik körpü metodu ilə əldə edilmişdir (Pt100 resistor) [80, s.24; 206, s.12904]. İlkin halda, təcrübələrdən birbaşa nümunələrin tutumu və müqaviməti ölçülmüşdür və buradan nümunələrin məlum parametrləri nəzərə alınaraq digər elektrik parametrləri hesablanmışdır. Dielektrik parametrlərinin hesablamaları zamanı əsasən aşağıdakı münasibətlərindən istifadə olunmuşdur.

$$\varepsilon' = \frac{C}{C_0} \quad (2.32)$$

$$\varepsilon'' = \frac{1}{\omega C_0 R} = \frac{G}{\omega C_0} \quad (2.32a)$$

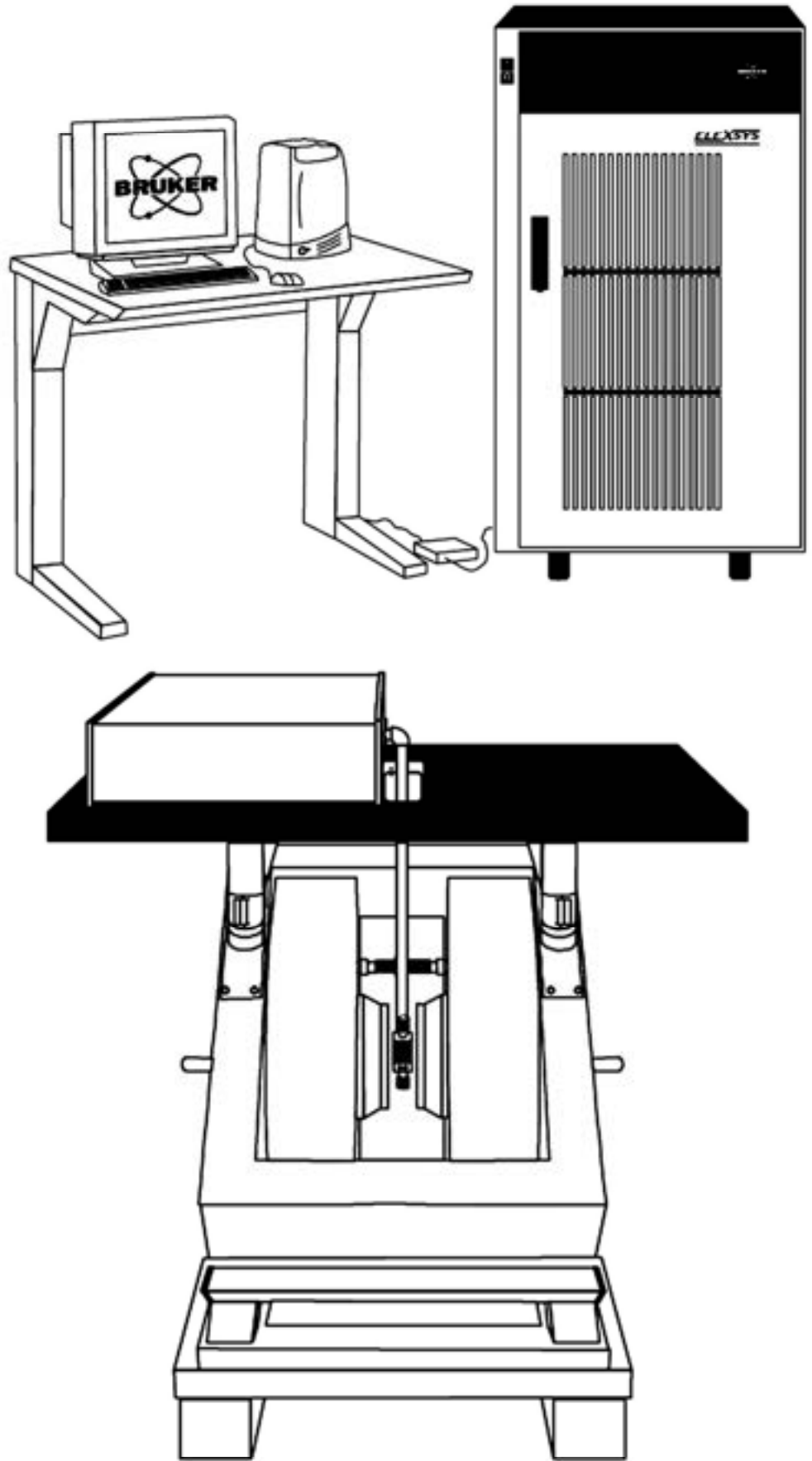
$$\operatorname{tg} \delta = \frac{\varepsilon''}{\varepsilon'} \quad (2.32b)$$

burada $C_0 = \varepsilon_0 \frac{S}{d}$ - kondensatorun vakuum tutumu, $G = \frac{1}{R}$ - keçiricilik, C – cihazla ölçülmüş tutum, R – cihazla ölçülmüş müqavimət, δ – dielektrik itki bucağı, S – nümunələrin kontaktlarının sahəsi, d – nümunələrin qalınlığı və ε' , ε'' isə uyğun olaraq dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələridir. Hesablanmış qiymətlərə uyğun alınan bütün nəticələr “OriginPro 9.1 pro” programında qrafik olaraq təsvir edilmişdir.

Bundan əlavə 3C-SiC nanokristallarının volt – amper (V – A) xarakteristikaları Ljubljana Universitetinin “Laboratory of Photovoltaics and Optoelectronics” laboratoriyasında “Keithley 238 High Current Source Measurement Unit” cihazında ölçülmüşdür. Bütün təcrübələr otaq temperaturunda gərginliyin -100V - +100V aralığında və 5V addımla aparılmışdır. Histerik ölçmələr aparılmışdır (gərginliyin -100V qiymətindən +100 qiymətinə qədər və əksinə). Ölçmələr zamanı altlıq olaraq mis lövhədən istifadə edilmiş və üst tərəfdən kontakt tipi idarə edilmişdir. Bütün təcrübələrdə hər nümunə üçün fərqli kontakt vəziyyətlərində 3 dəfə təkrar ölçmələr aparılmışdır. Cihaz “LabView” proqramı ilə idarə olunmuş və alınmış bütün qiymətlərə uyğun nəticələr “OriginPro 9.1 pro” proqramında qrafik olaraq təsvir edilmişdir.

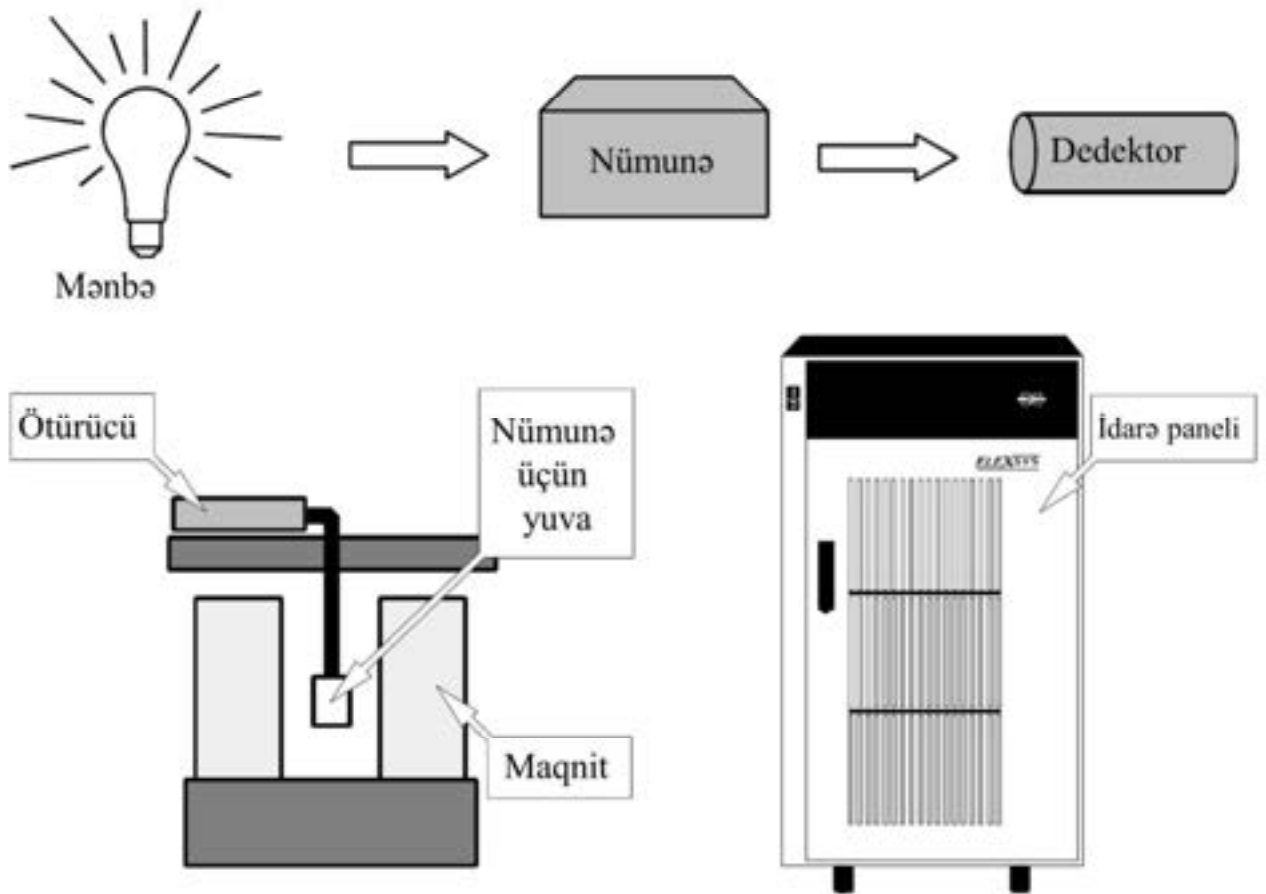
2.6 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin paramaqnit xüsusiyyətlərinin tədqiqi metodikası

Elektron qurğularda tətbiqi zamanı SiC – i müxtəlif yollarla aşqarlamaq tələb olunur. Müasir zamanda, SiC – in neytronlarla aşqarlanması digər üsullarla müqayisədə daha əlverişli hesab edilir. Eyni zamanda neytronlarla aşqarlanma zamanı da, kristallik SiC – də defektlər yaranır və elektronikada tətbiqi zamanı bu tip defektlərin öyrənilməsi çox önəmlidir. Neytronlarla aşqarlanma zamanı, SiC nanokristallarında yaranan defektləri öyrənmək ESR (elektron spin resonans) spektroskopiyaya (ESR, və ya elektron paramaqnit resonans EPR) metodundan geniş istifadə edilir. Təqdim olunan dissertasiyada paramaqnit defektlərin, sərbəst radikalların və sərbəst elektronların konsentrasiyası və təbiəti EPR üsulu ilə öyrənilmişdir. Təcrübələr aparılan spektrometrin ümumi təsviri **şəkil 2.6.1** – də verilmişdir. Spektrometr ümumilikdə əsas hissə, soyuducu sistem və idarə paneli kimi üç hissədən ibarətdir.



Şəkil 2.6.1 Bruker ELEXSYS E500 EPR spectrometrinin ümumi təsviri.

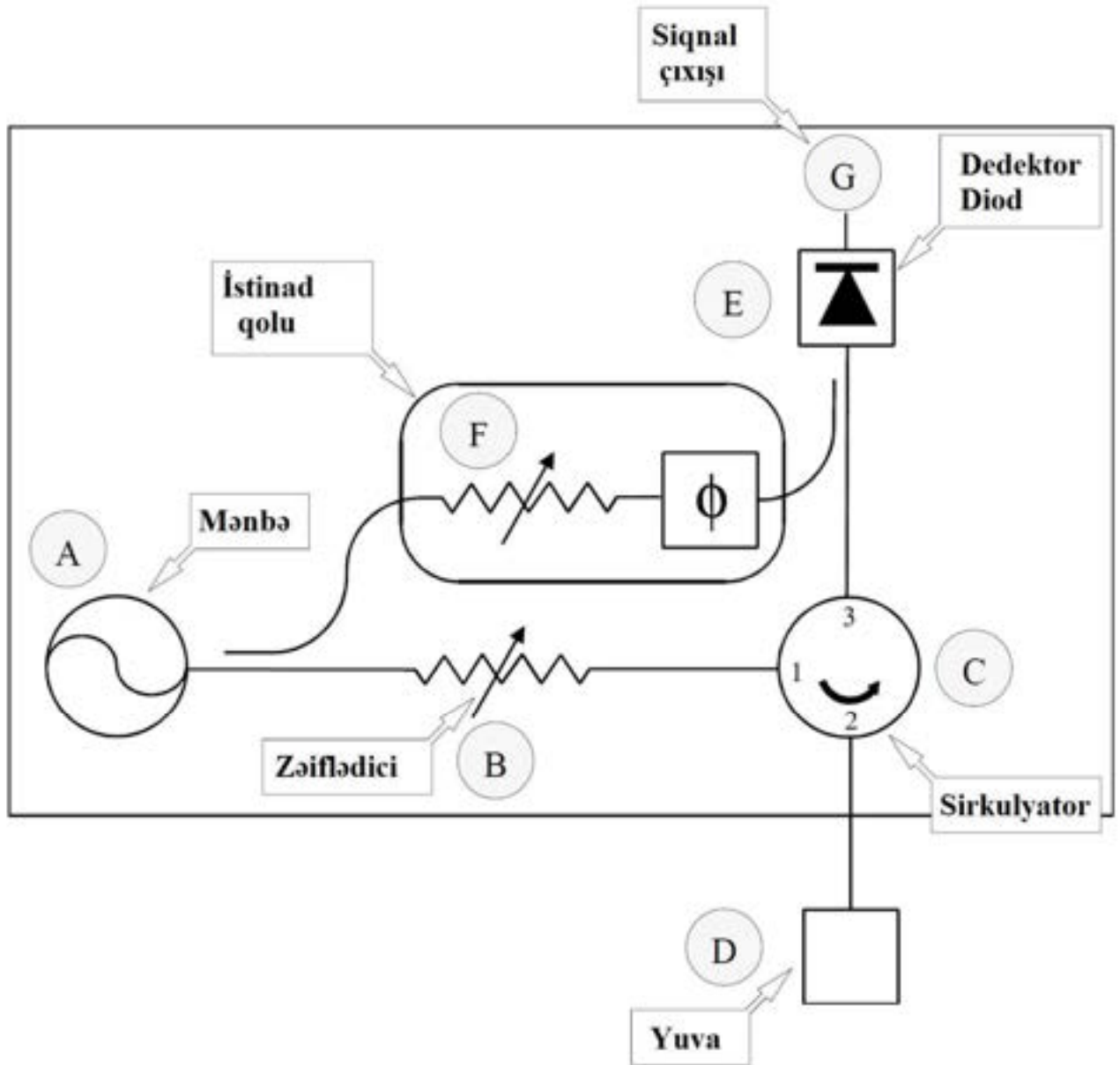
Ümumi yanaşmada EPR spektrometrinin iş prinsipi və Bruker EPR spectrometrinin daxili quruluşu **şəkil 2.6.2**-də təsvir edilmişdir. İlkin yanaşmada EPR spektrometri də digər spektrometrlər kimi ümumi prinsiplərə əsasən işləyir. Belə ki, mənbədən enerji nümunə üzərinə düşür və nümunədən keçən və ya əks olunan şüa dedektorun köməyi ilə qeyd edilib kompüterə ötürülür. Xüsusi halda, Bruker EPR spectrometrində ötürücü daxilində elektromaqnit şüalandırma mənbəsi və dedektor yerləşmişdir (**Şəkil 2.6.2**). Nümunə üçün hazırlanmış yuva metaldandır və ətraf mühitin təsirini minimuma endirilməsi və digər effektlər üçün xüsusi maqnit aralıqda yerləşdirilmişdir. Bundan əlavə olaraq qurğunun kompüterdə tanınması və bütün məlumatların emalı və idarə edilməsi üçün xüsusi idarə paneli mövcuddur.



Şəkil 2.6.2 Spektrometrin iş prinsipi və Bruker EPR spectrometrinin daxili quruluşu

Ümumiyyətlə Bruker EPR spectrometrində ötürücü daxilində yerləşdirilmiş elektromaqnit dalğa mənbəsi və dedektorun daxili quruluşu **şəkil 2.6.3** – də təsvir

edilmişdir. İlk öncə qeyd edək ki, mövcud təsvir Bruker EPR spectrometrində ötürücü sistemin ən sadə halıdır və bir çox məsələləri burada tam aydın izah etmək mümkün deyil. Qısa olaraq mikrodalğaların mənbədən dedektora necə getdiyini nəzərdən keçirək (**Şəkil 2.6.3**). EPR spectrometrində təcrübələr başladığı anda mikrodalğa A nöqtəsindən çıxır. Başlanğıc halda çıxan siqnalın gücü təcrübə məqsədindən asılı olaraq idarə edilə bilmir və ya idarə edilməsi çox mürəkkəb prosesdir. Bu məqsədlə yuxarı güclü mikrodalğaların gücünü nəzarətdə saxlamaq məqsədilə B zəiflədicisindən keçirirlər, hansı ki, B zəiflədicisi bizə imkan verir ki, istənilən gücdə mikrodalğalı siqnalı sistemə ötürək. Növbəti mərhələdə C – sirkulyatorun köməyi ilə mövcud mikrodalğaların hansı hissəsinin nümunədən əks olunmasını və ya şüanın birbaşa ötürülməsini idarə etmək mümkündür. Beləliklə siqnalın bir hissəsi D nümunə yuvasından əks olunaraq sistemə qayıdır. Bu halda təcrübə üçün önəmli olan nümunədən siqnala qayıdan siqnalın intensivliyidir və növbəti mərhələdə bütün nəticələr buna əsasən hesablanır. Hansı ki, biz bu intensivliyi C sirkulyatorun köməyi ilə idarə edə bilirik. Beləliklə adətən, 1 nöqtəsindən sistemə daxil olan mikrodalğanın əksər hissəsi 2 nöqtəsinə ötürülür və 3 istiqamətində demək olar ki mikrodalğa ötürülmür (nadir hallarda xüsusi təcrübələr istisna olmaqla). Nümunədən əks olunan mikrodalğalar birbaşa dedektor üzərinə yönləndirilir. Təcrübələrdə əks olunan siqnalları qeyd etmək üçün E – Şotki diodundan istifadə edilmişdir. Beləliklə, bu mikrodalğaları elektrik siqnalına çevirmək üçün istifadə edilmişdir. Əgər nümunədən əks olunan siqnal çox zəif olarsa (gücü təqribən 1mkVt -dan az olarsa) o zaman, dioddan keçən cərəyan mikrodalğa gücünə mütənasib olur və bu halda qeydetmə kvadratik olaraq aparılır (belə ki, elektrik sahəsinin gücü gərginlik və ya cərəyandan kvadratik asılıdır). Əgər əks olunan siqnal gücü nisbətən böyük olarsa o zaman qeydetmə xətti olaraq aparılır [**139, c.1, s.79**].



Şəkil 2.6.3 Bruker EPR spectrometrinin ötürücüsünün daxili quruluşu.

Ümumiyyətlə adətən dedektor xətti qeydetmə halında işədir və digər hallarda siqnal çox zəif olur. Ən güclü siqnal halı dedektordan keçən cərəyanın 200 mikroamper qiymətində alınır və mövcud dissertasiyada təcrübələrin bir qismi məhz bu cərəyanda aparılmışdır. Bir çox EPR spektrometrlərində əlavə ehtiyat F – istinad qolu yerləşdirilir (Şəkil 2.6.3). Hansı ki, bunun köməyiylə əlavə yüklənmələr və ya digər effektlər nəzarətdə saxlanılır. Eyni zamanda istinad qolunun köməyiylə sistemdən gələn siqnalın ən optimal qiyməti tənzimlənir və dioda ötürülür. Digər tərəfdən iki siqnalın kombinasiyasından meydana gələn faza sürüşmələri də istinad qolunun köməyiylə nəzarətdə saxlanılır. Qeyd edək ki, EPR spektrometrlərdə istifadə olunan

diodlar çox həssas olur və əlavə yüklənmədən tezliklə sıradan çıxıb bilər. Bu məqsədlə demək olar ki, bütün EPR spektrometrlərdə əlavə müdafiə sistemi yerləşdirilmişdir. Hansı ki, əgər sistemdə 400 mikroamperdən çox cərəyan şiddəti olarsa müdafiə qurğusu avtomatik olaraq sistemi bağlayır və təcrübələrdə xəta olduğunu göstərir. Sonda dedektroda qeyd edilmiş siqnallar G – çıxış siqnalı olaraq kompüterə ötürülür və kompüterdə proqram təminatının köməyiylə digər spektroskopik analizlər aparılır.

Təqdim olunan dissertasiyada, hazırlanmış nümunələr hər biri təqribən 50 μ l (1.5mg) olmaqla hündürlüyü 5mm, iç diametri 2,5mm olan silindirik formalı yüksək təmizliyə malik kvars boruculara doldurulmuşdur. Təcrübələrdə istifadə olunan nümunələr kvars borulara doldurulmadan öncə müxtəlif müddətlərdə neytron seli ilə şüalandırılmışdır. İlk və şüalanmadan sonra nümunələrin EPR analizləri “Bruker ELEXSYS E500 EPR spectrometer with high-Q resonator” cihazında aparılmışdır (500 - 5500G genişlikdə, mərkəzi sahənin 3300G qiymətində (Full sweep analysis, sweep = 500 G to 5500 G at center field of 3300 G = 0.33 T)).

2.7 Xətaların müəyyən edilmə metodikası

Təqdim olunan dissertasiyada bütün təcrübələr müasir tələblərə cavab verən və son texnologiyalardan sayılan cihazlarda aparılmışdır. Məlumdur ki, müasir zamanda mövcud cihazların əksəriyyəti yüksək həssaslığa malikdir və təcrübə xətaları bu tip cihazlarda çox az olur. Lakin bu onu deməyə əsas vermir ki, bu cihazların xətası yoxdur. Belə olan halda, bəzi təcrübə xətalarını qısa olaraq nəzərdən keçirmək mütləqdir. İlk öncə qeyd edək ki, işdə istifadə olunan nümunələrin elektrik və dielektrik xüsusiyyətlərini ölçmək üçün mövcud sistemin temperatur və qeydedici arasında kiçik sürüşmələr müşahidə oluna bilər. Ümumi yanaşmada impedans spektrometrində ölçmələr zamanı tutum və müqavimətin analizlərində tezlikdən asılılıq zamanı ədədi orta qiymət nəzərə alınır. Ümumi halda impedans spektrometrlərinin xətaları onların istehsalçıları tərəfindən qurğu üzərində qeyd edilir. Baxılan halda impedans spektrometr tutumu hesablayarkən aşağıdakı tutum həssaslığı münasibətdən istifadə etmişdir:

$$C_s = \frac{A_1}{\alpha} + A_2 + \left(\frac{B_1}{|Z_c|} + B_2 \times |Z_c| \right) \times \frac{100}{\alpha} \quad (2.33)$$

burada

$$|Z_c| = \frac{1}{2\pi\omega C_m}$$

burada, C_s – impedasn spektrometrində ölçmələr zamanı ölçülmüş tutumun faizlə xətası, C_m –təcrübi impedans ölçmələrdən hesablanmış tutum qiyməti, α – test signal səviyyəsi (baxılan halda 0,5V), A_1 , A_2 , B_1 və B_2 isə ölçmələr zamanı məlum sabit standart qiymətlərdir. Qeyd edək ki, A_1 , A_2 , B_1 və B_2 qiymətləri parametrlərin hansının ölçülməsindən asılı olaraq dəyişə bilər. Mövcud dissertasiyada aparılan təcrübələrdə yuxarıdakı düsturun köməyi ilə hesablanmış tutum üçün təcrübi xətanın qiyməti təqribən 0,2% tapılmışdır. Eyni zamanda tutuma oxşar olaraq müqavimət üçün də anoloji münasibətlə xətanın hesablanması mümkündür. Belə ki, müqavimət üçün oxşar ifadə aşağıdakı kimidir:

$$R_s = \frac{A_1}{\alpha} + A_2 + \left(\frac{B_1}{R_m} + B_2 \times R_m \right) \times \frac{100}{\alpha} \quad (2.34)$$

burada, R_s - ölçmələr zamanı müavimətin xətası, R_m - cihazda birbaşa ölçülmüş müqavimət, A_1 , A_2 , B_1 və B_2 isə ölçmələr zamanı məlum standart sabitlərdir. Bu münasibətin köməyi ilə məlum olmuşdur ki, müqavimət qiymətində təcrübələrdə mövcud xəta təqribən 0,64% tərtibindədir. Ümumi yanaşmada təcrübələrdən alınmış müqavimət və tutumun qiymətinə uyğun digər elektrik və dielektrik parametrləri hesablanarkən bu xətalər nəzərə alınmalıdır. Mövcud təcrübələrdə bu qiymətin çox kiçik olması səbəbilə bu xətalər nəzərə alınmamışdır və nəticələr təcrübələrdə cihazın qeyd etdiyi kimi təqdim olunmuşdur. Eyni zamanda, cihazda göstərilən xətaləri azaltmaq üçün bir neçə dəfə sazlanma (calibration) aparılmışdır.

Aparılan təhlillərə məlum olmuşdur ki, mövcud təcrübələrdə temperaturun hər hansı dərəcədə saxlanma dəqiqliyi $10^{-2}K$ kimidir [80, s.25; 206, s.12904]. Bu dəqiqlik körpü metodu ilə alınmışdır və mövcud temperatur xətası müasir zamanda qəbul ediləndir. Ümumiyyətlə, bütün elmi tədqiqat işlərində, alınan nəticələrə uyğun olaraq sistemə və təsadüfi xətalara qiymətləndirmək lazımdır. Məlumdur ki, mütləq xətan aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$\varepsilon_{\nu} = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \nabla x_i = \sum_i \left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \right| \varepsilon_i \quad (2.35)$$

burada ε_i - ölçülmüş parametrlərin mütləq xətasıdır. Qeyd edək ki, əksər hallarda, təcrübə ölçmələrinin qiyməti bir orta ədədi qiymətin ətrafında rəqs edir. Orta kvadratik xəta kənar çıxımlar nəzərə alınaraq aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$S(\chi) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \chi_i - x}{n-1}} \quad (2.36)$$

burada n – təcrübələrin sayı, χ – i -ci tək təcrübənin nəticəsidir. $S^2(\chi)$ – kəmiyyəti dispersiya adlanır. Nisbi vahidlərlə tapılan orta kvadratik xəta, variasiya əmsali adlanır:

$$\nu \frac{S(\chi)}{\chi} \cdot 100 \% \quad (2.37)$$

Orta qiymətin etibarlılıq aralığı $x \pm \Delta x$ kimi qiymətləndirilə bilər. Qeyd etmək lazımdır ki, ölçmələr zamanı sadəcə cihazın deyil, cihazda yerləşdirilən nümunənin vəziyyətindən asılı olaraq müəyyən qədər xətalara meydana gələ bilər. Elektrofiziki xassələrin ölçülməsi zamanı səth yüklərinin polyarizasiyası və ya elektrodların vurulması zamanı mövcud qüsurlar buna tipik misaldır. Bu kimi effektlər son

nəticədə nümunənin elektrik keçiriciliyi və ya digər parametrlərinin ədədi qiymətinə az və ya çox dərəcədə təsir edir. Elektrod səbəbindən yarananan mümkün təcrübi xətlərin hesablanma metodikası Frik və Kurtis tərəfindən işlənib hazırlanmışdır. Bu metodu tətbiq edərkən demək olar ki, elektrod səbəbindən səthdə yaranan bütün xətlər aradan qaldırılır. Bundan əlavə olaraq bu kimi xətlərin aradan qaldırılması üçün Onkli, Conson və Col tərəfindən fərqli yanaşmalar irəli sürülmüşdür. Onkli yanaşması zamanı dielektrik nüfuzluğu üçün mövcud münasibət aşağıdakı kimidir:

$$\varepsilon = \left(C - C_0 - AG \omega^{-\frac{3}{2}} \right) \frac{d}{K} \quad (2.38)$$

burada, C – iki elektrod arasındakı d məsafədə ölçülmüş tutum, C_0 və K isə verilmiş sistem üçün sabit kəmiyyətlərdir. Bu münasibətdə qeyd olunan $AG \omega^{-\frac{3}{2}}$ həddi elektrodlar arasındakı polyarizasiya həddidir. Burada, A $C-C_0$ və $G^2 \omega^{-1/2}$ asılılığında ayrının meylidir, hansı ki, bu kəmiyyət elektrodlarda mövcud polyarizasiya effektinin aradan qaldırılmasını xarakterizə edir. G – sistemin keçiriciliyi və ω - isə elektrik sahəsinin tezliyidir. Aparılan təhlillərdən məlum olmuşdur ki, son münasibət yalnız 25Hz – dən böyük tezliklərdə ödənilir [80, s.30; 206, s.12904]. Conson və Col yanaşması ilə dielektrik nüfuzluğunda mövcud xətlər aşağıdakı münasibətlə hesablanabilir:

$$\varepsilon_m = \varepsilon' + \left(Z_0 \sin \frac{n\pi}{2} \right) \omega^{-(n+1)} \left(\frac{G^2}{C_0} \right) \quad (2.39)$$

burada, ε_m cihaz tərəfindən birbaşa ölçülən dielektrik nüfuzluğu, Z_0 və n isə ölçü sisteminin tipindən asılı olan sabitlərdir. Bu münasibət nisbətən aşağı tezliklərdə xətlərin müəyyən edilməsində istifadə edilə bilər.

Təqdim olunan dissertasiyada təcrübələr aparılan “Novocontrol Alpha High Resolution Dielectric Analyzer” spektrometri tezliyi 10^6 Hz həssaslıqla qeyd edir.

Digər tərəfdən nümunələrin ölçülərini və strukturunu müəyyənləşdirmək üçün istifadə olunan “TEM, Jeol JEM-2010F” qurğusunun həssaslığı təqribən 0,1nm tərtibindədir. Bu həssaslıq dərəcəsi nümunədən asılı olaraq dəyişir və nanokristallik 3C-SiC üçün təqribən 0,2nm tərtibindədir.

III FƏSİL

NEYTRONLARLA ŞÜALANDIRILMIŞ NANOKRISTALLIK 3C-SiC -

in k_0 INAA, TEM, SEM ANALİZLƏRİ VƏ QURULUŞ

XÜSUSİYYƏTLƏRİNİN TƏDQIQI

Bu fəsildə, 3C-SiC nanokristallarında neytron selinin təsiri ilə yaranan radioaktiv izotopların tipi və konsentrasiyasının k_0 -INAA metodu ilə tədqiqi verilmişdir. Eyni zamanda, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin səth morfoloqiyası və hissəcik ölçüləri FESEM və SEM analizləri ilə təhlil edilmişdir. Neytron seli ilə aşqarlama zamanı, nanokristallarda yaranan radiasiya qüsurları, nanohissəcik səthinin amorflaşması və aqləremasiyası yüksək həssalıqda böyütmələrdə HRTEM və TEM analizləri ilə izah edilmişdir. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin daxili quruluşu və strukturu SAED və EDP tədqiqi ilə izah edilmişdir. 3C-SiC nanokristallarının qəfəs parametrləri rentgen struktur analizləri ilə müəyyən edilmiş və nümunə daxilində silisium karbidin digər modifikasiyalı politiplərinin mövcudluğu araşdırılmışdır. Ümumi yanaşmada bu fəsil neytronlarla şüalandırılmış nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin k_0 INAA, HRTEM, TEM, SAED, EDP, FESEM, SEM analizləri və quruluş xüsusiyyətlərinin tədqiqinə həsr olunmuşdur. Neytron selinin təsiri altında nano SiC – də əmələ gələn qarışıq elementlərin radioizotopları zamanın funksiyası kimi öyrənilib. Neytronla şüalanma nəticəsində nümunələrin aktivliyini kəskin artıran izotopların identifikasiyası aparılıb. Lazer metodu ilə sintez olunmuş nano 3C-SiC hissəciklərinin təmizlik dərəcəsi k_0 əsaslı instrumental neytron aktivləşmə analizi (The k_0 -based Instrumental Neutron Activation Analysis (k_0 -INAA)) metodu ilə müəyyən edilmişdir. Şüalanmadan sonra aparılan aktivlik analizləri nəticəsində nano SiC – də mövcud olan qarışıq element tərkibi müvafiq elementlərin radionuklidləri ilə müəyyən edilmişdir. k_0 -INAA metodu ilə qarışıq radioizotoplarının faizlə miqdarları təyin edilmişdir.

Neytronla şüalanmadan öncə və sonra nanomaterial SEM və TEM cihazları ilə analiz edilmişdir. Nanohissəciklərin aqloremasiyası şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli öyrənilmişdir. SEM analizləri ilə təcrübələrdə istifadə olunan nanohissəciklərin ölçüləri araşdırılmışdır. Nanohissəcik səthinin amorflaşması TEM qurğusunda analiz edilmişdir. TEM qurğusunda nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində neytron şüalanmanın defekt və digər effektləri öyrənilmişdir. SAED və EDP analizləri ilə neytron şüalanmanın nanomaterialın kristallik strukturuna təsiri araşdırılmışdır. TEM cihazında yüksək həssaslıqla çox böyütmədə (HRTEM) kristallik qəfəsdə mövcud atomlar müşahidə olunur və materialın nanokristallik təbiətli olması təstiqlənmişdir. Neytron seli ilə şüalandırılmış nanomaterialda yaranan defektlər və ya klasterlər HRTEM təsvirlərində müşahidə olunan “ləkələrlə” izah edilmişdir.

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin ($h k l$) parametrləri rentgen struktur analizləri ilə müəyyən edilmişdir. Təcrübələr aparılan nümunə daxilində silisium karbidin digər modifikasiyalı politiplərinin mövcudluğu araşdırılmışdır. Qəfəs parametrlərinə uyğun 2θ bucaqları müəyyən edilmişdir. Təcrübələrdən nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri üçün qəfəs sabitləri və qəfəs bucaqları qiymətləndirilmişdir.

3.1 Nano 3C-SiC hissəciklərinin neytron aktivləşmə analizləri

Neytron seli ilə şüalanma zamanı nanomaterial daxilində radioaktiv həyəcanlanmış nüvələr yaranır. Yaranmış bu radiokativ nüvələrin ilkin sayının N olduğunu nəzərə alsaq, radioaktiv parçalanma nəticəsində nüvələrin sayı aşağıdakı qanunauyğunluqla azalır [123, s.31]:

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N \quad (3.1)$$

burada, λ parçalanma sabitidir. (3.1) tənliyini sadələşdirib aşağıdakı bərabətliyi alırıq:

$$\ln N = -\lambda t + C \quad (3.2)$$

Başlanğıc anda ($t=t_0$) radioaktiv izotopların sayının N_0 olduğunu nəzərə alsaq, (3.2) tənliyini aşağıdakı kimi yazı bilərik:

$$\ln N = -\lambda t + \ln N_0$$

$$\ln \left(\frac{N}{N_0} \right) = -\lambda t \quad (3.3)$$

$$N = N_0 \exp(-\lambda t)$$

Son tənlik eksponensial radioaktiv parçalanma tənliyidir. Yarımparçalanma müddəti (half-life $t_{1/2}$) aşağıdakı kimi hesablanı bilər [123, s.31]:

$$\frac{N}{N_0} = 0.5 = \exp\left(-\lambda t_{1/2}\right) \quad (3.4)$$

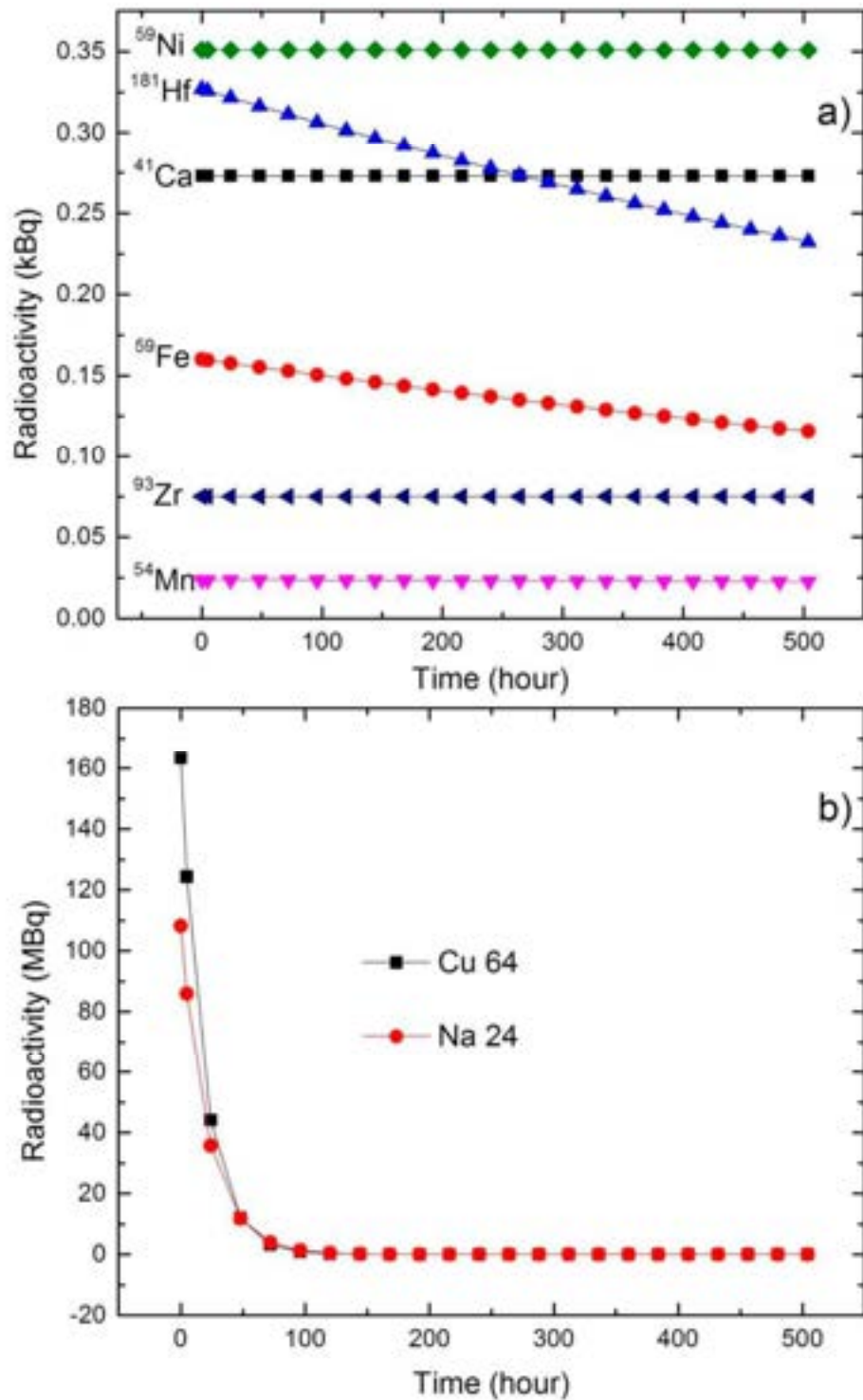
$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0.693}{\lambda}$$

Radioaktiv izotopların identifikasiyası qamma spektroskopik üsulla tədqiq olunub. Qamma spektrlərində nüvə keçidlərinə müvafiq γ – şüaların intensivlikləri şüalanma vaxtından və parçalanma sabitlərindən asılı olaraq müxtəlifdir.

Nümunələrin neytron şüalanmadan 500 saat sonra aktivliklərinin dəyişməsi tədqiq olunub. Müəyyən edilib ki, şüalanmış nümunələrin ilkin radioaktivlikləri 0.02kBq – 3GBq intervalında dəyişir. Şüalanmış nümunələrdə müşahidə olunan yeni yaranmış radioaktiv izotopların aktivlikləri parçalanma sabitlərinə uyğun olaraq dəyişir. İyirmi günlük aktivlik analizləri nəticəsində müəyyən edilmiş müxtəlif tip radionuklidlərin ilkin aktivlikləri çox geniş diapozonda dəyişir. Digər tərəfdən qarışıqda mövcud olan radionuklidlərin yarımparçalanma müddətləri $0.037 \sim 8.5 \cdot 10^8$ saat qədər geniş diapozonda dəyişir. Belə ki, müşahidələr iki mərhələdə aparılmışdır:

20 saata qədər şüalanmış nümunələrdən uzun yaşama müddətinə malik radioizotoplar, 5 dəqiqə şüalanmış nümunələrdən isə az yaşama müddətinə malik radioizotoplar aşkar olunmuşdur. Məhz bu səbəbdən burada, bu elementlər şərti olaraq iki qrupa ayrılıb. Müşahidə olunmuş radioaktiv izotopları aktivliklərinə və yaşama müddətlərinə görə uzun və nisbətən qısa yaşama müddətinə malik radioizotoplar. Müşahidə olunmuş radioaktiv izotopların şərti qruplar üzrə ilkin aktivliklərinin müşahidə vaxtından asılılıqları (şəkil 3.1.1 – 3.1.3) – də tədqiq edilib. İlk olaraq neytron selinin təsiri ilə nanomaterialda yaranan nisbətən çox yaşama müddətinə malik və aktivliyi 163MBq-ə qədər olan radionuklidləri nəzərdən keçirək (Şəkil 1.1).

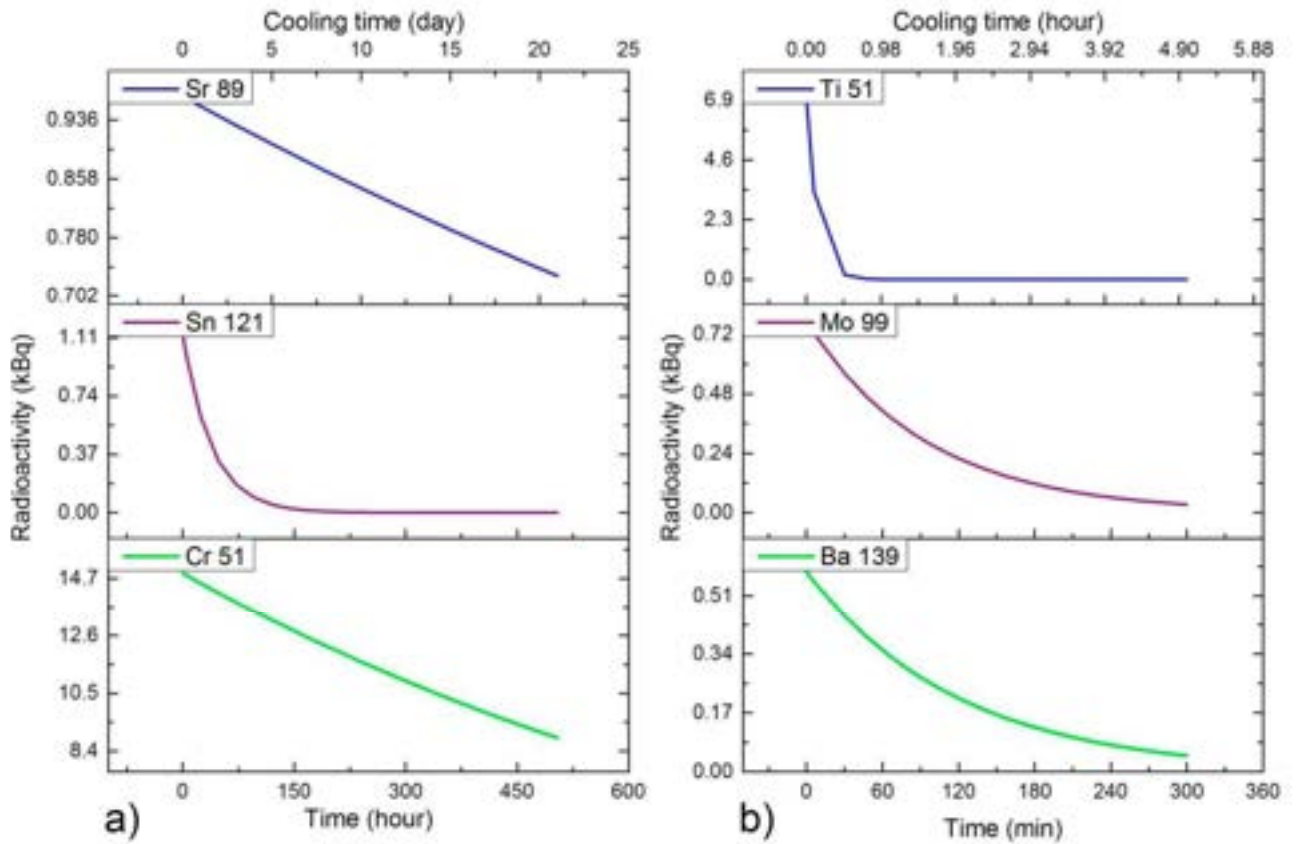
Çox yaşama müddətinə malik radionuklidlər iyirmi gün (təqribən 500 saat) müddətində analiz edilmişdir. Burada ümumilikdə 8 tip radionuklid müşahidə olunmuşdur ki, onların da yarımparçalanma dövrləri 12.7 saatdan 8.6E8 saata qədər dəyişir. Burada mövcud radionuklidlərin ilkin aktivlikləri 0.3 kBq – dən 163MBq - ə qədər dəyişir. Analizlər nəticəsində məlum olmuşdur ki, çox yaşama müddətinə malik radionuklidləri ilkin aktivliklərinə əsasən iki fərqli qrupa ayırmaq olar. Birinci qrupa aktivlikləri təqribən 0.35kBq - ə qədər olan radionuklidlər daxildir (Şəkil 3.1.1a). Burada müşahidə olunan radionuklidlərin yarımparçalanma müddətləri 1023 saat (^{181}Hf), 1077 saat (^{59}Fe), 7508 saat (^{54}Mn), $5.8 \cdot 10^8$ saat (^{93}Zr), $6.7 \cdot 10^8$ saat (^{59}Ni) və $8.6 \cdot 10^8$ saat (^{41}Ca) kimidir. Təqribən iyirmi gün sonra bütün radionuklidlərin aktivliyi 0.35kBq – dən az olmuşdur [8, s.7]. Çox yaşama müddətinə malik, digər qrupa daxil olan radionuklidlərin sayı ikidir (Şəkil 3.1.1b). Bu radionuklidlərin ilkin aktivlikləri təqribən 163 MBq – dir. Bu qrupda müşahidə olunan radionuklidlər ^{64}Cu 12.7 saat və ^{24}Na 15 saat kimi yarımparçalanma müddətinə malikdirlər. Bu radionuklidlərin yarımparçalanma müddətlərinin nisbətən az olmasının nəticəsidir ki, iyirmi gün sonra hər iki radionuklidin aktivliyi sıfıra qədər azalmışdır.



Şəkil 3.1.1 Neytron selinin təsiri ilə nano SiC – də yaranmış nisbətən çox yaşama müddətinə malik radionuklidlərin aktivliyinin ölçmə vaxtından asılılığı

Fərqli aktivliyə malik, digər qrup nisbətən çox yaşama müddətinə malik radionuklidlər şəkil 3.1.2a – da təsvir edilmişdir. Burada mövcud radionuklidlər yarımparçalanma müddətinə görə 27 saat (^{121}Sn), 676 saat (^{51}Cr) və 1238 saat (^{89}Sr)

kimi sıralana bilər. Müşahidə olunan bu radionuklidlərin aktivlikləri 500saat sonra təqribən 8.8kBq - ə qədər azalır. Şəkil 3.1.2b – də orta aktivlikli (~kBq) nisbətən az yaşama müddətinə malik radionuklidlərin aktivliyinin ölçmə vaxtından asılılığı təsvir edilmişdir. Müşahidə olunan bu radionuklidləri yaşama müddətlərinə uyğun ^{51}Ti (0.095 saat), ^{99}Mo (1.1 saat) və ^{139}Ba (1.38 saat) kimi sıralaya bilərik. Şəkildən görüldüyü kimi, 5 saat sonra hər üç radionuklidin aktivliyi təqribən sıfıra enir (Şəkil 3.1.2b).



Şəkil 3.1.2 Neytron selinin təsiri ilə nano SiC – də yaranmış orta aktivlikli (~kBq) nisbətən çox və az yaşama müddətinə malik radionuklidlərin aktivliyinin ölçmə vaxtından asılılığı

Az yaşama müddətinə malik digər radionuklidlərin ilkin aktivliyi təqribən 54MBq-ə qədərdir (Şəkil 3.1.3a). Burada iki növ ^{52}V və ^{27}Mg radionuklidlər müşahidə olunmuşdur ki, onların da yarımparçalanma müddətləri uyğun olaraq ^{52}V üçün 0.062 saat və ^{27}Mg üçün isə 0.16 saatdır. Şəkil 3.1.3a – dən görüldüyü 5 saat

vaxt keçdikdən sonra hər iki radionuklidlərin aktivlikləri təqribən sıfıra qədər azalmışdır. Az yaşama müddətinə malik olan digər qrup radionuklidlərin ilkin aktivliyi təqribən 3GBq-ə qədər olub. Müşahidə olunan yüksək aktivlikli ^{38}Cl izotopunun yarımparçalanma müddəti 0.62 saatdır və ölçmələrin aparıldığı beş saatin sonunda ^{38}Cl izotopunun aktivliyi təqribən 11.5kBq-ə qədər azalmışdır (Şəkil 3.1.3b). Bu qrupa daxil olan ^{28}Al izotopunun isə ilkin aktivliyi 1.4GBq və yarımparçalanma müddəti isə 0.037 saatdır (ölçmələrin aparıldığı 5 saatin sonunda ^{28}Al izotopunun aktivliyi təqribən sıfıra qədər azalmışdır). Digərlərindən dəfələrlə çox aktivliyə malik ^{38}Cl izotopu qarışıqın əsas hissəsini təşkil edir.

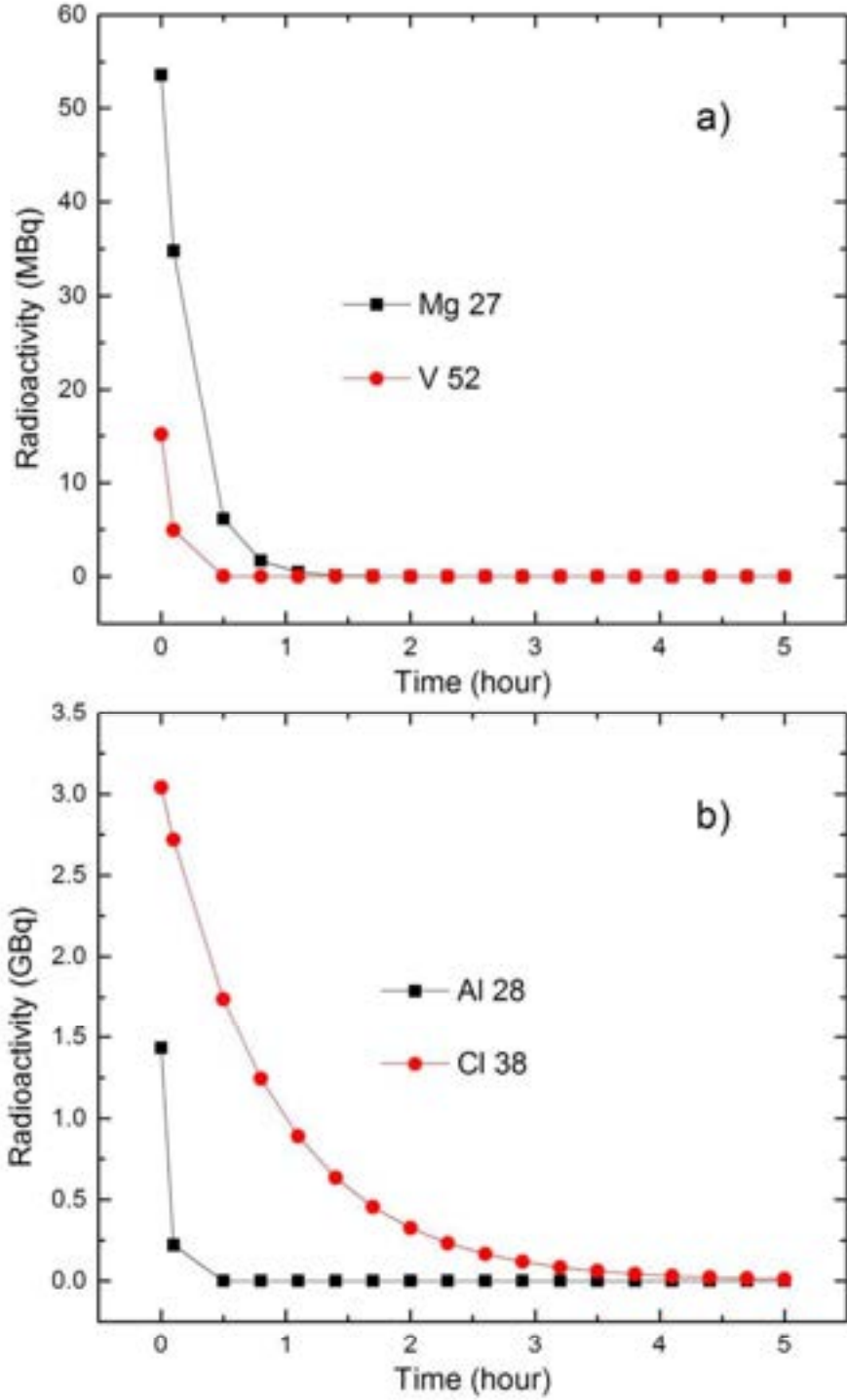
Şəkil 3.1.1 və 3.1.2 – də verilmiş asılılıqdan görünür ki, radioaktiv parçalanma sabiti az və yarımparçalanma vaxtı nisbətən çox olan izotoplarının aktivlikləri təcrübi müşahidə zamanı az dəyişir və nano silisium karbidin xassələrinin sonrakı tədqiqi zamanı onların radioaktiv parçalanmasının təsiri gözləniləndir. Elementlərin qatılıqlarının təyini müvafiq energetik intervalda yaranmış aktivlikləri əsasında aparılır. Hər nüvədə tutulan neytronların reaksiya dərəcəsi R aşağıdakı kimi təyin olunur [8, s.4; 37, s.18; 103, s.705; 123, s.31; 204, c.1, s.20; 305, c.4, s.54]:

$$R = \int_0^{\infty} \sigma(v)\phi'(v)dv = \int_0^{\infty} \sigma(E)\phi'(E)dE = \int_0^{\infty} n'(v)v\sigma(v)dv \quad (3.5)$$

burada, $\sigma(v)$ neytronun sürəti v olduqda effektiv en kəsiyi (sm^2), $\sigma(E)$ neytronun enerjisi E (eV) olduqda effektiv en kəsiyi (sm^2), $\phi'(v)$ sürəti v olan neytron seli (sm^{-3}), $n'(v)$ sürəti v olan neytron sıxlığı (sm^{-4}), $\phi'(E)$ enerjisi E olan neytron selidir ($\text{sm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ eV}^{-1}$).

Nüvə çevrilmələri nüvə parçalanmalarının sayı ilə müəyyən edilir. Başlanğıc halda aktiv nüvələrin sayını ($N(t_i, t_d)$) aşağıdakı kimi hesablamaq olar [37, s.16; 103, s.705; 123, 204, c.1, s.67; 305, c.4, s.54]:

$$N(t_i, t_d, t_m) = \frac{RN_0}{\lambda} (1 - \exp[-\lambda t_i]) \exp[-\lambda t_d] \quad (3.6)$$



Şəkil 3.1.3 Neytron selinin təsiri ilə nano SiC – də yaranmış nisbətən yüksək aktivlikli (~GBq) və az yaşama müddətinə malik radionuklidlərin aktivliyinin ölçmə vaxtından asılılığı

Ölçmələr aparılan müddətdə parçalanan nüvələrin sayını aşağıdakı tənliklə ifadə etmək olar:

$$\Delta N(t_i, t_d, t_m) = \frac{RN_0}{\lambda} (1 - \exp[-\lambda t_i]) \exp[-\lambda t_d] (1 - \exp[-\lambda t_m]) \quad (3.7)$$

burada, t_d parçalanma və ya gözləmə vaxtı (şüalanmanın bitməsi və ölçmələrin başlaması aralığında keçən vaxt), t_i şüalanmanın sonunda vaxt (end of the irradiation time), t_m ölçmə vaxtıdır. Spektrdə mövcud piklərə əsasən aktivləşmə formulunu aşağıdakı kimi yazmaq olar [123, s.33]:

$$N_p = \Delta N \gamma \varepsilon = \varphi_n \sigma_{eff} \frac{N_{av} m_x \theta}{M_a} (1 - \exp[-\lambda t_i]) \exp[-\lambda t_d] (1 - \exp[-\lambda t_m]) I \varepsilon \quad (3.8)$$

burada, N_p qamma pikində (E_γ) tam say, N_{av} Avaqadro ədədi, θ hədəf izotopların izotopik bolluğu (isotopic abundance), m_x şüalanan elementin qramla kütləsi, M_a atomik kütlə (g mol^{-1}), I qamma şüaların bolluğu (the gamma-ray abundance) və ε dedektorda qeyd edilən tam enerjidir. Sadə halda, tam pikin sahəsinə əsasən (from the net peak area) elementin miqdarı aşağıdakı tənliklə hesablanı bilər:

$$m_x = N_p \cdot \frac{M_a}{N_{av} \theta} \cdot \frac{\lambda}{\varphi_n \sigma_{eff} I \varepsilon (1 - \exp[-\lambda t_i]) \exp[-\lambda t_d] (1 - \exp[-\lambda t_m])} \quad (3.9)$$

k_0 müqayisə metodunda (comparator method) hesablamalar bir qədər mürəkkəbdir. k_0 əsaslı neytron aktivləşmə analizi (The k_0 -based neutron activation analysis (k_0 -NAA)) metodunda reaktor neytronlarından istifadə edilərək multielement analizi aparılır. k_0 əsaslı instrumental neytron aktivləşmə analizi (The k_0 -based Instrumental Neutron Activation Analysis (k_0 -INAA)) metodunda aşağıdakı tənliklərdən istifadə olunur:

$$k_0 = \frac{1}{k} \cdot \frac{1 + Q_{0,comp}(\alpha)/f}{1 + Q_{0,cal}(\alpha)/f} \cdot \frac{\varepsilon_{comp}}{\varepsilon_{cal}} = \frac{M_{comp}}{\theta_{comp} \sigma_{0,comp} \gamma_{comp}} \cdot \frac{\theta_{cal} \sigma_{0,cal} \gamma_{cal}}{M_{cal}}$$

$$m_{x(unk)} = m_{x(comp)} \cdot \frac{1 + Q_{0,comp}(\alpha)/f}{1 + Q_{0,cal}(\alpha)/f} \cdot \frac{\varepsilon_{comp}}{\varepsilon_{cal}} \cdot \frac{\left\{ \frac{N_p/t}{(1 - \exp[-\lambda t_i]) \exp[-\lambda t_d] (1 - \exp[-\lambda t_m]) \cdot m} \right\}_{unk}}{\left\{ \frac{N_p/t}{(1 - \exp[-\lambda t_i]) \exp[-\lambda t_d] (1 - \exp[-\lambda t_m]) \cdot m} \right\}_{comp}} \cdot \frac{1}{k_0}$$

(3.10)

burada, $m_{x(unk)}$ qatışıq elementin hər qramda olan kütləsi, $m_{x(comp)}$ müqayisə elementinin kütləsi ($m_{x(comp)}$ is the mass of element x in comparator in g), ε ayırdetmə həssaslığı (the detection efficiency) və $(1+Q_0(\alpha)/f)$ şüalandırma parametridir. İzotopların təcrübi təyin edilmiş aktivliklərinin eyni şəraitdə və eyni kütlədə çəkilmiş standartların aktivlikləri ilə müqayisəyə əsasən hər bir elementin nano SiC – in tərkibində miqdarı təyin olunub. Nümunə və etalonların çəkiləri müxtəlif olduqda elementin qatılıqları [8, s.3; 37, s.16; 103, s.706; 123, 204, c.1, s.80; 305, c.4, s.55] verilən metodika üzrə təyin edilir. Aparılan hesablamalar nəticəsində məlum olmuşdur ki, SiC nanomaterialının tərkibində 0.5% Cl və qalan elementlərin miqdarı isə ümumilikdə təqribən 0,15% təşkil edir. Ümumiyyətlə neytron selinin nano SiC hissəciklərinə təsiri zamanı təqribən 0,65 faiz qatışıqda mövcud radionuklidlərin individual miqdarları k_0 -INAA ilə hesablanmışdır (Cədvəl 3.1).

Ümumiyyətlə **cədvəl 3.1.1 – də** neytron selinin təsiri nəticəsində yaranmış qatışıq radioizotoplarının faiz ilə miqdarları, onlara əsasən ilkin izotoplar və bu izotopların yaranmasında zəbt olunan neytronların sayı təsvir edilmişdir. Eyni zamanda nəzərə alınmaq lazımdır ki, cədvəldə qeyd edilən Al və Mg izotoplarının konsentrasiyası çox az ehtimalla mümkün $^{28}\text{Si}(n, p) \rightarrow 28\text{Al}$ və $^{30}\text{Si}(n, \alpha) \rightarrow 27\text{Mg}$ reaksiyaları nəticəsində göstərilən qiymətdən bir qədər az ola bilər, lakin bu tip reaksiyaların baş verməsi üçün prosesdə iştirak edən neytronların enerjisi minimum

təqribən 4 MeV – dən çox olmalıdır. Təcrübələr aparılan reaktorda neytronların enerjisi ortalama təqribən 1MeV ətrafında dəyişir, amma enerjisi 4 MeV – dən çox olan neytronların mövcudluğu qaçılmazdır. Beləliklə, Al və Mg konsentrasiyası mümkün göstərilən nüvə reaksiyaları səbəbindən uyğun olaraq 0.015% və 0.0083%-dan az ola bilər.

Cədvəl 3.1.1 Neytron selinin təsiri ilə SiC nanomaterialında yaranmış qatışıq radioizotopların k_0 -INAA ilə təyin edilmiş miqdarları

Stabil izotop	Radioizotop	Hər nüvədə zəbt olunan neytron sayı	İz (qatışıq) elementlərinin konsentrasiyası (mq/kq)	İz (qatışıq) elementlərinin faizlə miqddarı (%)
$^{35(36,37)}\text{Cl}$	^{38}Cl	+1 (+3)	5096	0.5096
$^{56(57,58)}\text{Fe}$	^{59}Fe	+1 (+3)	368	0.0368
^{40}Ca	^{41}Ca	+1	270	0.027
^{27}Al	^{28}Al ($^{28}\text{Si}(n, p)$)	+1	150	0.015
$^{50-52}\text{Cr}, ^{51}\text{V}$	^{51}Cr	+1	126	0.0126
$^{48(49,50)}\text{Ti}$	^{51}Ti	+1 (+3)	90	0.009
^{58}Ni	^{59}Ni	+1	85	0.0085
$^{24(25,26)}\text{Mg}$	^{27}Mg ($^{30}\text{Si}(n, \alpha)$)	+1 (+3)	83	0.0083
$^{90(91,92)}\text{Zr}$	^{93}Zr	+1 (+3)	55	0.0055
^{88}Sr	^{89}Sr	+1	15	0.0015
^{120}Sn	^{121}Sn	+1	10	0.001
^{63}Cu	^{64}Cu	+1	5	0.0005
$^{54(n,p)}\text{Fe}$	^{54}Mn	+1	5	0.0005
^{138}Ba	^{139}Ba	+1	4.3	0.00043
^{98}Mo	^{99}Mo	+1	3	0.0003
^{180}Hf	^{181}Hf	+1	2	0.0002
^{23}Na	^{24}Na	+1	2	0.0002

3.2 Neytron selinin təsirinə məruz qalmış nano SiC hissəciklərinin

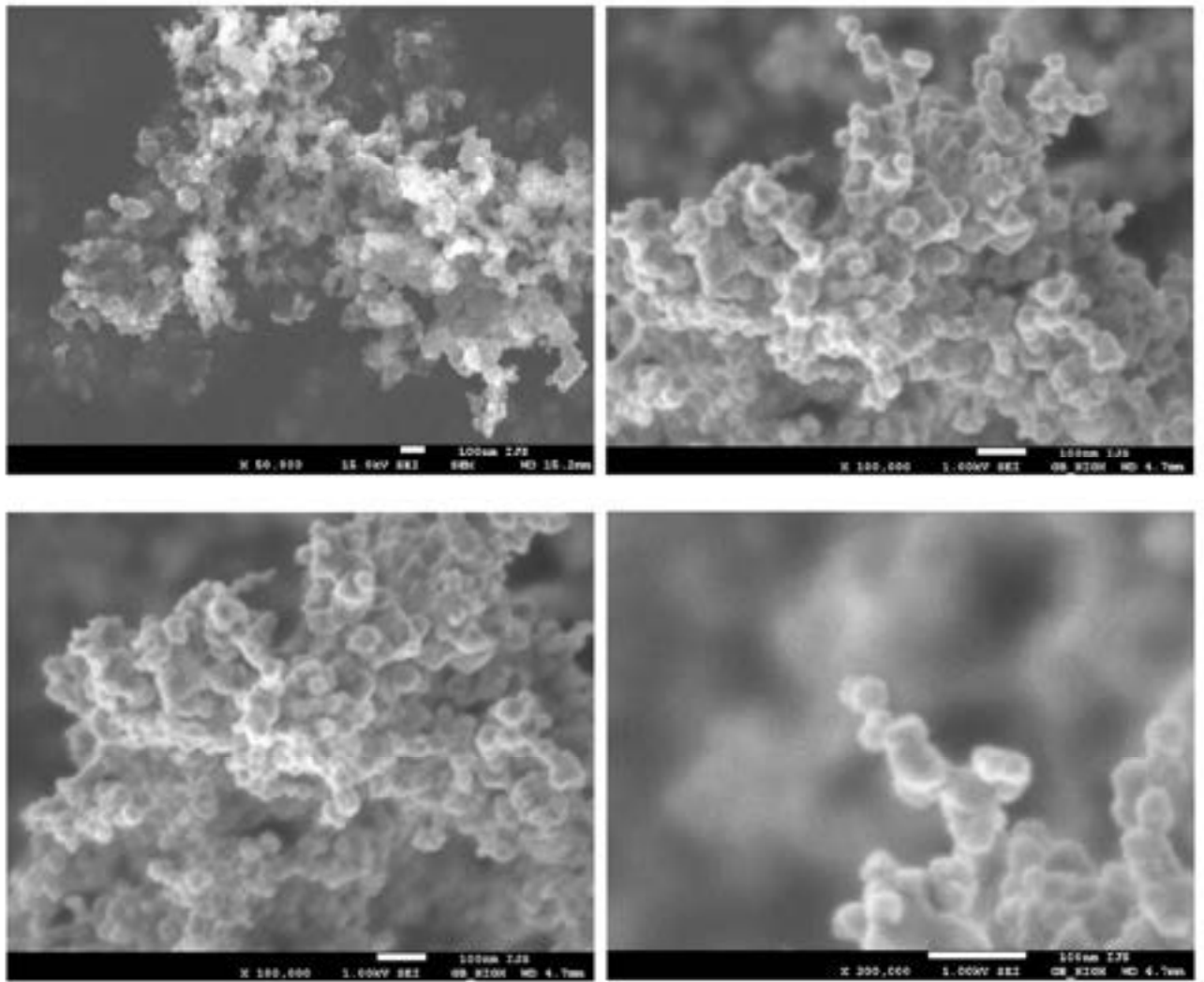
TEM və SEM tədqiqi

Təcrübələr zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin SEM və TEM şəkilləri müxtəlif mikro və nano ölçülü təsvirlərdə və fərqli böyütmə ilə çəkilmişdir. Şəkillərin mikron ölçülü aşağı böyütmə tərtiblərində çəkilməsində əsas məqsəd uzaq fondan nümunədə nanohissəciklərin birləşməsini (adhesion) müşahidə etməkdir. Belə ki, əgər nanohissəciklər birləşərək mikro ölçülərdə klaster əmələ gətirərsə, bu halda mövcud klasterləri SEM qurğusunda müşahidə etmək daha əlverişlidir. Məhz bu səbəbdən aparılan tədqiqatlarda ilk olaraq SEM qurğusunda alınan təsvirlər nəzərdən keçirilmişdir (**Şəkil 3.2.1**). SEM analizlərindən məlum olmuşdur ki, SiC nanohissəcikləri maksimum 80nm tərtibində aqlomerasiya (agglomerated) olunur.

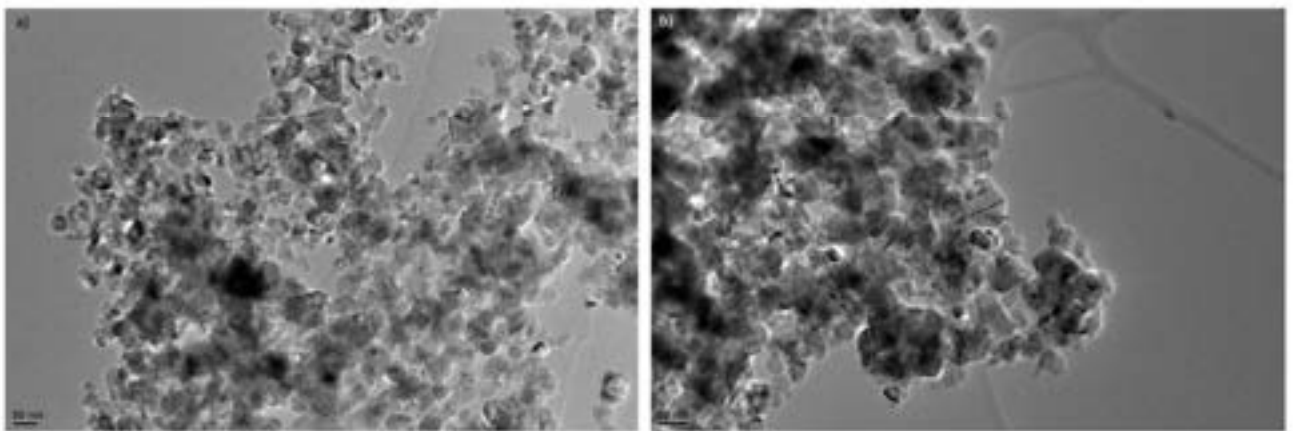
Neytron seli ilə şüalanma nəticəsində nanohissəciklərdə baş verən fiziki dəyişikləri müşahidə etmək üçün TEM analizləri şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli aparılmışdır. İlk olaraq nanohissəciklərdə aqloremasiyani daha aydın və müqayisəli müşahidə etmək üçün TEM təsvirlərini şüalanmadan öncə və sonra nəzərdən keçirək (**Şəkil 3.2.2**).

TEM analizlərindən məlum olmuşdur ki, neytron seli ilə şüalanmış nümunə ilkin nümunə ilə müqayisədə daha çox aqloremasiyaya uğrayır. **Şəkil 3.2.3** – də daha çox böyütmədə şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli TEM təsvirləri verilmişdir. Şəkildən görüldüyü kimi neytron seli ilə şüalanma zamanı nanohissəciklərin səthində qalınlığı təqribən 3nm olan amorf təbəqə yaranır. Ehtimal olunur ki, bu amorf təbəqə (3nm qalınlıqda) ya neytronların təsiri nəticəsində səthdə olan bir neçə qəfəs atomlarının yerdəyişməsi ya da səthdə olan bəzi atomların oksidləşməsi ola bilər.

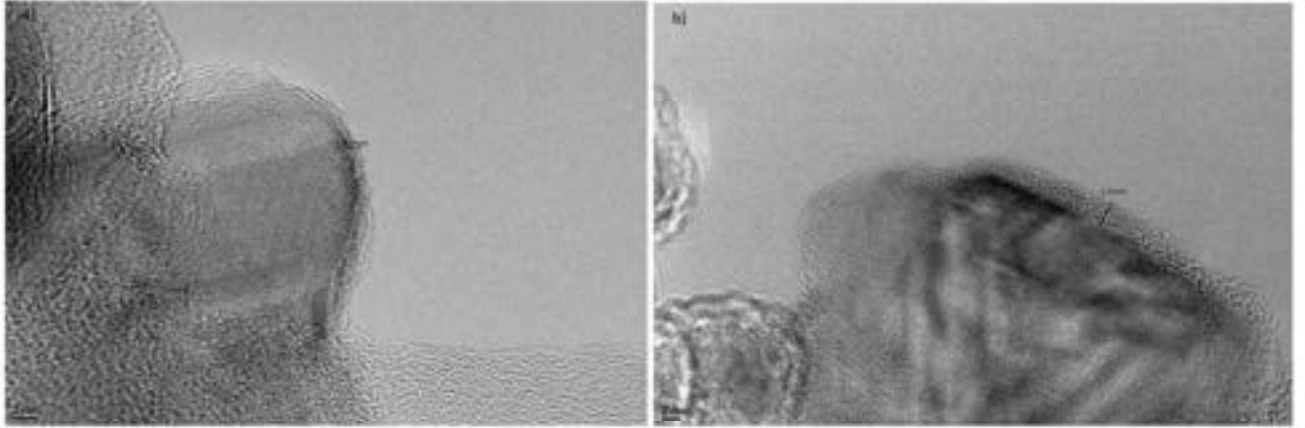
Əlavə olaraq, müqayisəli analizlərindən məlum olur ki, şüalanmadan sonra nümunələr üzərində “ləkələrin” sayı (şüalanmadan öncəki nümunələrlə müqayisədə) artır (**Şəkil 3.2.4**). Çox böyük böyütmədə (2nm indeks ilə) qəfəs atomları müşahidə olunur (**Şəkil 3.2.3 və Şəkil 3.2.4, a, c**). Qəfəs atomları müşahidə olunan böyütmələrdə kristalda neytron selinin təsiri nəticəsində yaranması ehtimal olunan “ləkələrin” artması daha aşkar nəzərə çarpır (**Şəkil 3.2.4, c**).



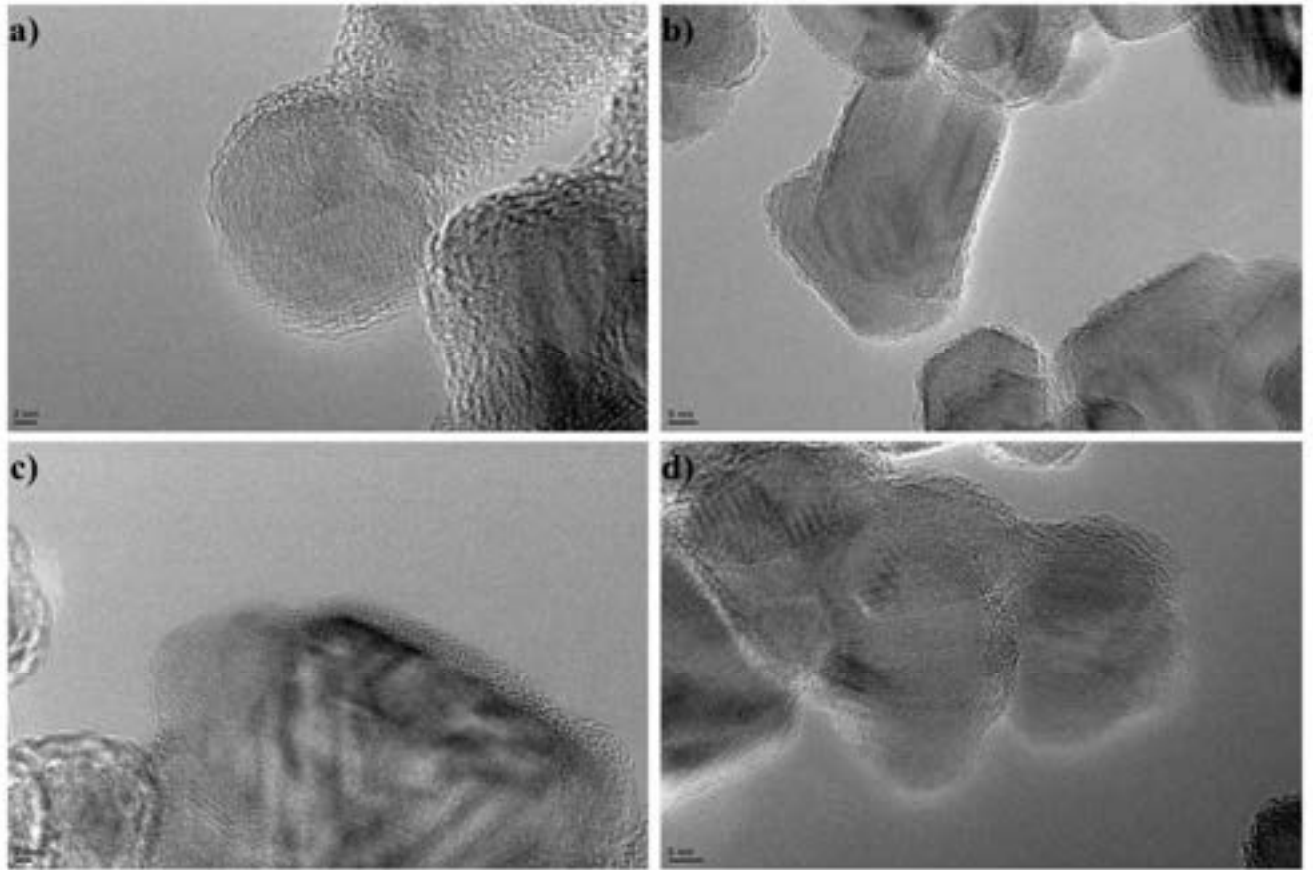
Şəkil 3.2.1 SiC nanohisəciklərinin SEM mikroqrafiyasında fərqli böyütmələrdə şüalanmadan sonra təxmin edilən 20 – 80 nanometirlik hissəcik ölçüləri



Şəkil 3.2.2 Nanokristallik SiC hissəciklərinin neytron şüalanmadan öncə (a) və sonra (b) TEM təsvirləri (aqloremasiya maksimum 70nm).



Şəkil 3.2.3 Nanokristallik SiC hissəciklərinin neytron şüalanmadan öncə (a) və sonra (b) çox böyütmədə TEM təsvirləri (şüalanmadan sonra səthin 3nm tərtibində amorflaşma).

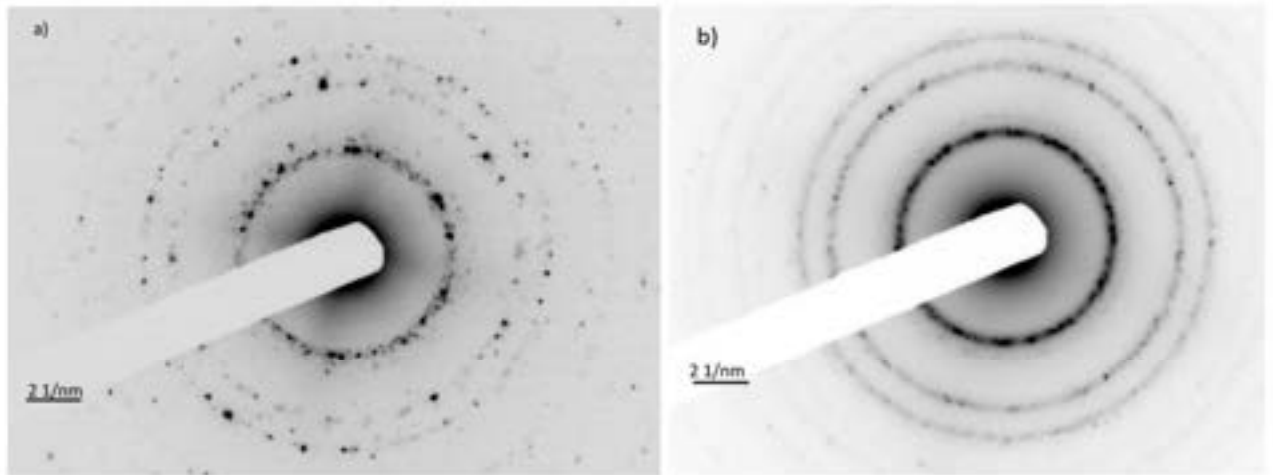


Şəkil 3.2.4 Nanokristallik SiC hissəciklərinin neytron şüalanmadan öncə (a və b) və sonra (c və d) TEM təsvirləri.

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaranan “ləkələr” şüalanma nəticəsində

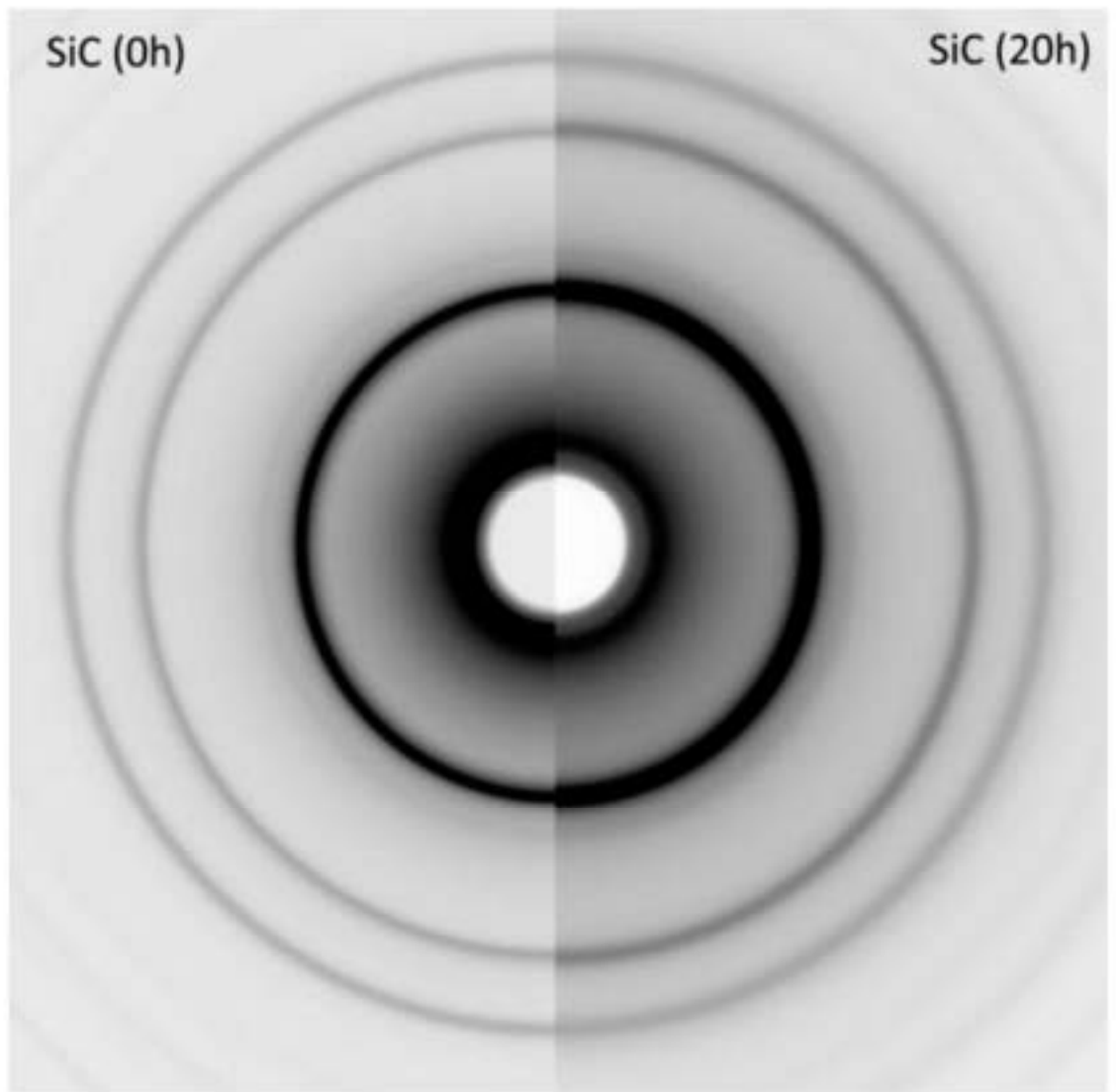
yaranan defektlərlə izah olunur. Belə ki, neytron selinin təsiri nəticəsində yaranmış defektlər, klasterlər və ya digər radiasiya qüsurları qəfəs atomlarının fərqli təsvir olunmasına səbəb olur. Bu isə TEM təsvirində özünü “ləkə” kimi biruzə verir. Məhz bu səbəbdən digər fiziki parametrlərin ölçülməsi zamanı neytron selinin təsiri ilə nanomaterialın fiziki xassələri dəyişir.

Kiçik sahələr üzərində SAED analizləri aparılmışdır. Buna uyğun olaraq böyük sahəsi olan nanohissəciklər üzərində elektron difraksiya mənzərəsi (electron diffraction patterns (EDP)) müvafiq olaraq, difraksiya ləkələrindən ibarət müəyyən difraktor üzlüklər görsənir və bu nümunələrin nanokristallik təbiətli olmasını göstərir (Şəkil 3.2.5). EDP təsvirləri “Gatan’s Digital Micrograph” proqramının köməyi ilə analiz edilmişdir.



Şəkil 3.2.5 Nanokristallik SiC hissəciklərinin neytron şüalanmadan öncə (a) və sonra (b) EDP analizləri.

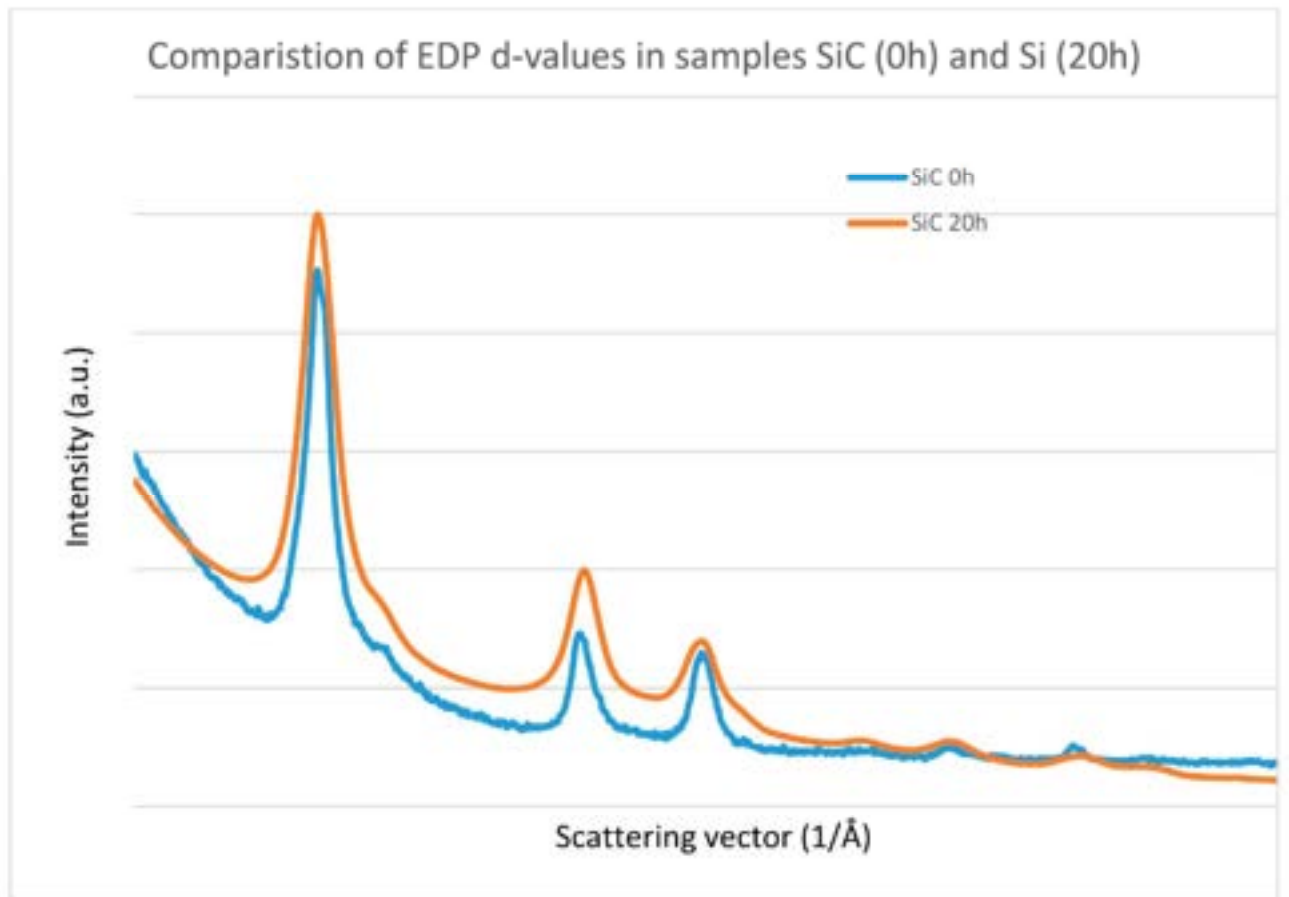
Hər iki difraksiya mənzərəsi (Şəkil 3.2.5) mərkəzi fırlanma (rotational average (RA)) ilə analiz edilmişdir, hansı ki, intensivliyin həssaslıq dərəcəsini artırır. Neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra hər iki difraksiya mənzərəsi birlikdə müqayisəli nəzərdən keçirilmişdir (Şəkil 3.2.6).



Şəkil 3.2.6 Nanokristallik SiC hissəciklərinin neytron şüalanmadan öncə (0h) və sonra (20h) müqayisəli EDP analizləri

Müqayisəli EDP analizlərində hər hansı dəyişiklik müşahidə olunmamışdır. Bu isə onu deməyə əsas verir ki neytron seli ilə şüalanma nümunələrin kristallik strukturuna az təsir edir və ya təsir etmir. Əlavə olaraq, EDP d – kəmiyyətinin müqayisəli analizləri aparılmışdır (**Şəkil 3.2.7**).

Neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra səpilmə vektorunun pik hissələrində dəyişiklik müşahidə edilməmişdir. Bu isə, bir daha müqayisəli EDP analizlərindən alınan nəticələri təstiqləyir. Lakin nəzərə almaq lazımdır ki, EDP – lə hesablanan d – kəmiyyəti rentgenlə müqayisədə az həssasdır.



Şəkil 3.2.7 Nanokristallik SiC hissəciklərinin neytron şüalanmadan öncə (0h) və sonra (20h) səpilmə vektoru ($1/\text{Å}$)

3.3 Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin struktur

analizləri

SEM və TEM texnologiyasında istifadə olunan elektron selinin dalğa xassəsinin cihaz daxilində verilən xarici potensialdan birbaşa asılıdır. Bu halda, ilk öncə dalğa xassəsinin böyütməyə etdiyi təsiri və ayırdetməni qeyd etmək çox mühümdür. İki nöqtə arasındakı ən qısa məsafənin görülmə imkanı ayırdetmə (resolution) adlandırılır. Məsələn insan gözü üçün orta ayırdetmə təqribən 0,1 – 0,2 mm kimidir və optik mikroskoplarda ayırdetmə bu qiymətdən dəfələrlə kiçikdir.

Ümumi halda mikroskopun ayırdetməsini $\delta = \frac{0,61 \lambda}{\mu \sin \beta}$ tənliyi ilə hesablaya bilərik

(burada λ – dalğa uzunluğu, μ – mühitin sındırma əmsalı və β isə böyüdücü linzada müşahidə bucağıdır) [64, c.2, s.193].

Mühitin sındırma əmsalı və müşahidə bucağının siniusunun əksər hallarda çox az dəyişdiyini nəzərə alsaq deyə bilərik ki, mikroskopun ayırılması birbaşa istifadə olunan şüanın dalğa uzunluğundan asılıdır. Belə ki, dalğa uzunluğunun artması ilə mikroskopun ayırılmasının ədədi qiyməti artır və beləliklə böyütməsi azalır. Məsələn ən yaxşı halda optik mikroskoplar üçün 550nm dalğa uzunluğundan istifadə etsək onun ayırılması üçün ən azı 300nm qiymətini alırıq ki, bu da iki atom arasında olan 0,2nm məsafəni (və ya ölçüləri nano tərtibdə olan kiçik nanohissəcikləri) görmək üçün bizə imkan vermir. SEM və TEM analizləri zamanı elektron selindən istifadə olunur və bu zaman elektronun dalğa xassəsinə malik olması cihazın ayırılma qabiliyyətinə öz təsirini göstərir. Belə ki, hissəciyin dualist

xassəsinə əsasən elektronun de- Broyl dalğa uzunluğu üçün $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{E}$ yazı bilərik.

Bu tənlik enerjisi E olan (və ya impulsu p olan) elektronun dalğa uzunluğunu ifadə edir. Qeyd edək ki, de Broylın elektronun dalğa xassəsi üçün məşhur ifadəsində

relyativistik effektlər nəzərə alınmadan son münasibətə uyğun $\lambda = \frac{1,22}{\sqrt{E}}$ ifadəsi alınır

[64, c.2, s.194]. Burada E – elektronun eV ilə ifadə olunmuş enerjisi, λ isə onun nm ilə ifadə olunmuş de – Broyl dalğa uzunluğudur. SEM və TEM daxilində elektron V

potensialı sahədə hərəkət edir və bu zaman onun eV kinetik enerjisi $eV = \frac{m_0 v^2}{2}$ kimi

təyin olunur. Biz bu tənliyə bəzi sadələşmələr apararaq elektronun impulsunu

$p = m_0 v = (2 m_0 eV)^{\frac{1}{2}}$ kimi təyin edə bilərik. Buradan biz elektron mikroskop daxilində

V potensialında hərəkət edən zaman onun dalğa uzunluğu üçün sadə halda

$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 m_0 eV}}$ ifadəsini alırıq. Bu ifadədən görünür ki, sahənin potensialı dalğa

uzunluğu ilə tərs mütənəsibdir və SEM və ya TEM cihazında potensialı dəyişərək

dalğa uzunluğunu idarə edə bilərik. Qeyd edək ki, öncəki ifadələrdə elektronun

relyativistik hərəkət etdiyini nəzərə alınmamışdır, lakin reallıqda elektron

relyativistik hərəkət edir. Belə ki, relyativistik effekt adətən TEM cihazlarında

müşahidə olunur, çünki, TEM cihazlarında 100kV – dan böyük potensiallarda elektronun sürəti təqribən işıq sürətinin yarısından böyük olur. Beləliklə bu halda biz

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0eV \left(1 + \frac{eV}{2m_0c^2}\right)}} \text{ tənliyini relyativistik hal üçün yazı bilərik [64, c.2, s.194].}$$

Relyativistik effekti nəzərə aldıqda məlum olur ki, biz tələb olunan dalğa uzunluğunda ilkin tənliy ilə hesablanmış potensialdan bir qədər çox potensial tələb olunur. Əgər biz son tənliydə potensialın 100keV olduğunu nəzərə alsaq onda TEM üçün ayrıtmanın 0,0037nm olduğunu tapırıq ki, bu da bizə atomar səviyyədə nano və anksrem ölçüləri müşahidə etməyə imkan verir. Qeyd edək ki, TEM cihazlarında SEM cihazlarına nisbətən daha çox potensialdan istifadə etmək olur və buna görə də TEM cihazlarının böyütməsi SEM cihazlarında nisbətən çoxdur.

Bir neçə metodla nanohissəciklərin ölçülərini və ölçüdən asılı olaraq paylanmasını öyrənmək olar (kiçik bucaqlardan rentgen səpilməsi (small-angle X-ray scattering (SAXS)), dinamik işıq səpilməsi (dynamic light scattering (DLS)) və s.). Hazırda ən geniş yayılmış metodlardan biri də, SEM qurğusunda səth morfolojiyası ilə nanohissəciklərin öyrənilməsidir. Eksperimental ölçmələr zamanı diffuziya kofisenti hidrodinamik radiusa Stokes – Eynşteyn tənliyi ilə çevrilə bilər [62, c.1, s.85]:

$$D = \frac{k_B T}{6 \pi \eta R_h} \quad (3.11)$$

Qaus ölçü paylanması yavaşması ilə, sferik hissəciklərin hal faktoru aşağıdakı kimi təyin oluna bilər:

$$\bar{P}(q) \propto \int_{r=0}^{\infty} dr \left(\frac{4\pi}{3} r^3 \right)^2 \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{(r-R)^2}{b^2} \right) \left(3 \frac{\sin(qr) - qr \cos(qr)}{(qr)^3} \right)^2 \quad (3.12)$$

Real təcrübələrdə SEM daxilində elektronlar nümunə səthindən əsasən elastik və

qeyri-elastik kimi iki formada səpilə bilər. Elastik səpilmə elektronun atom nüvəsi və ya orbital elektronla qarşılıqlı təsirdə olaraq, enerjisini saxlayaraq yalnız hərəkət istiqamətin dəyişməsi nəticəsində baş verir. Elektronun sabit E enerjisi üçün, elastik səpilmədə Rezerfordun diferensial effektiv en kəsiyi θ səpilmə bucağının funksiyası kimi ifadə oluna bilər:

$$dQ(\theta) = \frac{e^4 Z^2}{16 (4\pi \epsilon_0 E)^2} \frac{d\Omega}{\left[\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \left(\frac{\theta_0^2}{4}\right) \right]^2} \quad (3.13)$$

burada $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ cisim bucağının hərəkət istiqamətində θ bucağı altında səpilmədə elektronun E enerjisi daxil elementi, e elektronun yükü, Z səpilmə baş verən atomun nömrəsi, ϵ_0 dielektrik sabiti, $\frac{\theta_0^2}{4}$ ayırılma parametridir. δ isə aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$\delta = \frac{\theta_0^2}{4} = 3.4 \times 10^{-3} \frac{Z^{3/2}}{E} \quad (3.14)$$

burada, E enerjinin keV-lərlə ifadəsidir. İlk dəfə olaraq Henoc və Maurice (3.14) tənliyinin tam törəməsi izah edilmişdir. Həmçinin inteqrasiya olunmuş (3.14) tənliyindən 0-180° istiqamətlərində bütün mümkün səpilmələr üçün ümumi elastik səpilmənin effektiv en kəsiyi hesablanı bilər:

$$Q = \frac{e^4 Z^2}{4 E^2} \frac{\pi}{\delta(1 + \delta)} \quad (3.15)$$

Elektronun dalğa uzunluğu λ (3.13) tənliyində aşağıdakı kimi əvəz oluna bilər:

$$\lambda = \frac{h}{(2m_0E)^{\frac{1}{2}}}$$

Bu halda çevrilmiş tənlik aşağıdakı kimi olar:

$$dQ(\theta) = \frac{Z^2 \lambda^4}{64 \pi^4 a_0} \frac{d\Omega}{\left[\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \left(\frac{\theta_0^2}{4}\right) \right]^2} \quad (3.16)$$

burada, $a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_0 e^2} = 5.29 \times 10^{-9} \text{ sm}$ Bor radiusu, h Plank sabiti m_0 elektronun sükunət kütləsidir.

Elastik səpilmənin ehtimalı 0° – dən istənilən verilmiş θ_1 bucağına qədər səpilmənin ümumi effektiv en kəsiyi ilə normallaşdırıla bilər:

$$P(\theta) = \int_{\Omega} \left[\frac{Q(\theta)}{Q} \right] d\Omega = \int_0^{\theta_1} \left[\frac{2\pi \sin \theta Q(\theta)}{Q} \right] d\theta \quad (3.17)$$

$$P(\theta) = (1 + \delta) \left[\frac{1 - 2\delta}{1 - \cos \theta + 2\delta} \right]$$

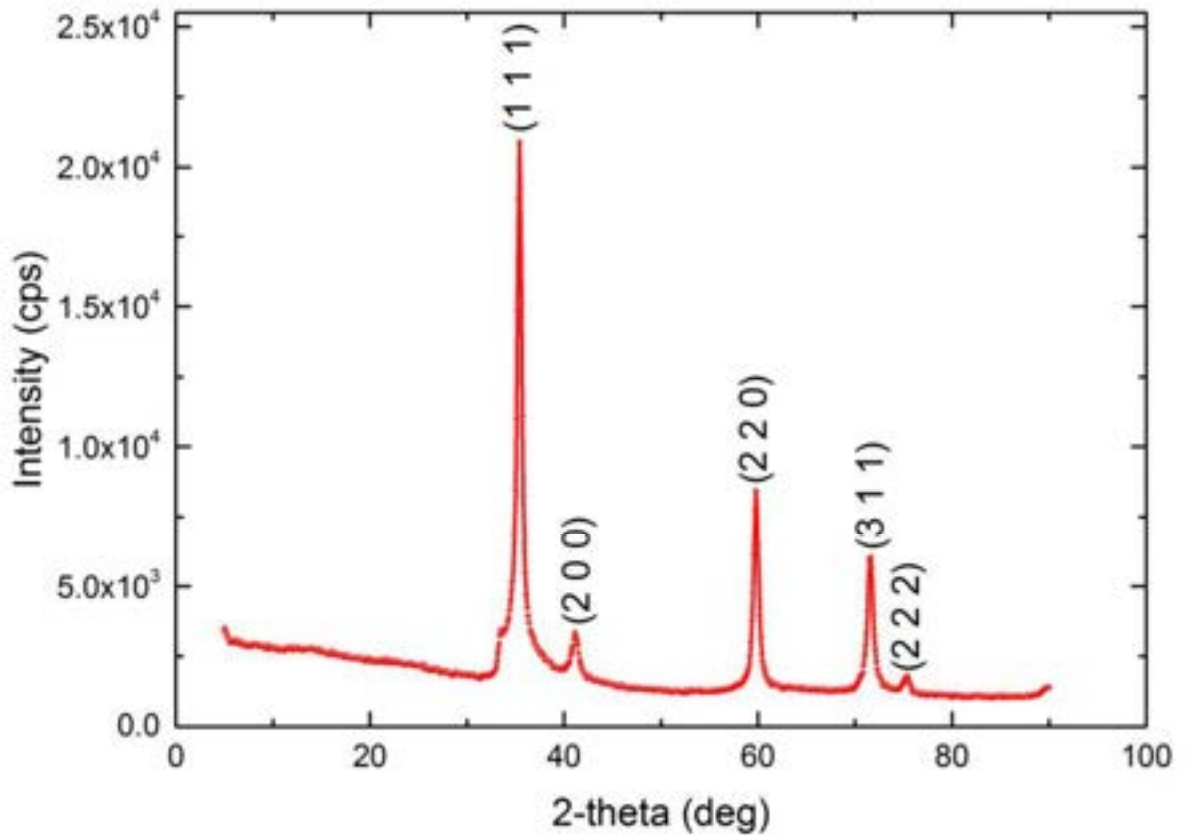
burada, $\delta = 3.4 \times 10^{-3} \frac{Z^{2/3}}{E}$

Qeyri-elastik səpilmə zamanı isə, səpilmə elektronlar istiqamətlə bərabər enerjilərini də dəyişirlər. Bu halda, bərk cism daxilində hər dx məsafədə dE enerji itkisi aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$\frac{dE}{dx} = \left(- \frac{2\pi e^4 N_0 Z^2}{AE_m} \right) \log \left(\frac{1.166 E_m}{J} \right) = -7.85 \times 10^4 \left(\frac{Z^2}{AE_m} \right) \log \left(1.166 \frac{E_m}{J} \right) \quad (3.18)$$

Burada enerji dəyişməsi keV / sm vahidi ilə verilir, J orta ionlaşma potensialı olub Berger və Seltzer tərəfindən $J = (9.76 Z + 58.5 Z^{-4.19}) \times 10^{-3} (keV)$ kimi təyin olunmuşdur.

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin strukturu rentgen difraktometrində analiz edilmişdir. Standart fəza quruluşu Bragg-Brentano geometriyasına əsasən aparılmışdır. Şəkil 3.3.1 – də nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin difraktoqramması təsvir edilmişdir. Rentgen spektrinə əsasən qəfəs parametrləri ($h k l$) təyin edilmişdir. Rentgen spektrindən məlum olmuşdur ki, ($h k l$) parametrləri tipik 3C-SiC politipinin strukturuna uyğundur və nümunə daxilində silisium karbidin digər modifikasiyalı politipləri mövcud deyil [38, s.3342; 229, s.1427; 293, s.91]. Belə ki, 3C-SiC strukturuna uyğun qəfəs parametrləri ($h k l$) = (1 1 1), (2 0 0), (2 2 0), (3 1 1) və (2 2 2) kimi təyin olunmuşdur.



Şəkil 3.3.1 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin rentgen spektri.

Mövcud spektrdə 2 θ bucaqları isə qəfəs parametrlərinə uyğun olaraq 35,38(2), 41,20(15), 59,79(2), 71,480(15) və 75,31(2) kimidir. Kubik modifikasiyalı 3C-SiC nanohissəcikləri yüksək simmetriyaya malikdir və 3C-SiC-in difraksiya xətlərində bu müşahidə olunur. Belə ki, təcrübələrdən nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri üçün qəfəs sabitləri $a=b=c=4,377565$ və qəfəs bucaqları $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ kimi müəyyən olunmuşdur.

3.4 Təcrübi nəticələrin müzakirəsi

TEM və SEM analizlərindən məlum olmuşdur ki, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində aqloremasiya maksimum 70-80 nm tərtibində olur. Neytron şüalanmadan sonra nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin səthində qalınlığı təqribən 3nm olan amorf təbəqə yaranır. Nanohissəciklərin səthinin amorflaşması az və ya çox dərəcədə aqloremasiya səbəb ola bilər. TEM cihazında çox böyütmədə kristallik qəfəsdə mövcud atomlar müşahidə olunur və materialın nanokristallik təbiəti təstiqlənmişdir. Neytronlarla şüalanmadan sonra nanomaterialda yaranan defektlər və ya klasterlər TEM təsvirlərində müşahidə olunan “ləkələrlə” izah edilmişdir. EDP analizlərindən məlum olmuşdur ki, neytronlarla şüalanma 3C-SiC nanohissəciklərinin kristallik struktura təsir etmir.

k_0 -INAA ilə nanomaterial daxilində mövcud qarışıq elementlərin radionuklidlərinin individual miqdarları təyin edilmişdir. Neytron selinin təsiri altında nano SiC – də əmələ gələn radioaktivlik müəyyənləşib və onu yaradan izotopların identifikasiyası aparılıb. Nümunələrin aktivliyinin və düşən doza miqdarının şüalanma vaxtından asılılıqları tədqiq olunub. Müəyyən olunub ki, nümunə daxilində qarışıq elementlərinin ilkin aktivlikləri və yaşama müddətləri bir – birindən kəskin fərqlənir. Aşkar olunmuş izotopların radioaktivliklərinin müşahidə vaxtından asılılıqları və qarışıq elementlərinin faizlə miqdarı təyin edilib (təqribən 0.65%). Tədqiq olunmuş nano SiC nümunələrində nisbətən böyük yarımparçalanma vaxtına malik izotoplar aşkar olunub ki, onların şüalanmadan sonrakı dövrdə nano SiC – in fiziki xassələrinin şərhində nəzərə alınması təklif olunur.

Aparılan rentgenstruktur tədqiqatları nəticəsində məlum olmuşdur ki, ($h k l$)

parametrləri tipik 3C-SiC politiyinin strukturuna uyğundur və nümunə daxilində silisium karbidin digər modifikasiyalı politipləri mövcud deyil. 3C-SiC strukturuna uyğun qəfəs parametrləri $(h k l) = (1 1 1), (2 0 0), (2 2 0), (3 1 1)$ və $(2 2 2)$ kimi təyin olunmuşdur. Qəfəs parametrlərinə uyğun 2θ bucaqları isə uyğun olaraq $35,38(2), 41,20(15), 59,79(2), 71,480(15)$ və $75,31(2)$ kimi tapılmışdır. Təcrübələrdən nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri üçün qəfəs sabitləri $a=b=c=4,377565$ və qəfəs bucaqları $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ kimi müəyyən olunmuşdur.

IV FƏSİL

NEYTRON SELİNİN NANOKRİSTALLİK 3C-SiC HİSSƏCİKLƏRİ

İLƏ QARŞILIQLI TƏSİRİNİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKALARININ

MODELLƏŞDİRİLMƏSİ

Silisiyum karbid nanohissəciklərində fərqli enerjilərdə neytronların udulma prosesi kompüter modelləşməsi ilə nəzərdən keçirilmişdir. Digər tərəfdən, fərqli enerjilərdə neytronların nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaratdığı (n, p) və (n, α) çevrilmələri və səpilməsi kompüter modelləşməsi ilə öyrənilmişdir. Neytron selinin 3C-SiC nanokristallarında yaratdığı fərqli təbiətli defektlər “Virtual NanoLab” və “Atomistix ToolKit” proqramlarında kompüter modelləşməsi ilə öyrənilmişdir. Neytron selinin təsiri ilə qəfəs atomlarında yaranan Si və C boşluqlarının mümkün ehtimalı qiymətləndirilmişdir. Neytron selinin nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri ilə qarşılıqlı təsiri zamanı aparılmış bütün modelləşmə nümunəni təşkil edən silisiyum və karbon atomları üçün ayrı-ayrılıqda tədqiq edilmişdir. Əlavə olaraq, silisiyum və karbon atomlarının müxtəlif tip izotoplarında qarşılıqlı təsir fərqli olduğundan hər bir stabil izotop üçün modelləşmə ayrı – ayrılıqda aparılmışdır. **Bu fəsildə** neytron selinin nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində zəbt olunması, səpilməsi və defekt hallarının yaranması kompüter modelləşməsi ilə nəzərdən keçirilmiş və dissertasiya işinin məqsədinə uyğun optimal neytron enerjisi qiymətləndirilmişdir. Neytron selinin nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri ilə qarşılıqlı təsirinin ümumi xarakteristikalarının modelləşdirilməsi ətraflı şərh edilmişdir. Fərqli enerjilərdə neytronların nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində udulması kompüter modelləşməsi ilə öyrənilmişdir. Neytronların nanomaterialda udulması 3C-SiC hissəciklərini təşkil edən silisiyum və karbon atomları üçün ayrı-ayrılıqda tədqiq edilmişdir. Silisiyum və karbon atomlarının fərqli tip izotoplarında udulmanın effektiv en kəsiyi fərqli olduğundan hər bir stabil izotop üçün modelləşmə ayrı – ayrılıqda aparılmışdır. Eyni

zamanda silisium və karbon atomları üçün neytron zəbtinin effektiv en kəsiyi spektrləri qarşılıqlı öyrənilmişdir.

Eyni zamanda müxtəlif enerjili neytronların nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaratdığı (n, p) və (n, α) çevrilmələri tədqiq edilmişdir. Neytron selinin təsiri altında mümkün (n, p) və (n, α) çevrilmələri 3C-SiC nanohissəciklərini təşkil edən silisium və karbon atomları üçün ayrı-ayrılıqda öyrənilmişdir. Silisium və karbon atomlarının fərqli tip izotoplarında (n, p) və (n, α) çevrilmənin mümkün ehtimalının effektiv en kəsiyi müxtəlifdir və bu səbəbdən hər bir stabil izotop ayrı – ayrılıqda nəzərdən keçirilmişdir. Silisium və karbon atomları üçün (n, p) və (n, α) çevrilmələrinin effektiv en kəsiyiklərinin spektrləri qarşılıqlı öyrənilmişdir. Anoloji hesablamalar neytron selinin nanokristallik 3C-SiC hissəciklərindən səpilməsi halı üçün də aparılmışdır. Eyni zamanda hər bir stabil izotop üçün elastik, qeyri – elastik, elastik olmayan səpilmələr və ümumi effektiv en kəsiyi nəzərdən keçirilmidir.

Digər tərəfdən, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində neytron selinin təsiri ilə yaranan fərqli təbiətli defektlər kompüter modelləşməsi ilə öyrənilmişdir. Xüsusi proqramların köməyi ilə, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fəza quruluşu araşdırılmış və neytronlarla mümkün defekt halları tədqiq edilmişdir. Eyni zamanda, defektlərin yaranması üçün neytronların daha çox ehtimallı enerjiləri hesablanmışdır. Qəfəs atomlarında neytron selinin təsiri ilə yaranan Si və C boşluqlarının mümkün ehtimalı qiymətləndirilmişdir. Neytronların enerjisinin 5MeV ətrafında nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində nöqtəvi defektlərin daha çox ehtimallı olması tapılmışdır.

4.1 Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərində neytron zəbti

Neytron zəbti ilə baş verən nüvə reaksiyaları demək olar ki, bütün nüvələrdə orta enerjili termal neytronlarla müşahidə oluna bilən prosesdir. Enerjinin 4 MeV – 10 MeV intervalında neytronların ekzotermik adsorbsiyası (Z,A) formulundan (Z,A+1) formuluna dəyişmə ilə nəticələnir. Bu halda ilkin nüvə üçün mərkəzi kütlənin kinetik enerjisi (E_n) ilə sükunət enerjisi (Q) fərqi yaranır və təyin oluna bilər. Eyni zamanda bu tip qarşılıqlı təsir proseslərində elektromaqnit emmisiyası (qamma

şüalanma) müşahidə olunur. Neytron zəbti ilə baş verən nüvə reaksiyalarında qamma parçalanma ilə yanaşı, α və ya β parçalanmalar da müşahidə oluna bilər. Rezonans hallarda Breit-Wigner formulasına ilə bucaq momenti (I) və spinə (J) əsasən zəbt olunmanın effektiv en kəsiyi aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər [1, s.3; 18, c.3, s.180]:

$$\sigma_{IJ} = \pi \lambda^2 g_J \frac{\sum_j \Gamma_{IJ(nj)} \Gamma_{IJ(pj)}}{(E_\lambda - E)^2 + \left(\frac{\Gamma_{IJ}}{2}\right)^2} \quad (4.1)$$

burada $g_J = 2J+1/2(2I+1)$, $j = |I \pm 1/2|$ və I ilkin halda hədəf nüvənin spinidir. $\Gamma_{IJ(nj)}$ neytronların enerji aralığı, $\Gamma_{IJ(pj)}$ ümumi şüalanmanın enerji aralığıdır. Ümumi enerji aralığı aşağıdakı kimi təyin oluna bilər:

$$\Gamma_{IJ} = \sum_{l,j} \Gamma_{IJ(nlj)} + \sum_{n'l'j'} \Gamma_{IJ(n'l'j')} + \Gamma_{IJ(pj)} \quad (4.2)$$

Neytronların enerji aralıkları onların enerjilərinin ədədi qiymətindən asılıdır. Aşağı enerji limitləri spin – dalğa (s-dalğa) rezonans halı üçün $\Gamma_n(E) = \Gamma_n(E_\lambda) \sqrt{E/E_\lambda}$, foton – dalğa (p-dalğa) rezonans halı üçün $\Gamma_n(E) = \Gamma_n(E_\lambda) \cdot \left(E/E_\lambda\right)^{3/2}$ kimi təyin olunur.

Aşağı enerji limiti $E \rightarrow 0$ halında

s-dalğa rezonans halı üçün: $\sigma_{n\infty} \propto 1/\sqrt{E}$

p-dalğa rezonans halı üçün: $\sigma_{p\infty} \propto \sqrt{E}$

Bir neçə rezonans hallar üçün (4.1) tənliyini aşağıdakı kimi yazı bilərik [18, c.3, s.179]:

$$\langle \sigma_{\ell J} \rangle = \pi^2 \lambda^2 g \frac{1}{D_{\ell J}} \cdot \sum_j \left\langle \frac{\Gamma_{\ell J(n\ell J)} \Gamma_{\ell J(\ell J)}}{\Gamma_{\ell J}} \right\rangle \quad (4.3)$$

J və l – in bütün qiymətlərində $\langle \sigma_{\ell J} \rangle$ cəmlənməsi ümumi effektiv en kəsiyini ifadə edir. Ümumi yanışmada, ortalama effektiv en kəsiyi (4.3) tənliyindən aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$\langle \sigma_{\ell J} \rangle = \pi^2 \lambda^2 g \sum_j \frac{\langle \Gamma_{\ell J(n\ell J)} \rangle \langle \Gamma_{\ell J(\ell J)} \rangle}{D_{\ell J} \langle \Gamma_{\ell J} \rangle} \cdot S(\alpha_{\ell J}; \alpha_1, \dots, \alpha_n) \quad (4.4)$$

burada S ölçüsüz kəmiyyətdir və $\sigma_{\ell J} = \langle \Gamma_{\ell J(\ell J)} \rangle / \langle \Gamma_{\ell J(n\ell J)} \rangle$ ilə təyin olunur. Bir neytron halı üçün S faktoru Lane və Lynn tərəfindən qiymətləndirilmişdir [181, s.557; 221, s.93].

Orta effektiv en kəsiyi J və l – in cəmlənməsi ilə aşağıdakı kimi yazıla bilər:

$$\langle \sigma(E) \rangle = \frac{\pi^2 \lambda^2}{(2I+1)} \cdot \sum_{j=|I-1/2|}^{j=I+1/2} \sum_J (2J+1) \frac{\langle \Gamma_{\ell J(\ell J)} \rangle}{D_{\ell J}} \cdot \sum_{\ell=|J-J|}^{\ell=J+J} \frac{\langle \Gamma_{\ell J(n\ell J)} \rangle / D_{\ell J}}{\langle \Gamma_{\ell J} \rangle / D_{\ell J}} \cdot S \quad (4.5)$$

Neytronların enerjisinin keV qiymətlərində, əgər $\Gamma_{\ell n} \gg \Gamma_{\ell \gamma}$ və $\Gamma_{\ell n} \approx \Gamma_{\ell}$ olarsa

$$\langle \sigma(E) \rangle_{\infty} = \sum_J (2J+1) S_{J\gamma}(E)$$

olar, burada $S_{J\gamma}(E) = \langle \Gamma_{J\gamma}(E) \rangle / D_{JJ}$ spin halında (J) ümumi radioaktivliyə müqavimət funksiyasıdır. Neytron zəbtinin qismən dalğavari analizlərində orta effektiv en kəsiyi p-dalğalarda neytronların müqavimət funksiyası ilə izah oluna bilər. Lakin bu halda, ilk öncə s-dalğa müqaviməti və sıxlıq səviyyəsi qiymətləndirilməlidir. Ümumi yanaşmada hər iki hissəcik üçün sıxlıq səviyyəsi (2J+1) kəmiyyətindən asılıdır. Kiçik xətalara nəzərə almasaq, p-dalğa müqavimət funksiyasını enerji asılılıqları ilə ortaq müqavimət funksiyası ilə izah etmək olar. Neytronların zəbti zamanı fotonüvə adsorbsiyasını Lorens funksiyası kimi ifadə etmək olar:

$$\sigma_{\gamma}(E) = \frac{\sigma_0(E_0)(\Gamma_0 E)^2}{(E^2 - E_0^2)^2 + \Gamma_0^2 E^2} \quad (4.6)$$

burada

$$\sigma_0 = 4\pi \frac{e^2 \hbar}{Mc} \left(\frac{NZ}{A} \right) \left(\frac{1 + 0.8x}{\Gamma_0} \right) \quad (4.7)$$

kimi təyin olunur. Neytron zəbti zamanı astana enerjisinin qiyməti hesablanarkən, böyük elektrik-dipol rezonansı (giant electric dipole resonance – GDR) halı çox önəmlidir. Neytron zəbti zamanı GDR yaranması neytron zəbti prosesinə güclü təsir edir. GDR rezonans bölgəsi Axel tərəfindən semiklassik yanaşma ilə öyrənilmişdir [1, s.4]. Sadə enerji yanaşması ilə, (4.6) tənliyindən alırıq:

$$\sigma(E = 7 \text{ MeV}) = 5.2 \times 10^{-3} \left(\frac{E_\gamma}{7 \text{ MeV}} \right)^5 \cdot \left(\frac{A}{100} \right)^{8/3} \cdot \left(\frac{\Gamma_G}{5 \text{ MeV}} \right) \text{ barn} \quad (4.8)$$

Proses zamanı şüalanmaya müqavimət funksiyası aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər [18, c.3, s.180]:

$$\frac{\Gamma_m(E_\gamma, J_\mu)}{D(J_\mu)} = \left(\frac{4}{3\pi} \right) \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \left(\frac{1}{Mc^2} \right) \left(\frac{NZ}{A} \right) (1 + 0.8x) \frac{\Gamma_G E_\gamma^4}{(E_\gamma^2 - E_G^2)^2 + \Gamma_G^2 E_\gamma^2} \quad (4.9)$$

$E_\gamma \approx 7 \text{ MeV}$ qəbul etsək, Axel yanaşması ilə alarıq [18, c.3, s.153; 247, s.671]:

$$\frac{\Gamma_m}{D}(\approx 7 \text{ MeV}, J_\mu) = 2.2 \times 10^{-3} \left(\frac{E_\gamma}{7 \text{ MeV}} \right)^5 \left(\frac{A}{100} \right)^{8/3} \left(\frac{\Gamma_G}{5 \text{ MeV}} \right) \quad (4.10)$$

Alınmış nəticələr adətən bir hissəcik halı ilə müqayisə olunur:

$$\frac{\Gamma_m}{D} = c \left(\frac{E_\gamma}{7 \text{ MeV}} \right)^3 \left(\frac{A}{100} \right)^{2/3} \quad (4.11)$$

Neytron zəbti zamanı GDR nəzərə alınaraq şüalanmanın orta enerji aralığı aşağıdakı kimi hesablanabilir [18, c.3, s.181]:

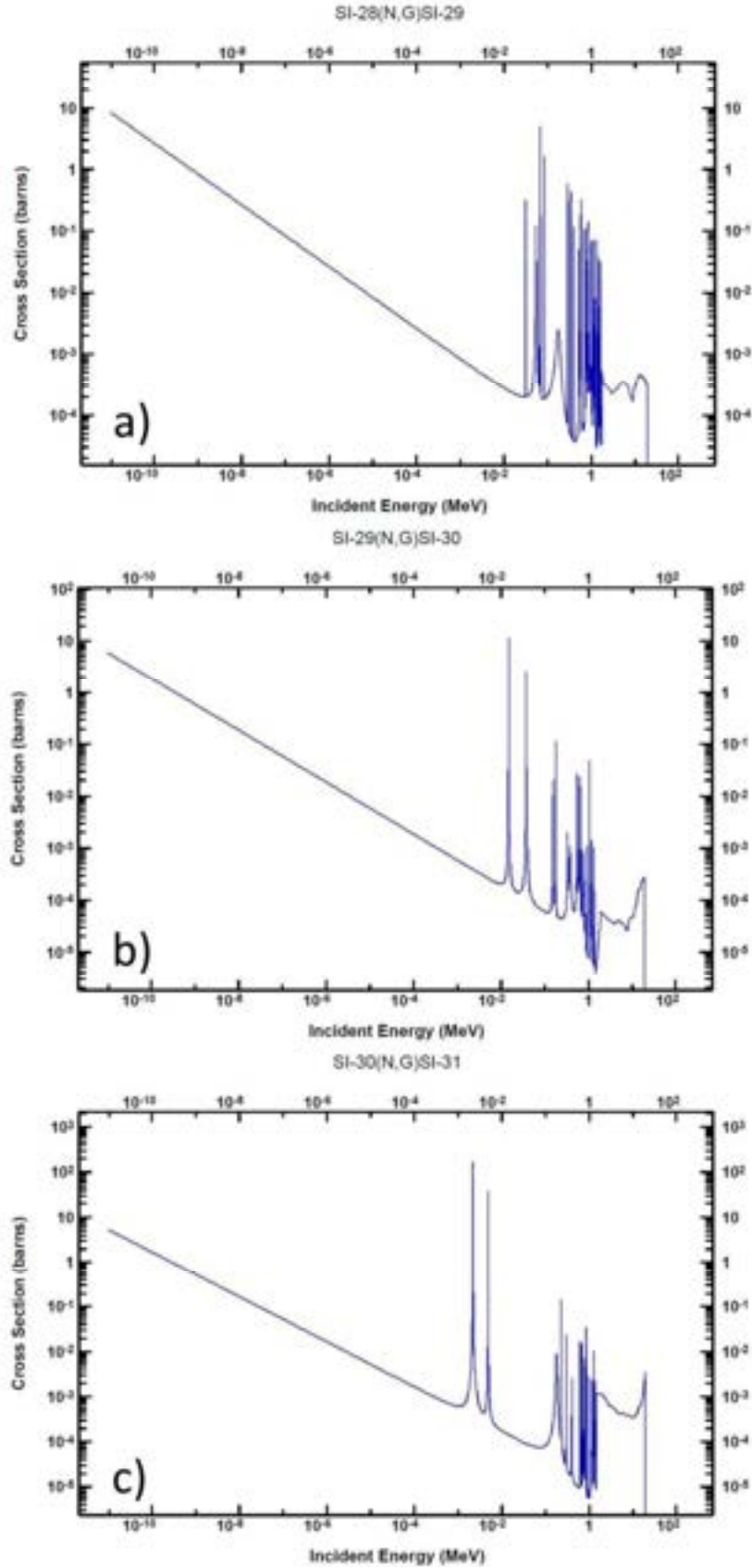
$$\langle \Gamma_\gamma \rangle (J) = \sum_\mu \langle \Gamma_\mu \rangle = \sum_{l=|J-1|}^{J+1} \int_0^{E_c} \rho[(E_c - E_\gamma), l] \langle \Gamma \rangle_\mu (E_\gamma, J) dE_\gamma = \frac{4}{3\pi} \left(\frac{NZ}{A} \right) \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \left(\frac{1 + 0.8x}{Mc^2} \right) \quad (4.12)$$

$$I = \sum_{l=|J-1|}^{J+1} \int_0^\infty \frac{\rho(E_c - E_\gamma, l)}{\rho(E_c, J)} \cdot \frac{\Gamma_0 E_\gamma^4}{(E_\gamma^2 - E_0^2)^2 + \Gamma_0^2 E_\gamma^2} dE_\gamma$$

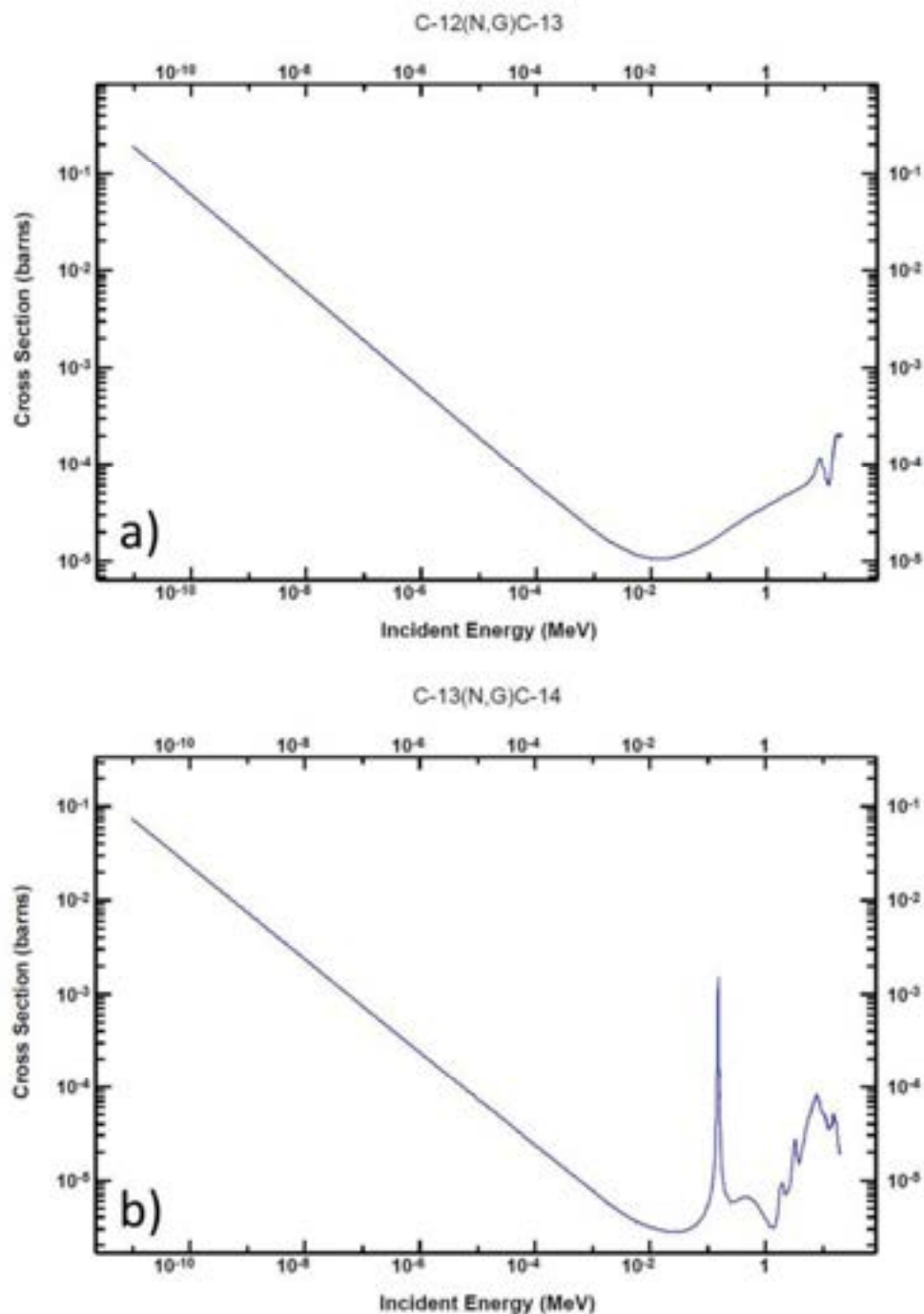
Fərqli enerjilərdə neytron selinin nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində udulması NNDC (National Nuclear Data Center) bazasından və ENDF (Evaluated Nuclear Data File) sistemlərindən istifadə olunaraq kompüter modelləşməsi ilə öyrənilmişdir. Neytron selinin nanomaterialda zəbt olunması 3C-SiC hissəciklərini təşkil edən silisium və karbon atomları üçün ayrı - ayrılıqda öyrənilmişdir [1, s.5]. Məlum olduğu kimi silisiumun üç (təbii tərkib 92.23% ²⁸Si, 4.67% ²⁹Si və 3.1% ³⁰Si izotopu) və karbonun iki (təbii tərkib 98.93% ¹²C və 1.07% ¹³C izotopu) stabil izotopu mövcuddur. Silisium və karbon atomlarının fərqli tip izotoplarında udulmanın effektiv en kəsiyi fərqli olduğundan hər bir stabil izotop üçün modelləşmə ayrı – ayrılıqda aparılmışdır. İlk olaraq silisium izotopları üçün udulmanın effektiv en kəsiyini nəzərdən keçirək (Şəkil 4.1.1). Şəkildən göründüyü kimi, ²⁸Si izotopu üçün udulmanın effektiv en kəsiyində enerjinin 10⁻² ~ 10 MeV aralıklarında rezonans hal müşahidə olunur (Şəkil 4.1.1a).

Resonans halının enerjinin təqribən 1MeV ətrafında olması onu deməyə əsas verir ki, bu enerjilərdə neytron seli ²⁸Si izotopunda daha çox udulma ehtimalına malikdir. Silisiumun digər stabil izotoplarında (²⁹Si və ³⁰Si) da rezonans hal enerjinin təqribən 0.1MeV ətrafında baş verir (Şəkil 4.1.1b və c). Lakin neytron selinin udulma spektrlərindən göründüyü kimi, silisiumun stabil izotoplarının kütlə ədədinin artması ilə, udulma spektrində müşahidə olunan rezonans hallar enerjinin azalması istiqamətində sürüşür. Başa sözlə, əgər ²⁸Si izotopunda udulma spektrində müşahidə olunan rezonans halın minimal enerjisi təqribən 5·10⁻² MeV qiymətinə uyğun gəlsə, ²⁹Si və ³⁰Si izotoplarında bu qiymət uyğun olaraq 10⁻² MeV və 10⁻³ MeV kimidir. Bu isə onu göstərir ki, silisium izotopunun kütlə ədədinin artması ilə daha aşağı enerjilərdə rezonans halların baş verməsi mümkündür. Digər tərəfdən, ¹²C və ¹³C

stabil izotoplarda neytron selinin zəbtinin effektiv en kəsiyləri fərqlidir (Şəkil 4.1.2).



Şəkil 4.1.1 Neytron selinin silisium fərqli stabil izotoplarında zəbtinin effektiv en kəsiyi spektrləri.



Şəkil 4.1.2 Neytron selinin karbonun fərqli stabil izotoplarında zəbtinin effektiv en kəsiyi spektrləri.

Qeyd edək ki, digər stabil silisium izotoplarından fərqli olaraq ^{30}Si izotopunda baş verən udulma spektri rezonansı çox böyük praktik əhəmiyyətə malikdir. Belə ki, neytron transmutasiya hadisəsinin baş verməsi üçün ^{30}Si izotopu həlledicidir. ^{30}Si izotopunda neytronlar zəbt olunaraq ^{31}Si izotopuna çevrilməsi və sonradan β -parçalana ilə ^{31}P izotopuna çarilməsi, nanokriostallik 3C-SiC hissəciklərinin fiziki xassələrində

köklü dəyişikliklərə səbəb olur. Belə ki, ^{31}P izotopu nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində p-tip aşqar olur və onun konsentrasiyası elektronika sistemlərində çox mühüm praktiki əhəmiyyətə malikdir [179, s.360; 180, s.92]. Digər tərəfdən təqdim olunan nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində neytronlarla qarşılıqlı təsir nəticəsində karbon atomlarında da neytron zəbtinin araşdırılması çox mühümdür.

Neytron selinin ^{12}C izotopları ilə qarşılıqlı təsiri zamanı demək olar ki, göstərilən enerji aralıqlarında rezonans hal müşahidə olunmur (Şəkil 4.1.2a). Lakin ^{13}C izotopunda enerjinin təqribən 10^{-1}MeV qiyməti ətrafında rezonans hal müşahidə olunur (Şəkil 4.1.2b). Bu isə onu deməyə əsas verir ki, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində 0.1MeV enerjili neytronların zəbti nəticəsində ^{14}C izotoplarının konsentrasiyası arta bilər. ^{14}C izotopu isə β -aktiv izotop olub, müəyyən vaxt keçdikdən sonra ^{14}N izotopuna çevrilir. Lakin, ^{13}C izotopunun konsentrasiyasının az olması və digər proseslərlə müqayisədə ^{14}C izotopunun alınma ehtimalının aşağı olması, aparılan eksperimentlərdə bu proseslər nəzərə alınmaması ilə nəticələnir. Belə ki, şəkil 4.1.1 və 4.1.2 – nin müqayisəsindən görünür ki, Si izotopları üçün neytron zəbtinin effektiv en kəsiyi C atomları ilə müqayisədə təqribən 10^3 dəfə çoxdur.

4.2 Neytron selinin təsiri ilə nanokristallik silisium karbid (3C-SiC)

hissəciklərdə (n, p) və (n, α) çevrilmələri

Neytron seli ilə aparılan tədqiqatlarda (n, p) və (n, α) çevrilmələri ehtimalı prosesdir və bu tip nüvə reaksiyalarının baş verə bilməsi üçün düşən neytron minimal tələb olunan enerjiyə malik olmalıdır. Ümumi yanaşmada adətən (n, p) və (n, α) çevrilmələri neytronların hədəf nüvələrdən qeyri elastik səpilməsi nəticəsində baş verir. (n, p) və (n, α) çevrilmələri zamanı hədəf nüvələrdən yüklü hissəcik çıxdığı üçün bu zaman prosesin effektiv en kəsiyində əsas rolunu Gamov faktoru oynayır (e^{-G}), hansı ki bu da birbaşa Klon baryeri ilə təyin olunur [5, s.16; 27, s.23; 42, s.1034; 104, c.1, s.20; 107, s.385; 140, s.44905; 197, s.395; 198, s.641; 350, s.193]. Belə ki, əgər iki nüvə uyğun olaraq $Z_1 \cdot e$, $Z_2 \cdot e$ yüklə və m_1 , m_2 kütləyə ((n, p) və (n, α) çevrilmələri halında hədəf nüvə və proton və ya alfa zərrəcik) malikdirsə və qarşılıqlı

təsirin kinetik enerjisi $E = \frac{\mu v^2}{2}$ kimdirsə, bu zaman qeyri-relyativistik kvant nəzəriyyəsi ilə, $r=0$ sferik koordinatlarda dalğa funksiyasının kvadratik qiyməti aşağıdakı kimi təyin oluna bilər [104, c.1, s.356; 107, s.389; 197, s.395; 198, s.640]:

$$|\Psi(0)|^2 = |\Gamma(1 + i\eta(\nu))|^2 e^{-\pi\eta(\nu)} \quad (4.13)$$

burada

$$\eta(\nu) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar \nu} = \frac{Z_1 Z_2 c \alpha}{\nu} \quad (4.14)$$

burada $\eta(\nu)$ Sommerfeld parametri, \hbar Plank sabiti, α Sommerfeld incə quruluş sabiti və c işıq sürətidir. Elementar qamma funksiyasına uyğun olaraq biz (4.13) tənliyini aşağıdakı kimi ifadə edə bilərik:

$$\begin{aligned} |\Psi(0)|^2 &= \Gamma(1 + i\eta(\nu))\Gamma^*(1 + i\eta(\nu))e^{-2\pi\eta(\nu)} = \Gamma(1 + i\eta(\nu))\Gamma(1 - i\eta(\nu))e^{-\pi\eta(\nu)} \\ &= \frac{\pi\eta(\nu)}{\sinh(\pi\eta(\nu))} e^{-\pi\eta(\nu)} = \frac{2\pi\eta(\nu)}{e^{2\pi\eta(\nu)} - 1} \end{aligned} \quad (4.15)$$

Fiziki olaraq eksponensial funksiyanın argumenti həmişə pozitiv olur və son bərabərlikdə bu hissə güclü Klon qarşılıqlı təsiri ilə vəhdət təşkil edir. Bu isə o deməkdir ki, $2\pi\eta(\nu) \gg 1$ halında çox az eksponensiallıq müşahidə oluna bilər. Buradan belə fiziki məna çıxır ki, (n, p) və (n, α) çevrilmələri zamanı itələmə qüvvəsi cazibə qüvvəsindən dəfələrlə böyükdür ki, bu da sözü gedən çevrilmələrdə təbiidir. Bu zaman potensial sərhəd asimptotik halda aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$|\Psi(0)|^2 \sim 2\pi\eta(\nu)e^{-2\pi\eta(\nu)} \quad (4.16)$$

burada eksponensial faktor gamov faktoru adlanır və son bərabərlikdə bu otensial sərhədin faktorudur.

(n, p) və (n, α) çevrilmələri zamanı effektiv en kəsiyi çox böyük əhəmiyyət kəsb edir. Bu halda effektiv en kəsiyini hesablamaq üçün (4.16) münasibətindən qeyri elastik səpilmə halında dalğa funksiyasının dəqiq qiymətinin kvadratı və ψ sahəsinin sürəti ilə proporsional olan ehtimallı axın sıxlığının nisbətini hesablamaq lazımdır [5, s.16; 107, s.381]. Beləliklə, (n, p) və (n, α) çevrilmələrinin neytron selinin sürətindən asılılığı aşağıdakı kimi xarakterizə oluna bilər:

$$\sigma(v) \sim \eta^2(v) e^{-2\pi\eta(v)} \quad (4.17)$$

Bu yanaşma imkan verir ki, aşağı enerjilərdə prosesin effektiv en kəsiyi fərqli üç enerji faktoru ilə xarakterizə olunsun:

$$\sigma_f(E) = \frac{S(E)}{E} e^{-2\pi\eta(E)} \quad (4.18)$$

burada

$$\eta(E) = \left(\frac{\mu}{2} \right)^{1/2} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{hE} \quad (4.19)$$

(4.18) ifadəsi nüvə daxilində (n, p) və (n, α) çevrilmələrinin ehtimalına uyğun olaraq effektiv en kəsiyi faktorunu xarakterizə edir. Adətən effektiv en kəsiyi faktoru sabit olur, lakin, məhdud enerji intervalında çox az enerjiden asılılıq müşahidə edilə bilər [107, s.380].

İndi isə Haubold və Fovler yanaşmaları ilə (n, p) və (n, α) çevrilmələrinin ehtimallı effektiv en kəsiklərini həzərdən keçirək [107, s.381]. (4.18) bərabərliyindən ümumi effektiv en kəsiyi bütün fəzanın bucaq elementlərinin inteqrallanması ilə aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$\sigma_y(\alpha, \beta, \gamma, \delta, p_y) = \int d\Omega \sigma_y(\alpha, \beta, \gamma, \delta, p_y, \Omega) \quad (4.20)$$

burada, daxili sərbəstlik dərəcələrinin cəmini nəzərə alsaq, alarıq:

$$\sigma_y(p_y) = \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \frac{N_i^\alpha N_j^\beta}{N_i N_j} \sigma_y(\alpha, \beta, \gamma, \delta, p_y) \quad (4.21)$$

(4.18) və (4.21) ifadələrindən $\sigma_y(p_y)$ qiymətini kütlə mərkəzi sistemində aşağıdakı kimi hesablaya bilərik [104, c.1, s.357; 107, s.390; 197, s.396; 198, s.641]:

$$\langle \sigma \rangle_y = \iint d\nu_i d\nu_j \nu \sigma_y(\nu) f_i(\nu_i) f_j(\nu_j) \quad (4.22)$$

Sadə yanaşma ilə qəbul olunsun ki, qarşılıqlı təsirdə olan hissəciklərin hər ikisinin temperaturu eynidir ($T_i=T_j=T$), bu zaman çevrilmə üçün aşağıdakı sadə bərabərlikləri yazı bilərik:

$$\nu = \nu_i - \nu_j, (m_i + m_j)V = m_i \nu_i + m_j \nu_j \quad (4.23)$$

burada ν qarşılıqlı təsirdə olan hissəciklərin nisbi sürəti, V isə kütlə mərkəzinin sürətidir. Sadə yanaşma ilə sürət elementinin transformasiyası aşağıdakı kimi ifadə olunur:

$$d\nu_i d\nu_j = d\nu dV, d\nu = 4\pi \nu^2 d\nu \quad (4.24)$$

buradan ümumi kinetik enerji aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$\frac{m_i \nu_i^2}{2} + \frac{m_j \nu_j^2}{2} = \frac{\mu \nu^2}{2} + \frac{(m_i + m_j) V^2}{2} \quad (4.25)$$

burada μ hissəciklərdə parçalanma nəticəsində azalmış kütlədir ($\mu = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}$). Əgər kütlə paylanması $f_i(v_i)$ və $f_j(v_j)$ ilə balanslıdırsa, o zaman müqayisəli daxili inteqral enerji halında yazıla bilər:

$$f_i(v_i) = \left(\frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{m_i v_i^2}{2kT}} \quad (4.26)$$

Bu halda biz (10) (n, p) və (n, α) çevrilmələrinin ehtimalını son üç tənliyi nəzərə alaraq aşağıdakı kimi ifadə edə bilərik:

$$\langle \sigma v \rangle_{ij} = \left(\frac{\mu}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int d^3v v^2 \sigma_{ij}(v) e^{-\frac{\mu v^2}{2kT}} \quad (4.27)$$

Relyativistik kinetik enerji nəzərə alınaraq dəyişənlərin inteqrasiyasından son bərabərliyi aşağıdakı kimi yazmaq olar:

$$\langle \sigma v \rangle_{ij} = \left(\frac{2}{kT} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\pi\mu} \right)^{1/2} \int_0^\infty dE \sigma_{ij}(E) e^{-\frac{E}{kT}} \quad (4.28)$$

(4.18) bərabərliyində effektiv en kəsiyi faktoru $S(E)$ nüvə rezonansı yavaşması ilə xüsusi halda aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər [107, s.387]:

$$S(E) = S(0) + S'(0)E + \frac{S''(0)E^2}{2} \quad (4.29)$$

(4.29) və (4.18) bərabərliklərini (4.28) bərabərliyində nəzərə alsaq (n, p) və (n, α) çevrilmələrinin ehtimalını aşağıdakı kimi ifadə etmək olar:

$$\langle \sigma v \rangle_\theta = \left(\frac{2}{kT} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\pi\mu} \right)^{1/2} \sum_\nu \frac{S^{(\nu)}(0)}{\nu!} \int_0^\infty dE E^\nu e^{-\frac{E}{kT} - 2\sigma\sqrt{E}} \quad (4.30)$$

Son bərabərlikdə $y=E/kT$ əvəzləməsi ilə alırıq:

$$\langle \sigma v \rangle_\theta = \left(\frac{8}{\pi\mu} \right)^{1/2} \sum_\nu \frac{1}{(kT)^{-\nu+1/2}} \frac{S^{(\nu)}(0)}{\nu!} \int_0^\infty dy e^{-y} y^\nu e^{-\frac{z}{y^{1/2}}} \quad (4.31)$$

inteqral parametrlərini

$$Ni_\nu(z) = \int_0^\infty dy e^{-y} y^\nu e^{-\frac{z}{y^{1/2}}} \quad (4.32)$$

kimi yazsaq (4.31) bərabərliyini aşağıdakı kimi alırıq:

$$\langle \sigma v \rangle_\theta = \left(\frac{8}{\pi\mu} \right)^{1/2} \sum_\nu \frac{1}{(kT)^{-\nu+1/2}} \frac{S^{(\nu)}(0)}{\nu!} Ni_\nu(z) \quad (4.33)$$

burada

$$z = 2\pi \left(\frac{\mu}{2kT} \right)^{1/2} \frac{Z_i Z_j e^2}{h} \quad (4.34)$$

İndi isə real halda daha ümumi qrşılıqlı təsir halını nəzərdən keçirək. Bu halda aşağıdakı bərabərliyi yazmaq olar:

$$Ni_s(z; p; n; m) = p \int_0^\infty dy e^{-py} y^{n\delta} e^{-\sigma y^{-\frac{n}{m}}} \quad (4.35)$$

burada $\delta = -v$ kimi qəbul olunub və son ifadə (4.32) bərabərliyinin ümumi halıdır.

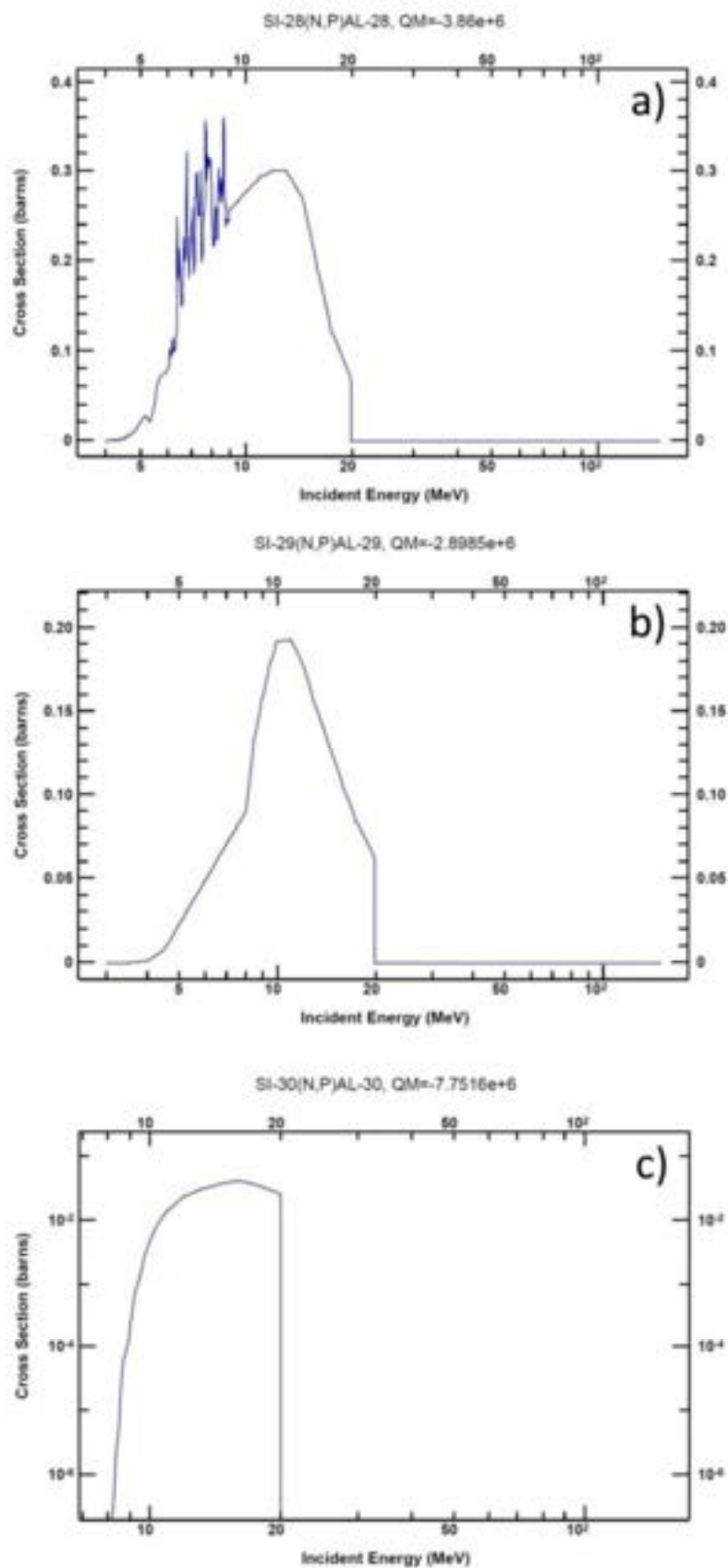
Geniş enerji aralıklarında neytron selinin nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaratdığı (n, p) və (n, α) çevrilmələri və onların ehtimallı effektiv en kəsikləri NNDC (National Nuclear Data Center) bazasından və ENDF (Evaluated Nuclear Data File) sistemlərindən istifadə olunaraq kompüter modelləşməsi ilə öyrənilmişdir. Neytron selinin nanomaterialda əmələ gətirdiyi (n, p) və (n, α) çevrilmələri 3C-SiC hissəciklərini təşkil edən silisium və karbon atomları üçün ayrı - ayrılıqda öyrənilmişdir [5, s.18]. Modelləşmə silisiumun mümkün üç (təbii tərkib 92.23% ^{28}Si , 4.67% ^{29}Si və 3.1% ^{30}Si izotopu) və karbonun mümkün iki (təbii tərkib 98.93% ^{12}C və 1.07% ^{13}C izotopu) stabil izotopu üçün aparılmışdır. Silisium və karbon atomlarının fərqli tip izotoplarında (n, p) və (n, α) çevrilmələrinin ehtimalları fərqli olduğundan hər bir stabil izotop üçün modelləşmə ayrı - ayrılıqda aparılmışdır. Qeyd etmək lazımdır ki, bütün Si izotoplarında (n, p) və (n, α) çevrilmələri enerjinin 20MeV qiymətinə qədər intensiv olduğundan modelləşmə bu qiymətə qədər aparılmışdır. İlk olaraq silisium izotopları üçün (n, p) çevrilmələrini nəzərdən keçirək (Şəkil 4.2.1). Si izotopları (n, p) çevrilmələri zamanı uyğun Al izotoplarına çevrilir. Şəkildən görüldüyü kimi, ^{28}Si izotopu üçün $^{28}\text{Si}(n,p)^{28}\text{Al}$ çevrilməsi enerjinin müəyyən intervalında intensiv olur. Lakin enerjinin minimum sərhəd qiyməti mövcuddur ki, bundan kiçik enerjilərdə (n, p) çevrilməsi baş vermir. Enerjinin bu qiyməti Q – faktoru ilə xarakterizə edilir. Q – faktorunun qiyməti nüvə çevrilməsinin tipindən asılı olaraq geniş aralıqda dəyişir. Digər tərəfdən Q – faktoru nüvə qarşılıqlı təsirinin növündən asılı olaraq pozitiv ($Q>0$, bu zaman çevrilmə exotermik olur) və neqativ ($Q<0$, bu zaman çevrilmə endotermik olur) qiymətlər ala bilər. Xüsusi halda əgər nüvə qarşılıqlı təsirini elastik olarsa, bu zaman Q – faktor sıfıra bərabər olur. (n, p) və (n, α) çevrilmələri zamanı düşən neytronların enerjisindən istifadə olunur ki, bu zaman da proses endotermik olur ($Q<0$). Başqa sözlə (n, p) və (n, α) çevrilmələri zamanı xaricdən enerji udulur (baxılan halda düşən neytronların enerjisi). Bu yanaşma ilə çox az xəta ilə deyə bilərik ki, (n, p) və (n, α) çevrilmələrinin baş verməsi üçün düşən neytronlardan tələb olunan minimal enerjisi Q – faktor

qiymətinin moduluna bərabərdir. ^{28}Si izotoplarında (n, p) çevrilmələrinin baş verməsi üçün düşən neytronların enerjisinin minimal qiyməti 3.86MeV – dir (**Şəkil 4.2.1a**). Şəkildən görüldüyü kimi, ^{28}Si izotoplarında (n, p) çevrilmələri neytronların enerjisinin təqribən 20MeV qiymətinə qədər intensiv olur. Rezonans hal isə enerjinin təqribən $8\text{MeV}-15\text{MeV}$ intervalında mövcuddur.

^{29}Si izotoplarında isə $^{29}\text{Si}(n,p)^{29}\text{Al}$ çevrilmələrinin baş verməsi üçün düşən neytronların minimal enerjisi 2.9MeV ətrafındadır (**Şəkil 4.2.1b**). ^{29}Si izotoplarında (n, p) çevrilmələri enerjinin 20MeV qiymətinə qədər intensiv olur. ^{29}Si izotopları üçün rezonans hal enerjinin təqribən 10MeV qiyməti ətrafında mövcuddur.

^{30}Si izotoplarında $^{30}\text{Si}(n,p)^{30}\text{Al}$ çevrilmələri minimal 7.75MeV enerjiyə malik neytronlarla baş verə bilər (**Şəkil 4.2.1c**). $^{30}\text{Si}(n,p)^{30}\text{Al}$ çevrilmələrində rezonans hal enerjisinin təqribən $8\text{MeV}-20\text{MeV}$ aralıklarındadır. (n, p) çevrilmələrinə uyğun olaraq, hər üç silisium izotopları üçün (n, α) çevrilmələrinin effektiv en kəsiyinin enerji asılılığı **Şəkil 4.2.2** – də təsvir edilmişdir.

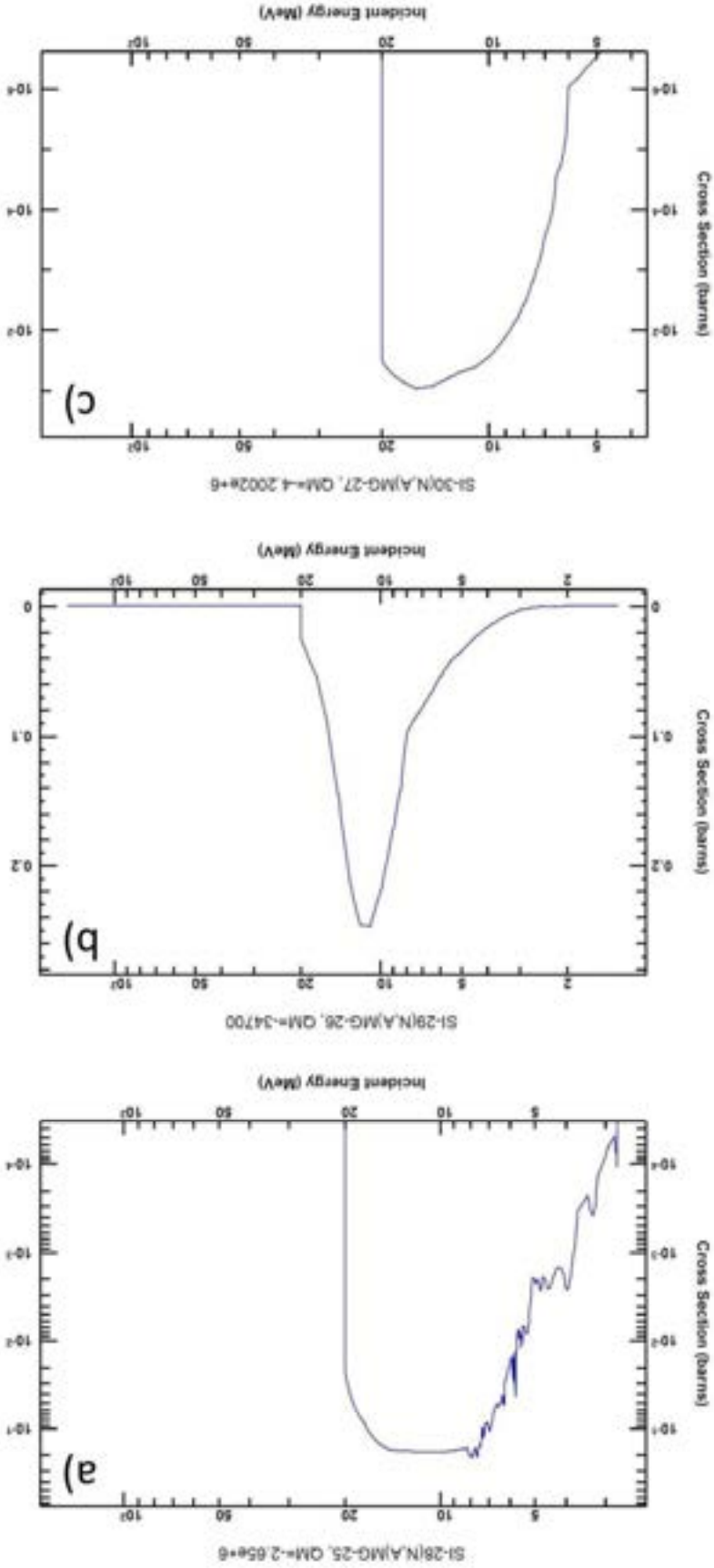
İlk olaraq qeyd etmək lazımdır ki, Si izotopları (n, α) çevrilmələrində uyğun Mg izotoplarına çevrilir. ^{28}Si izotoplarında $^{28}\text{Si}(n,\alpha)^{25}\text{Mg}$ çevrilmələrinin baş verməsi üçün düşən neytronların minimal enerjisi 2.65MeV ətrafındadır (**Şəkil 4.2.2a**). ^{28}Si izotopları üçün $^{28}\text{Si}(n,\alpha)^{25}\text{Mg}$ çevrilmələrinin rezonans halı enerjinin təqribən $5\text{MeV}-17\text{MeV}$ aralığında müşahidə olunur. ^{29}Si izotoplarında $^{29}\text{Si}(n,\alpha)^{26}\text{Mg}$ çevrilmələri zamanı tələb olunan minimal neytron enerjisi 0.035MeV – dir (**Şəkil 4.2.2b**). Enerjinin kiçik qiymətlərindən prosesin baş vermə ehtimalının olduğunu nəzərə alaraq demək olar ki, $^{29}\text{Si}(n,\alpha)^{26}\text{Mg}$ çevrilmələri digərləri ilə müqayisədə daha çox ehtimallıdır. Lakin, bu halda da, $^{29}\text{Si}(n,\alpha)^{26}\text{Mg}$ çevrilmələri zamanı rezonans hal enerjisinin 10MeV ətrafındadır. ^{30}Si izotoplarında $^{30}\text{Si}(n,\alpha)^{27}\text{Mg}$ çevrilmələrinin baş verməsi üçün 4.2MeV minimal enerjili neytronların olması tələb olunur. $^{30}\text{Si}(n,\alpha)^{27}\text{Mg}$ çevrilmələrində rezonans $10\text{MeV}-15\text{MeV}$ enerji intervalında olur. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində mövcud C atomlarının hər iki stabil izotopu üçün (n, p) və (n, α) çevrilmələri ayrı-ayrılıqda nəzərdən keçirilmişdir (**Şəkil 4.2.3**).

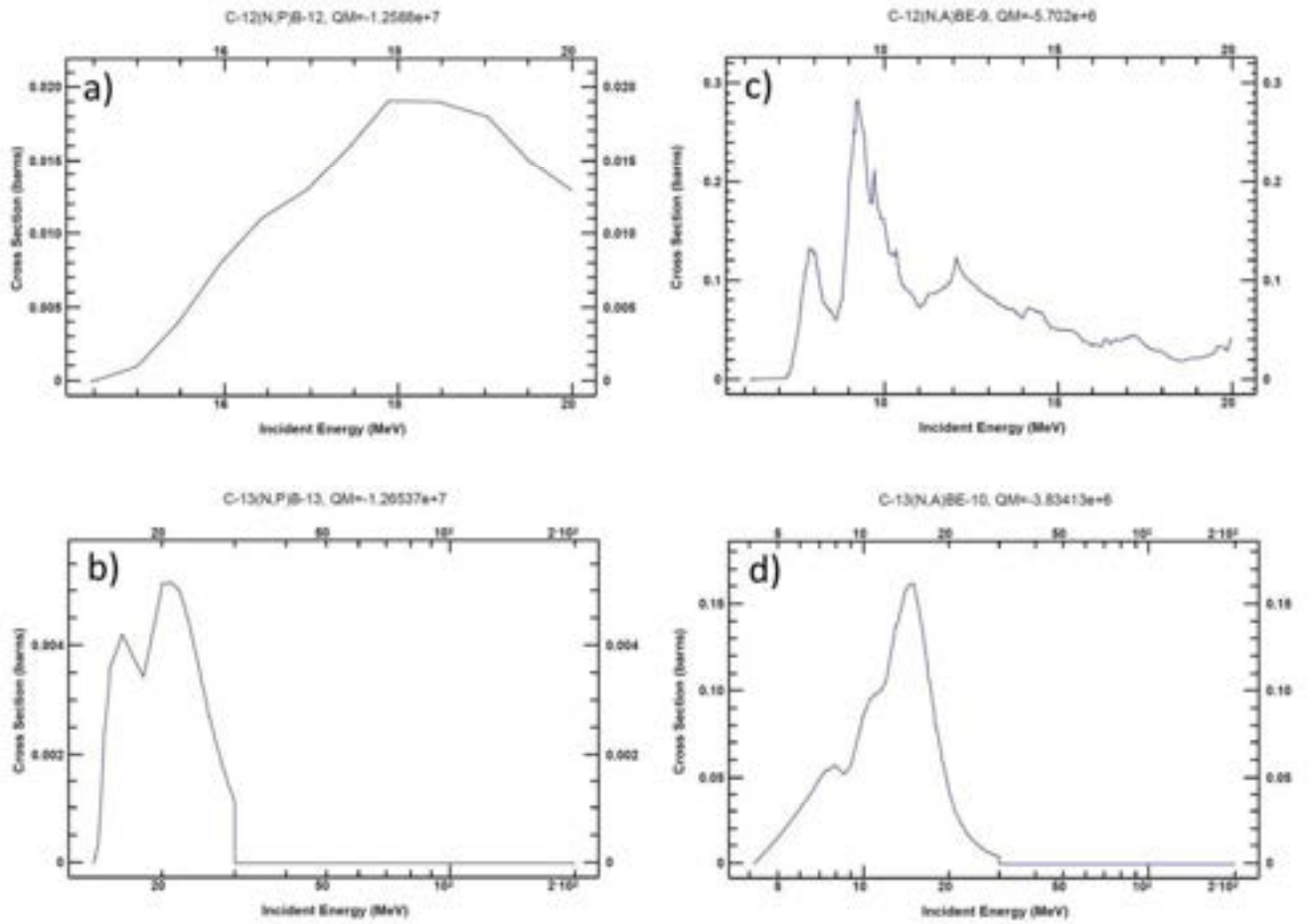


Şəkil 4.2.1 Neytron selinin silisium fərqli stabil izotoplarında yaratdığı (n, p) çevrilmələrinin effektiv en kəsiyi spektrləri.

geçirilmelerinin efektif en kesiyi spektrari.

Şakil 4.2.2 Neytron selinin silisium ferqli stabil izotoplarında yaratıldığı (n, α)





Şəkil 4.2.3 Neytron selinin karbonun fərqli stabil izotoplarında yaratdığı (n, p) və (n, α) çevrilmələrinin effektiv en kəsiyi spektrləri.

C izotopları (n, p) çevrilmələri zamanı uyğun B izotoplarına çevrilir. Bu zaman da Si izotoplarına analogi olaraq prosesdə iştirak edən neytronlardan minimal enerji tələb olunur. ^{12}C stabil izotopunun $^{12}\text{C}(n,p)^{12}\text{B}$ çevrilmələri üçün minimal 12.58MeV enerjili neytronlar tələb olunur (**Şəkil 4.2.3a**). $^{12}\text{C}(n,p)^{12}\text{B}$ çevrilmələri enerjinin 18MeV-19MeV qiymətlərində rezonans hal alır. ^{13}C stabil izotopunun $^{13}\text{C}(n,p)^{13}\text{B}$ çevrilmələri zamanı isə 12.65MeV minimal enerjili neytronlar olmalıdır (**Şəkil 4.2.3b**). $^{13}\text{C}(n,p)^{13}\text{B}$ çevrilmələrində rezonans hal enerjinin nisbətən böyük 15MeV – 25MeV qiymətlərində müşahidə olunur. C izotopları (n, α) çevrilmələri zamanı isə uyğun Be izotoplarına çevrilir. ^{12}C izotopunda $^{12}\text{C}(n,\alpha)^9\text{Be}$ çevrilmələrinin baş verməsi üçün minimal 5.7MeV enerjili neytronların olması tələb olunur (**Şəkil 4.2.3c**). $^{12}\text{C}(n,\alpha)^9\text{Be}$ çevrilmələri enerjinin 5MeV-20MeV aralığında intensivdir və rezonans hal 7MeV-10MeV enerji intervalına uyğundur. ^{13}C izotopunda $^{13}\text{C}(n,\alpha)^{10}\text{Be}$

çevrilmələri minimum 3.83MeV enerjili neytronlarla baş verir (Şəkil 4.2.3d). $^{13}\text{C}(n,\alpha)^{10}\text{Be}$ çevrilmələrində rezonans hal 8MeV-17MeV enerji aralığında mövcuddur.

4.3 Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərindən neytron

selinin səpilməsi

İlk olaraq sadə halda neytronun maddələrdən səpilməsini nəzərdən keçirək. İlkin yanaşmada neytronların materiallardan səpilmə funksiyası aşağıdakı bərabərliklə xarakterizə oluna bilər [3, s.24; 323, s.35]:

$$I(Q, t) = \left\langle \sum_{i,j} b_i b_j e^{-Q \cdot [R_j(t) - R_i(0)]} \right\rangle \quad (4.36)$$

burada, b_i və b_j uyğun olaraq i və j nömrəli atomlardan səpilmə uzunluğu, $R_i(t)$ və $R_j(t)$ uyğun olaraq t və başlanğıc hallarda (o halında) sistemin vəziyyətidir. Kütlə mərkəzinə ayrılmış (kütləyə görə mərkəzləşdirilmiş) vektorlar halında $\mathbf{R}_j(t) = \mathbf{R}_{\text{CM}}(t) + \mathbf{r}_j(t)$ kimi yazıla bilər. Əgər kütlə mərkəzinin hərəkəti daxili xaotiklikdən asılı deyilsə, o halda səpilmə funksiyası aşağıdakı kimi xarakterizə oluna bilər:

$$I(Q, t) = \left\langle e^{-Q \cdot [R_{\text{CM}}(t) - R_{\text{CM}}(0)]} \right\rangle \left\langle \sum_{i,j} b_i b_j e^{-Q \cdot [r_j(t) - r_i(0)]} \right\rangle = e^{-Q^2 D t} \left\langle \sum_{i,j} b_i b_j e^{-Q \cdot [r_j(t) - r_i(0)]} \right\rangle \quad (4.37)$$

burada, D diffuziya sabitidir və bərabərlikdə birinci həd kütlə mərkəzinin diffuziyası, ikinci hədd isə daxili hərəkətliliyi xarakterizə edir.

Ümumi yanaşmada mikroskopik halda neytronların maddələrdən səpilməsi dinamik və statistik xarakterə malikdir. Soyuq və termal neytronların dalğa uzunluğu imkan verir ki, onlar maddə daxilinə molekulyar səviyyədə nüfuz edə bilsinlər. Digər tərəfdən neytronlar yükə malik deyildir və bu səbəbdən atomlarla Klon qarşılıqlı təsirində olmayaraq daha dərin səviyyələrə nüfuz edə bilərlər. Neytronların

maddələrdən səpilməsi enerji və impulsun köçürülməsi ilə xarakterizə oluna bilər. Qarşılıqlı təsir zamanı neytronun impulsunu p_i və dalğa vektorunu k_i kimi qəbul etsək, o zaman sadə halda enerji üçün aşağıdakı bərabərliyi yazmaq olar:

$$E_i = \frac{p_i^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} \quad (4.38)$$

Neytronun nümunə ilə qarşılıqlı təsirindən sonra istiqaməti 2θ , impulsu p_f , dalğa vektoru k_f və enerjisi E_f kimi olar. Digər növ hissəciklərin səpilmə mexanizmində olduğu kimi neytron selinin də səpilməsi zamanı enerji və impulsun saxlanması ödənilir. Enerjinin saxlanması qanununa uyğun olaraq, səpilmədən əvvəl və sonra aşağıdakı bərabərliyi yazmaq olar [3, s.25]:

$$\hbar\omega = E_f - E_i = \frac{\hbar^2}{2m}(k_f^2 - k_i^2) \quad (4.39)$$

burada, E_f səpilmədən sonra və E_i səpilmədən əvvəl neytronun enerjisidir. Digər tərəfdən, impulsun saxlanması qanununa uyğun olaraq səpilmə vektoru üçün aşağıdakı bərabərliyi yazmaq olar:

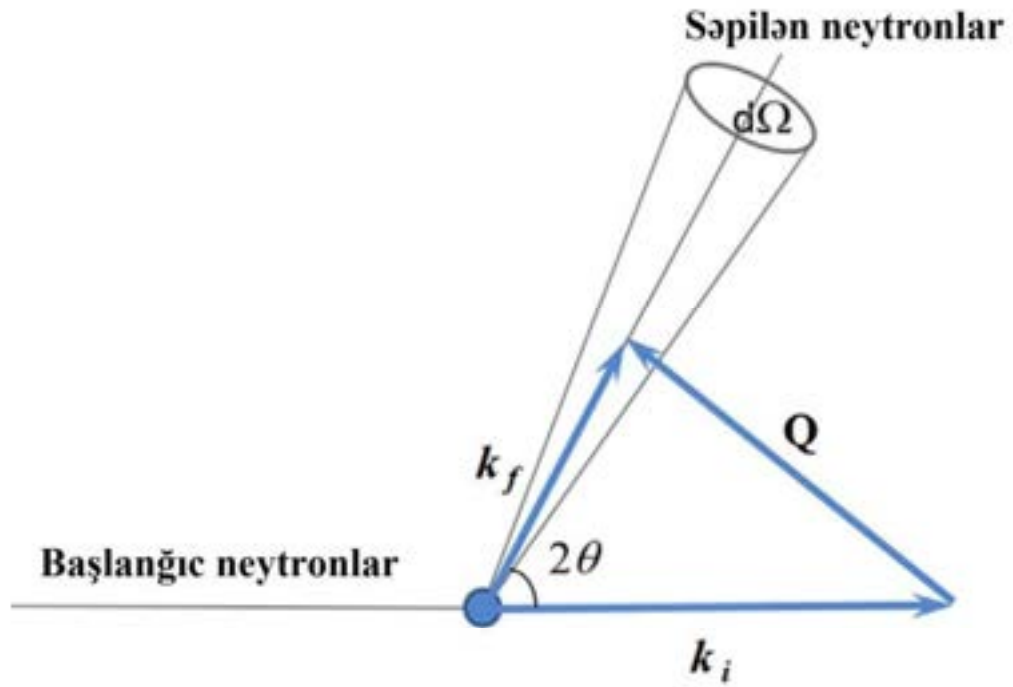
$$\hbar Q = p_f - p_i = \hbar k_f - \hbar k_i \quad (4.40)$$

Səpilmə vektoru 2θ bucağı altında səpilmədən əvvəl və sonrakı enerjilərə uyğun olaraq aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$Q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E_i + E_f - 2\sqrt{E_i E_f} \cos 2\theta] \quad (4.41)$$

Neytronun maddələrdən əsasən iki formada səpilməsi mümkündür: elastik və qeyri-elastik. Elastik səpilmə zamanı $\Delta\hbar\omega = E_f - E_i = 0$ bərabərliyi ödənilir ki, bu zaman da

neytronun enerjisində hər hansı dəyişiklik baş vermir. Digər tərəfdən qeyri-elastik səpilmə zamanı neytron enerji qazana ($\Delta h\omega > 0$) və ya itirə ($\Delta h\omega < 0$) bilər. Neytron səpilməsini xarakterizə edən əsas parametr verilmiş maddə üçün neytronların effektiv en kəziyidir. İkiqat diferensial şəkildə effektiv en kəziyi $d^2\sigma/d\Omega dE_f$ kimi xarakterizə olunur ki, bu da düşən neytronun enerjisindən E_i asılı olaraq səpilmə bucağı ($d\Omega$), E_f və E_f+dE_f aralığındakı enerji ilə təyin oluna bilər. Həndəsi olaraq səpilməni şəkil 4.6 – da olduğu kimi təsvir etmək olar.



Şəkil 4.6 Neytronların maddədən səpilməsinin həndəsi təsviri.

Səpilmədən öncə neytronun malik olduğu k_i dalğa vektoru səpilmədən sonra k_f dalğa vektoruna çevrilir. Neytronların maddə ilə qarşılıqlı təsirindən öncə və sonra uyğun olaraq λ_i və λ_f kvant halları ilə xarakterizə oluna bilərlər. Neytron və nümunənin mümkün hallarının kombinasiyası qarşılıqlı təsirdən öncə $|k_i, \lambda_i\rangle$ və sonra $\langle k_f, \lambda_f|$ Fermi qanunu ilə izah oluna bilər:

$$\sum_{k_f, \lambda_f \rightarrow d\Omega} W_{k_i, \lambda_i \rightarrow k_f, \lambda_f} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho_{k_f} \left| \langle k_f, \lambda_f | V | k_i, \lambda_i \rangle \right|^2 \quad (4.42)$$

burada, ρ_{λ_f} neytronun sıxlığı olub $d\Omega$ -da k_f ilə izah olunur və V nümunənin nüvəsi ilə neytron arasındakı qarşılıqlı təsir potensialıdır. Effektiv en kəsiyi üçün Born yaxınlaşmasından istifadə edərək ikiqat diferensial effektiv en kəsiyi üçün alırıq:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_f} = \frac{k_f}{k_i} \sum_{\lambda_i, \lambda_f} \rho_{\lambda_i} \left| \langle k_f, \lambda_f | V | k_i, \lambda_i \rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega + E_i - E_f) \quad (4.43)$$

burada, δ funksiyası qarşılıqlı təsirdən öncə (E_i) və sonra (E_f) $\hbar\omega$ enerji köçürülməsində saxlanma qanununu təmin edir. Tənlikdə ρ_{λ_i} qarşılıqlı təsirdən öncə λ_i ehtimalıdır. Bu ehtimal Bolsman paylanması ilə ifadə edilə bilər:

$$\rho_{\lambda_i} = \frac{e^{-\frac{E_i}{k_b T}}}{Z} \quad (4.44)$$

və

$$Z = \sum_{\lambda_i} e^{-\frac{E_i}{k_b T}} \quad (4.44a)$$

burada, k Bolsman sabiti, Z nümunənin bölünmə funksiyası və T nümunənin temperaturudur. Bir neçə manipulyasiyadan sonra, ikiqat diferensial səpilmənin effektiv en kəsiyi aşağıdakı kimi yazıla bilər [3, s.25; 323, s.37]:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_f} = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{k_f}{k_i} \sum_{j,i} \overline{b_j b_i} \int \left\langle e^{-Q \cdot R_i(t)} e^{-Q \cdot R_j(0)} \right\rangle e^{-\frac{E_f}{k_b T}} dt \quad (4.45)$$

burada, b_j və b_i uyğun olaraq j və i nömrəli nüvələrdən səpilmə uzunluğu, $R_i(0)$ i nömrəli nüvənin başlanğıc halda (sıfır anında) vəziyyətini xarakterizə edən operator, $R_j(t)$ j nömrəli nüvənin t anında halını xarakterizə edən operator və $\langle \rangle$ prosesin termal mühitdə olmasını bildirir. $j=i$ və $j \neq i$ hallarında $\overline{b_j b_i}$ kəmiyyətinin orta qiyməti

uyğun olaraq $\overline{b_j b_i} = \overline{b^2}$ və $\overline{b_j b_i} = \overline{b^2}$ kimi təyin olunur. $j=i$ və $j \neq i$ olduqda iki halı ümumiləşdirərək (10) bərabərliyini aşağıdakı kimi yazı bilərik:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \sigma}{d\Omega dE_f} &= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{k_f}{k_i} \overline{b^2} \sum_{j,i} \int \left\langle e^{-iQ \cdot R_i(0)} e^{-iQ \cdot R_j(t)} \right\rangle e^{-\frac{\omega t}{\hbar}} dt \\ &+ \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{k_f}{k_i} \overline{b^2} \sum_{j,i} \int \left\langle e^{-iQ \cdot R_i(0)} e^{-iQ \cdot R_j(t)} \right\rangle e^{-\frac{\omega t}{\hbar}} dt \end{aligned} \quad (4.46)$$

Kohərent (elastikəbənzər) və qeyri-kohərent (qeyri-elastikəbənzər) səpilmə hallarını izah etmək üçün (4.46) bərabərliyinin ayrı – ayrı hədlərini nəzərdən keçirmək lazımdır. Kohərent səpilmə adətən nüvələrin səthindən baş verir və bu zamanı bütün nüvələrdən səpilmələrin uzunluğu eyni (b) olur. Qeyri-kohərent səpilmədə isə, orta səpilmə uzunluğu \bar{b} proporsional olaraq ($\overline{b^2} - \overline{b^2}$) müəyyən olunur. Bütün istiqamətlərdə kohərent və qeyri-kohərent səpilmənin effektiv en kəşkləri aşağıdakı kimi təyin oluna bilər:

$$\begin{aligned} \sigma_c &= 4\pi \overline{b^2} \\ \sigma_i &= 4\pi (\overline{b^2} - \overline{b^2}) \end{aligned} \quad (4.47)$$

Bu halda ikiqat diferensial effektiv en kəşiyi aşağıdakı kimi təyin oluna bilər:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \sigma}{d\Omega dE} &= \frac{1}{8\pi^2 \hbar} \frac{k_f}{k_i} \sigma_c \sum_{j,i} \int \left\langle e^{-iQ \cdot R_i(0)} e^{-iQ \cdot R_j(t)} \right\rangle e^{-\frac{\omega t}{\hbar}} dt \\ &+ \frac{1}{8\pi^2 \hbar} \frac{k_f}{k_i} \sigma_i \sum_j \int \left\langle e^{-iQ \cdot R_i(0)} e^{-iQ \cdot R_j(t)} \right\rangle e^{-\frac{\omega t}{\hbar}} dt \\ &= \left[\frac{d^2 \sigma}{d\Omega dE} \right]_c + \left[\frac{d^2 \sigma}{d\Omega dE} \right]_i \end{aligned} \quad (4.48)$$

Adətən kohərent səpilmə, ayrı – ayrılıqda nüvələr ilə ümumi nüvələr arasında

əlaqəni izah edir. Digər tərəfdən qeyri-kohərent səpilmə individual nüvə və bir hissəcik arasındakı əlaqəni izah edir [26, s.278; 256, s.73; 302, c.3, s.218; 309, c.2, s.91; 323, s.40]. N sayda nüvənin fəza və zamana görə vəziyyətini izah edən fəza və zaman nisbi funksiyasını aşağıdakı kimi yazı bilərik [184, s.249]:

$$G(r, t) = \frac{1}{N} \sum_{i,j}^N \left\langle \delta \{r + R_i(0) - R_j(t)\} \right\rangle \quad (4.49)$$

$G(r,t)$ fəza – zaman nisbi funksiyasını fəzanın Furiye çevirmələri ilə mühitdaxili səpilmə funksiyası üçün aşağıdakı şəkildə yazı bilərik:

$$I(Q, t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(r, t) e^{iQ \cdot r} dr = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \left\langle e^{-iQ \cdot R_i(0)} e^{-iQ \cdot R_j(t)} \right\rangle \quad (4.50)$$

Zamana görə Furiye çevrilmələri ilə mühitdaxili səpilmə funksiyası (bəzən dinamik struktur faktoru da adlanır) nümunənin enerji və impulsunun funksiyası kimi xarakterizə olunur:

$$S(Q, E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} I(Q, t) e^{-\frac{Et}{\hbar}} dt \quad (4.51)$$

$S(Q, E)$ və $I(Q, t)$ hər ikisi kohərent və qeyri-kohərent hissələrə bölünür. Kohərent və qeyri-kohərent səpilmə funksiyaları arasındakı əlaqəni nəzərə alaraq ikiqat diferensial səpilmənin effektiv en kəsiyi üçün alırıq:

$$\frac{d^2 \sigma}{d\Omega dE} = \frac{\sigma_i}{4\pi\hbar} \frac{k_f}{k_i} NS_i(Q, E) + \frac{\sigma_s}{4\pi\hbar} \frac{k_f}{k_i} NS_s(Q, E) \quad (4.52)$$

Neytronların maddələrdən səpilməsi zamanı mühit daxilində neytronun maqnit momenti ilə mühitəki cütləşməmiş elektronların bucaq maqnit momenti

arasındadı qarşılıqlı təsiri nəzərə alınaraq səpilmə funksiyasını qısa şəkildə nəzərdən keçirək. Neytronun maqnit momenti $\mu_n = -\gamma\mu_N\sigma_n$ kimi təyin oluna bilər. Burada, $\gamma=1.913$ neytronun geomaqnitik dərəcəsi, $\mu_N=5.051 \times 10^{-27} \text{CT}^{-1}$ nüvə maqnetonudur. Əgər p – ni elektronun maqnit momentinin operatoru, R – i elektrondan olan məsafə vektoru qəbul etsək, o zaman Zeyman qarşılıqlı təsirindən elektromaqnit nəzəriyyəyə əsasən elektron üçün yaza bilərik [323, s.37]:

$$V_{\text{mag}}(r) = \frac{\mu_0}{2\pi} \gamma \mu_N \mu_B \sigma_n \cdot \left[\nabla \times \left(\frac{s \times R}{|R|^2} \right) + \frac{1}{\hbar} \frac{p \times \hat{R}}{|R|^2} \right] \quad (4.53)$$

burada, $\sigma_n = 2s$, Pauli spin operatoru, s isə elektronun spin operatorudur.

Elektromaqnit potensialı ikiqat diferensial effektiv en kəsiyinə daxil etsək, maqnitik səpilmənin diferensial effektiv en kəsiyini aşağıdakı kimi yaza bilərik [184, s.249]:

$$\left(\frac{d^2 \sigma}{d\Omega dE_f} \right)_{\text{mag}} = \frac{1}{\hbar} \frac{k_f}{k_i} \left(\frac{\gamma r_0 g}{2} \right)^2 |F(Q)|^2 e^{-2W} \sum_{\alpha, \beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{Q}_\alpha \hat{Q}_\beta) S^{\alpha\beta}(Q, E) \quad (4.54)$$

Bu halda səpilmə funksiyası ($S^{\alpha\beta}(Q, E)$) aşağıdakı kimi təyin oluna bilər:

$$S^{\alpha\beta}(Q, E) = \frac{1}{2\pi} \sum_{R, R'} e^{-Q \cdot (R - R')} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{Et}{\hbar}} \langle S_R^\alpha(0) S_{R'}^\beta(t) \rangle dt \quad (4.55)$$

Fərqli enerjilərdə neytron selinin nanokristallik 3C-SiC hissəciklərindən səpilməsi NNDC (National Nuclear Data Center) bazasından və ENDF (Evaluated Nuclear Data File) sistemlərindən istifadə olunaraq kompüter modelləşməsi ilə öyrənilmişdir. Neytron selinin nanomaterialdan səpilməsi 3C-SiC hissəciklərini təşkil edən silisium və karbon atomları üçün ayrı ayrılıqda öyrənilmişdir. Məlum olduğu kimi silisiumun üç (təbii tərkib 92.23% ^{28}Si , 4.67% ^{29}Si və 3.1% ^{30}Si izotopu) və

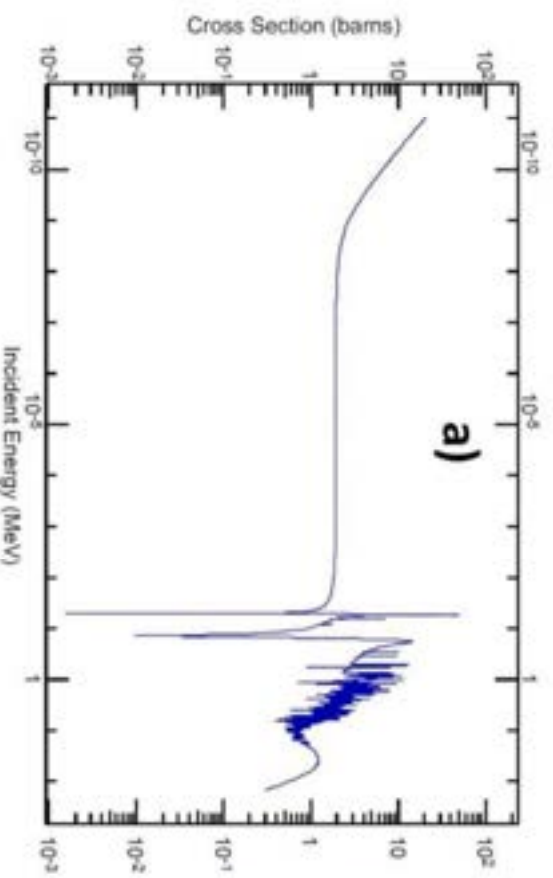
karbonun iki (təbii tərkib 98.93% ^{12}C və 1.07% ^{13}C izotopu) stabil izotopu mövcuddur. Silisium və karbon atomlarının fərqli tip izotoplarında səpilmənin effektiv en kəsiyi fərqli olduğundan hər bir stabil izotop üçün modelləşmə ayrı – ayrılıqda aparılmışdır. Eyni zamanda hər bir stabil izotop üçün elastik, qeyri – elastik, elastik olmayan səpilmələr və ümumi effektiv en kəsiyi nəzərdən keçirilməlidir. Qeyd edək ki, ümumi səpilmənin effektiv en kəsiyi (σ_s) additiv kəmiyyət olub elastik (σ_e) və qeyri – elastik (σ_i) səpilmələrin effektiv en kəsikləri cəminə ($\sigma_s = \sigma_e + \sigma_i$) bərabər olur. Elastik olmayan səpilmənin effektiv en kəsiyi (σ_{non}) dedikdə isə elastik səpilmənin effektiv en kəsiyi istisna olmaqla ümumi effektiv en kəsiyi nəzərdə tutulur. Əgər ümumi effektiv en kəsiyini σ_t qəbul etsək elastik olmayan səpilmənin effektiv en kəsiyi $\sigma_{\text{non}} = \sigma_t - \sigma_e$ kimi təyin oluna bilər. İlk olaraq ^{28}Si izotopu üçün elastik, qeyri – elastik, elastik olmayan səpilmə və ümumi effektiv en kəsiyini nəzərdən keçirək (**Şəkil 4.3.1**). Şəkildən görüldüyü kimi, ^{28}Si izotopu üçün elastik səpilmə göstərilən enerji aralıqlarında dominantlıq təşkil edir (**Şəkil 4.3.1a**).

Qeyri – elastik səpilmənin effektiv en kəsiyi isə çox zəifdir və yalnız aşağı enerjilərdə rezonans hal alır (**Şəkil 4.3.1b**). Elastik olmayan səpilmənin effektiv en kəsiyi isə elastik səpilməyə uyğun olaraq enerjinin 1MeV ətrafında rezonans hal alır və çox kiçik ehtimallıdır (**Şəkil 4.3.1c**). Ümumi effektiv en kəsiyi isə ədədi qiymətə elastik səpilmənin effektiv en kəsiyinə yaxın qiymətlər alır və enerjinin 1MeV qiyməti ətrafında rezonans hal müşahidə edilir (**Şəkil 4.3.1d**). Ümumi effektiv en kəsiyinin qiymətinin elastik səpilmənin effektiv en kəsiyinə yaxın olması və digərlərindən kəskin fərqlənməsi onu deməyə əsas verir ki, neytron seli ^{28}Si izotopundan adətən elastik səpilir. Bu isə neytron zəbti ilə izotop çevrilmələrinin aşağı ehtimallı olmasını bir daha təstiqləyir. İndi isə ^{29}Si izotopundan fərqli enerjilərdə neytron selinin səpilməsini nəzərdən keçirək (**Şəkil 4.3.2**).

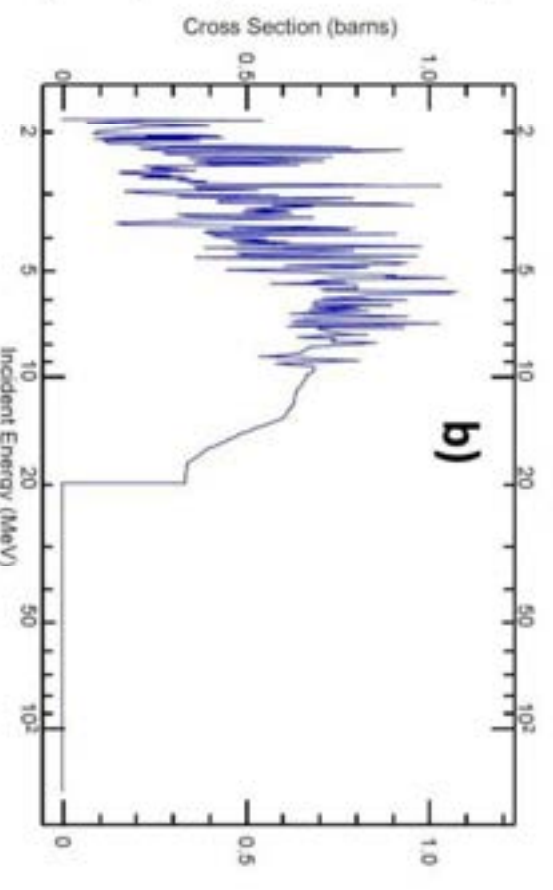
elastik olmayan (c) sepilmə və ümumi (d) effektiv en kəsiyi spektrləri.

Elastik və qeyri – elastik sepilmənin effektiv en kəsiyi ^{29}Si izotopu üçün ^{28}Si izotopuna oxşardır (**Şəkil 4.3.2a və b**). Lakin elastik olmayan sepilmənin effektiv en kəsiyi ^{28}Si izotopundan fərlidir və daha çox ehtimallıdır (**Şəkil 4.3.2c**). Ümumi effektiv en kəsiyi elastik və elastik olmayan sepilmələrin effektiv en kəsiylərinə oxşardır və ədədi qiyməti onlarla uzlaşır (**Şəkil 4.3.2d**). Bu isə onu deməyə əsas verir ki, ^{29}Si izotopu üçün əsasən elastik və elastik olmayan sepilmələr dominantlıq təşkil edir. Anoloji hallar ^{30}Si izotopunda da müşahidə olunur (**Şəkil 4.3.3**).

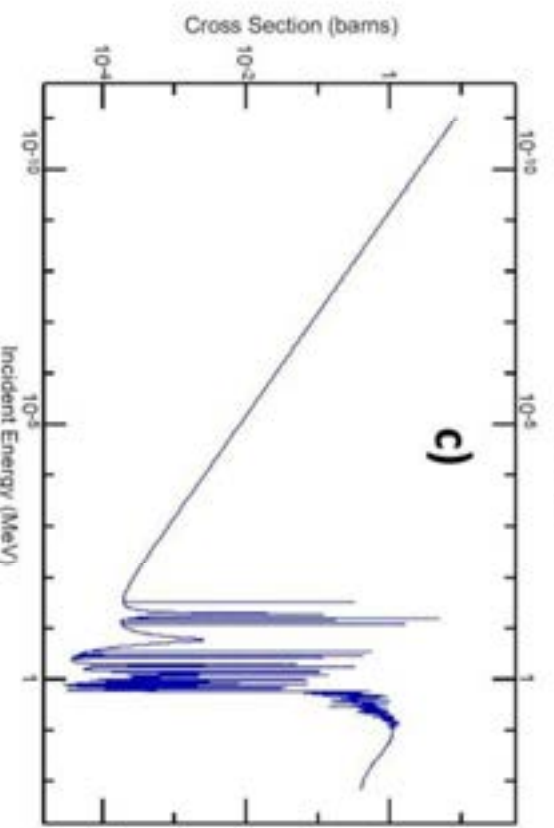
SI-28(N,EL)



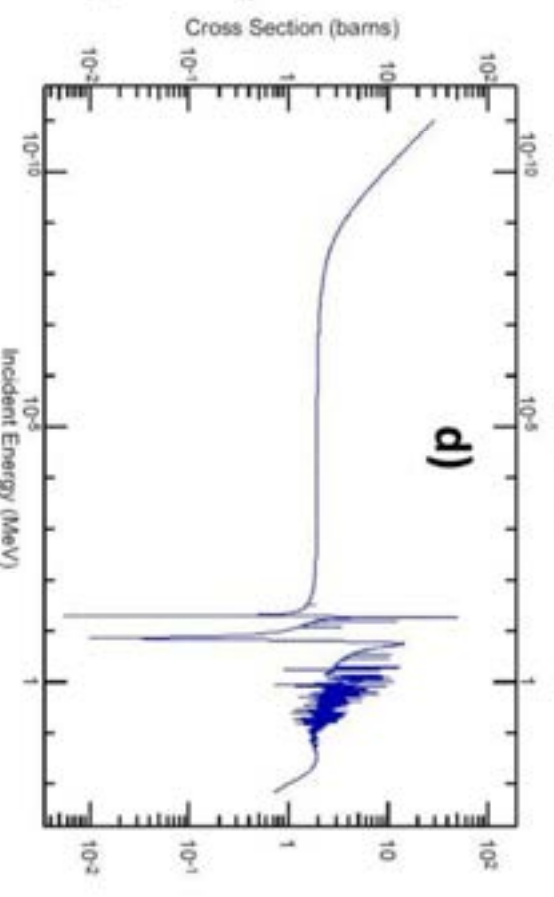
SI-28(N,INL)



SI-28(N,NON)



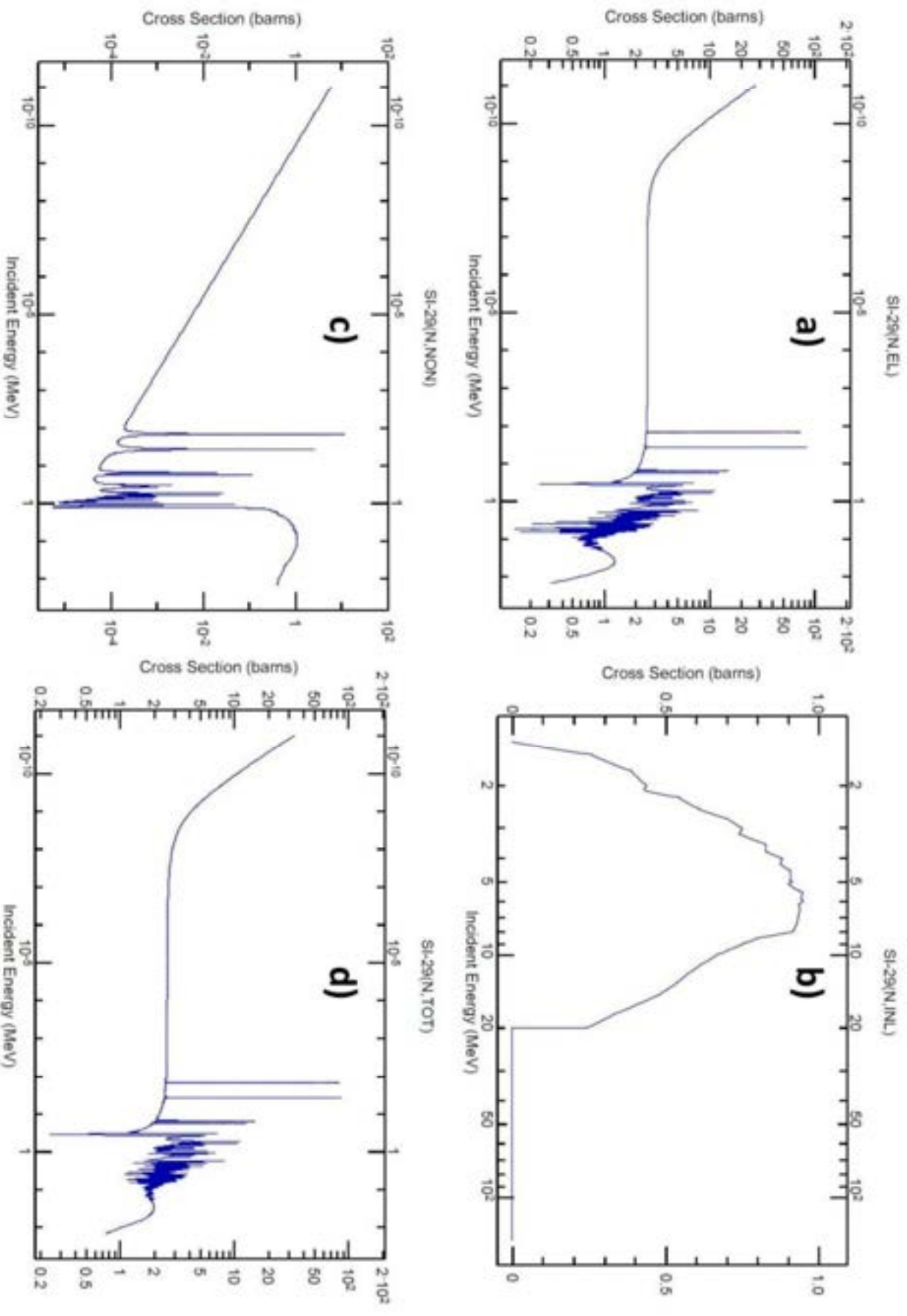
SI-28(N,TOT)



Şekil 4.3.1 Neytron selinin ^{28}Si izotopu için elastik (a), qeyri – elastik (b),

elastik olmayan (c) sepilme və ümumi (d) effektiv en kəsiyi spektrləri.

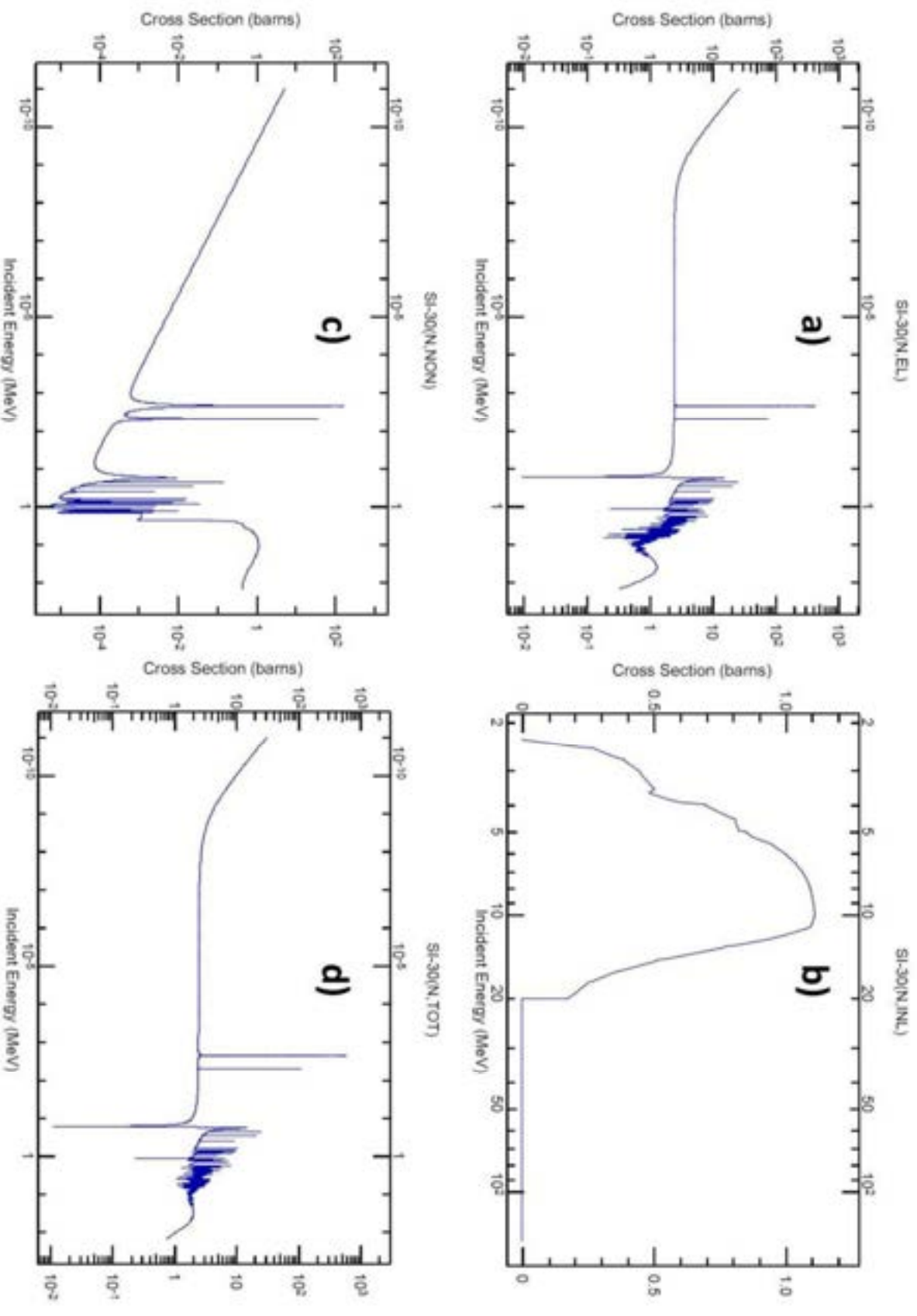
Silisiyumun digər stabil izotoplarından fəqli olaraq ^{30}Si izotopunda neytron selinin elastik və elastik olmayan sepilmələrinin effektiv en kəsiyləri ədədi qiymətce böyükdür (**Şəkil 4.3.3a və c**). Lakin, qeyri – elastik sepilmənin effektiv en kəsiyi digər stabil izotoplara uyğundur və aşağı ehtimallı prosesdir (**Şəkil 4.3.3b**). Ümumi effektiv en kəsiyinin qiyməti isə əsasən elastik və elastik olmayan sepilmələrinin effektiv en kəsiylərinin ədədi qiymətlərinə uyğundur. Bu isə o deməkdir ki, ^{30}Si izotopunda da elastik və elastik olmayan sepilmələr dominantlıq təşkil edir. Məhz elastik olmayan sepilmələrin nəticəsidir ki, neytron seli ilə nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri ^{31}P izotopları ilə aşqarlanır və fiziki xassələri inkişaf etdirilir. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərini təşkil edən ^{12}C izotopundan kiçik enerjili neytronlar üçün sepilmələrin effektiv en kəsiyləri aşağı ehtimallı proseslərdir. Məhz bu səbəbdən ^{12}C izotopu üçün nisbətən böyük enerjili neytronlar üçün sepilmələrin effektiv en kəsiyləri nəzərdən keçirilmişdir (**Şəkil 4.3.4**).



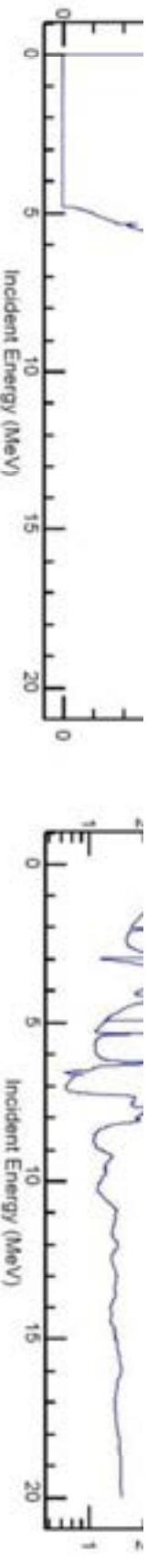
Şakil 4.3.2 Neytron selinin ^{29}Si izotopu üçün elastik (a), qeyri – elastik (b),

elastik olmayan (c) səpilmə və ümumi (d) effektiv en kəsiyi spektrləri.

Neytronların enerjisinin 20MeV - ə qədər qiymətlərində ^{12}C izotopu üçün elastik, qeyri – elastik, elastik olmayan səpilmə və ümumi effektiv en kəsiyini fərqli xarakterə malikdir. Digər izotoplarda olduğu kimi ^{12}C izotopunda da elastik səpilmənin effektiv en kəsiyi ədədi qiymətə böyükdür və daha çox ehtimallı prosesdir (**Şəkil 4.3.4a**). Qeyri – elastik və elastik olmayan səpilmələrin effektiv en kəsiklərinin ədədi qiymətləri çox kiçikdir və aşağı ehtimallı proseslərdir (**Şəkil 4.3.4b və c**). Ümumi effektiv en kəsiyinin ədədi qiyməti elastik səpilmənin ədədi qiymətinə daha çox uyğundur (**Şəkil 4.3.4d**). Lakin, elastik səpilmənin effektiv en kəsiyi ilə ümumi effektiv en kəsiyi arasında fərq mövcuddur ki, bu da prosesin əsasən elastik səpilmədən ibarət olduğunu deməyi nisbətən inkar edir. Buna baxmayaraq prosesin böyük bir hissəsi elastik səpilmənin payına düşür deyə bilərik. Həmçinin, aşağı kütlə



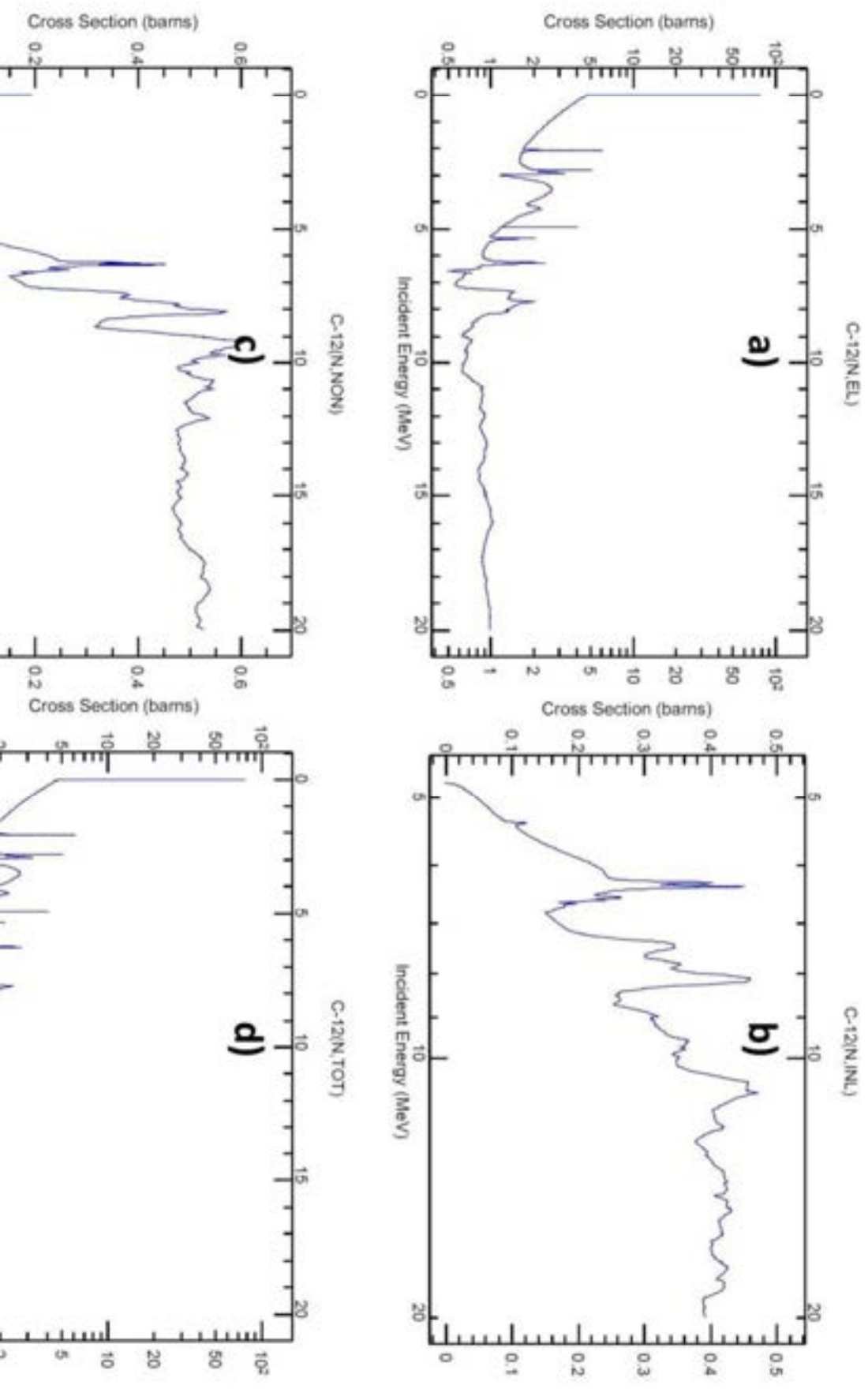
Şəkil 4.3.3 Neytron selinin ^{30}Si izotopu üçün elastik (a), qeyri – elastik (b),

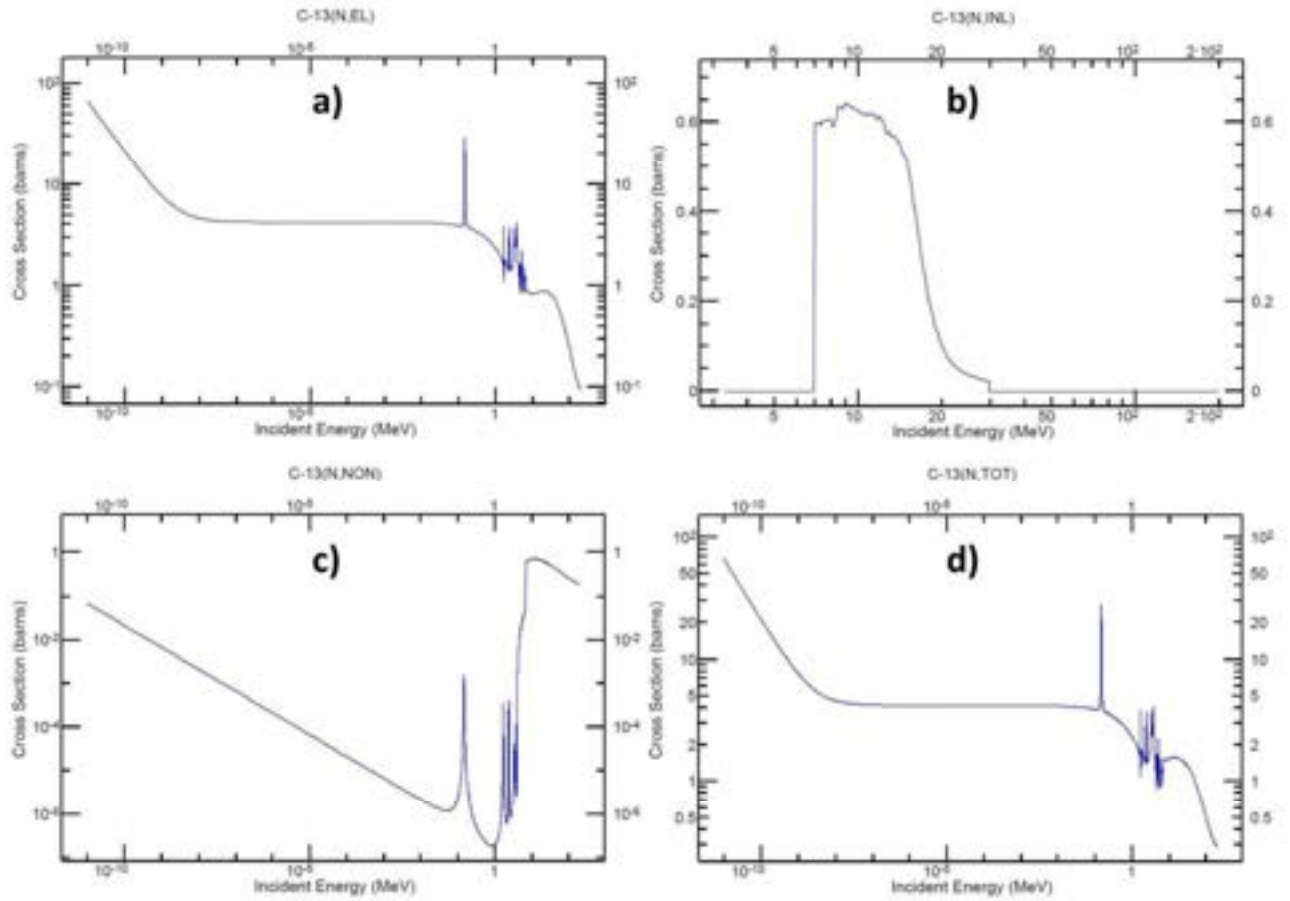


Şəkil 4.3.4 Neytron selinin ^{12}C izotopu üçün elastik (a), qeyri – elastik (b), elastik olmayan (c) səpilmə və ümumi (d) effektiv en kəsiciyi spektrləri.

Neytron selinin ^{13}C izotopu üçün effektiv en kəsiklərini nəzərdən keçirdikdə məlum olur ki, bu halda elastik səpilmə üstünlük təşkil edir (**Şəkil 4.3.5a**). Qeyri – elastik və elastik olmayan səpilmələrin effektiv en kəsiklərinin ədədi qiymətləri çox kiçikdir və ehtimallı çox az olan proseslərdir (**Şəkil 4.3.5b və c**). Ümumi effektiv en kəsiciyi isə demək olar ki, elastik səpilmənin effektiv en kəsicinə tam oxşardır (**Şəkil 4.3.5d**). Bu isə onu deməyə əsas verir ki, bu halda prosesin böyük əksəriyyəti elastik səpilmə ilə baş verir.

payına malik olmasına baxmayaraq ^{13}C izotopu üçün də effektiv en kəsiyi modeləşdiriləmidir (Şəkil 4.3.5).





Şəkil 4.3.5 Neytron selinin ^{13}C izotopu üçün elastik (a), qeyri – elastik (b), elastik olmayan (c) səpilmə və ümumi (d) effektiv en kəsiyi spektrləri.

4.4 Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərində neytron selinin təsiri ilə defekt hallarının yaranması

Neytron selinin təsiri ilə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində defekt halları bir neçə qrupa bölünür. Ümumi yanaşmada elastik və qeyri-elastik qarşılıqlı təsirin nəticəsində fərqli tip defekt halları yarana bilər. Məlum olduğu kimi elastik qarşılıqlı təsirdə neytronlar hədəf nüvələrdə enerji itirmirlər, başqa sözlə kietik enerji mübadiləsi getmir. Lakin qeyri elastik qarşılıqlı təsir zamanı neytronun kinetik enerjisi hissələrə ayrılır və aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər [2]:

$$E_1 = T_1 + T_2 + Q \quad (4.56)$$

burada, E_1 ilkin halda neytronun enerjisi, T_1 və T_2 qarşılıqlı təsirdən sonra neytron və hədəf nüvənin aldığı enerji, Q isə qeyri-elastik qarşılıqlı təsir itkisidir. Qarşılıqlı təsir zamanı hədəf atoma ötürülən enerji (T) sadə sfera yanaşması ilə aşağıdakı kimi təyin oluna bilər:

$$T = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \sin^2 \theta / 2 \quad (4.57)$$

burada, M_1 və M_2 uyğun olaraq neytronun və hədəf atomun sükunət enerjisi, E neytronun ilkin enerjisi, θ isə səpilmə bucağıdır. Hədəf atoma ötürülən enerjinin maksimum qiyməti (T_m) $\theta = 180^\circ$ olduqda alınır və bu halda son bərabərliyi aşağıdakı kimi ifadə edə bilərik:

$$T_m = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad (4.58)$$

Düşən neytronun enerjisindən asılı olaraq hədəf atoma ötürülən enerjinin müəyyən limit qiymətindən sonra qəfəs atomu öz yerindən çıxmağa başlayır və bu hal ədəbiyyatlarda “əsas yerdəyişmiş atomlar” (primary knock-on atoms — PKA) adlanır. PKA halının enerjisi hədəf materialın tipindən, neytronların səpilmə bucağından və enerjisindən asılı olaraq sıfırdan T_m - ə qədər ola bilər. Fərqli PKA enerjiləri müxtəlif tip defektlərin yaranmasına səbəb ola bilər. Ümumi yanaşmada PKA – nın yaranması müəyyən mənada Frenkel cütlərinin yaranması deməkdir. Real halda prosesdə bir neytron yox, neytron seli iştirak edir ki, bu halda da şüalanmaya perpendikulyar istiqamətdə keçən, 1sm^2 sahədə enerjisi E olan neytronların sayı neytron seli adlanır və aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$\phi = \int_0^{\infty} \varphi(E) dE \quad (4.59)$$

burada, ϕ inteqral neytron seli ($\text{m}^{-2}\text{san}^{-1}$), $\varphi(E)$ enerjisi E olan neytronların diferensial selidir (sel sıxlığı, $\text{m}^{-2}\text{san}^{-1}\text{MeV}^{-1}$). Neytron selinin material üzərində effekti adətən seçilmiş enerji aralıklı neytronlar üçün öyrənilir ki, bu da aşağıdakı kimi ifadə olunur:

$$\phi(E_a, E_b) = \int_{E_a}^{E_b} \varphi(E) dE \quad (4.60)$$

burada E_a və E_b neytronların verilmiş aralıklarda enerjilərinin sərhəddidir. Tədqiqat reaktorlarında neytronlarla şüalanma zamanı adətən neytronların enerjisi $\varphi(E)$ geniş aralıqda olur (0-20MeV). Bu səbəbdən təcrübələr aparılan neytronları adətən enerjilərinə əsasən üç qrupa bölürlər:

$$\varphi(E) = \varphi_t(E) + \varphi_{ep}(E) + \varphi_s(E) \quad (4.61)$$

burada, $\varphi_t(E)$ termal, $\varphi_{ep}(E)$ epitermal və $\varphi_s(E)$ sürətli neytronlara uyğun parametrlərdir. Şüalanma zamanı yaranan defektin təbiəti birbaşa düşən neytronun enerjisindən asılıdır. Lakin, enerji ilə yanaşı neytronlarla şüalanma zamanı hansı tip defektin yaranmasında effektiv en kəsiyi də önəmli parametrdir. Təcrübi və nəzəri effektiv en kəsikəri arasında aşağıdakı münasibəti yazmaq olar:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{k_1}{k_0} \hat{S}(Q, \omega) \quad (4.62)$$

burada, $\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega}$ təcrübələrdə uyğunlaşdırılmış ikiqat diferensial effektiv en kəsiyi, k_1 və k_0 uyğun olaraq düşən və səpilən neytronların dalğa vektorları, $\hbar Q = \hbar(k_0 - k_1)$ impuls və $\hbar\omega$ isə enerji ötürülməsini ifadə edir. Ümumi səpilmə funksiyası \hat{S} individual səpilmə funksiyaları $S_{\nu,1}$ və $S_{\nu,2}$ – nin cəminə bərabərdir [2, s.4; 65, c.3, s.60; 100, s.26; 134, c.1, s.39; 270, s.427];

$$\hat{S}(Q, \omega) = \sum_{\nu=1}^{\nu_0} \frac{\sigma_{i,\nu}}{4\pi} S_{\nu,i}(Q, \omega) + \sum_{\nu\mu=1}^{\nu_0} b_\nu b_\mu S_{\nu\mu}(Q, \omega) \quad (4.63)$$

burada, ν_0 neytronların nümündən səpilməsinin individual elementi, kohərent səpilmə uzunluğu, $\sigma_{i,\nu}$ səpilmə zamanı ν individual elementinin effektiv en kəsiyidir. Elstik səpilmə halında ümumi effektiv en kəsiyi individual və en kəsikərinin konsentrasiyasının cəmi kimi ifadə edilə bilər [65, c.3, 63; 134, c.1, s.39]:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_d = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{d,i} + \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{d,c} \quad (4.64)$$

burada

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{d,i} = \sum_{\nu=1}^{\nu_0} c_\nu \frac{\sigma_{i,\nu}^0}{4\pi} = \sum_{\nu=1}^{\nu_0} c_\nu \frac{\sigma_{i,\nu}}{4\pi} e^{-2W_\nu} \quad (4.65)$$

və

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{d,c} = \frac{1}{N} \left| \sum_{n=1}^N b_n^0 e^{iQ \cdot r_n} \right|^2 = \frac{1}{N} \left| \sum_{n=1}^N b_n e^{-W_n} e^{iQ \cdot r_n} \right|^2 \quad (4.66)$$

Son bərabərlikdə ümumi atomlar sayının cəmi (N) kristal daxilində neytronların səpilməsi zamanı ortalama defekt strukturunu xarakterizə edə bilər [65, c.3, s.63; 100, s.28; 134, c.1, s.40]. Qeyd edək ki, bir çox hallarda ionlaşdırıcı şüalanmanın yaratdığı defektlər və ya sürüşmələr müəyyən zaman intervalında termik işləndikdə rekombinasiya (bərpa) oluna bilər. Bu halda, rekombinasiya olunma funksiyaları arasındakı qarşılıqlı əlaqəni aşağıdakı kimi ifadə edə bilərik:

$$f(t) = \left(\frac{\Delta l_e}{l_0} - \frac{\Delta l_e}{l_0} \right) \left(\frac{\Delta l_e}{l_0} - \frac{\Delta l_f}{l_0} \right) \quad (4.67)$$

burada, Δl , şüalanma nəticəsində yaranan ümumi dəyişiklik, Δl , t müddətində termik işlənmədə baş verən dəyişiklik, Δl_f , uzun müddət termik işlənmədə mövcud dəyişiklik və t_0 şüalanmadan əvvəlki vəziyyəti xarakterizə edir. Beləliklə, T=0 halında $f(t)=0$ olur. Təcrübi nəticələrə əsasən $f(t)$ funksiyası aşağıdakı kimi xarakterizə oluna bilər [65, c.3, s.63; 134, c.1, s.41]:

$$f(t) = K_1 \ln \left(1 + \frac{t}{t_0} \right) \quad (4.68)$$

burada, K_1 və t_0 material tipindən və termik işlənmə temperaturundan asılı olan sabit kəmiyyətlərdir. Materialda ionlaşdırıcı şüalanma nəticəsində yaranmış defektlərin rekombinasiya olunma dərəcələri (4.67) bərabərliyindən aşağıdakı kimi qiymətləndirilə bilər:

$$\frac{df(t)}{dt} = f(t)K_2 \exp \left\{ -\frac{\delta_0 - \beta_f f(t)}{RT} \right\} \quad (4.69)$$

burada, K_2 , δ_0 və β_f temperaturdan asılı olaraq eksperimentlərdən təyin oluna bilən sabitlərdir. Neytron selinin aşağı sıxlıqlarında Frenkel cütlərinin yaranması ehtimalı limitli olur. Bu zaman defektlərin rekombinasiyası daha asan olur və bu hal Aspeling tərəfindən ətraflı öyrənilmişdir [65, c.3, s.67; 100, s.28; 134, c.1, s.40; 270, s.427]. Material daxilində ionlaşdırıcı şüalanma nəticəsində yaranmış Frenkel cütlərinin konsentrasiyası aşağıdakı bərabərliklə təyin oluna bilər [65, c.3, s.80; 100, s.31; 134, c.1, s.45]:

$$c_0 = \phi t \sigma_a \bar{N} \quad (4.70)$$

burada, ϕt neytron seli, σ_a neytronların udulmasının effektiv en kəsiyi, \bar{N} hər

neytron zəbtində yaranan mümkün Frenkel cütlərinin sayıdır. Bu halda rekombinasiya funksiyası aşağıdakı kimi təyin oluna bilər [65, c.3, s.95; 100, s.31; 134, c.1, s.40; 270, s.431]:

$$f_i(t) = \frac{c_0 - c(t)}{c_0} \quad (4.71)$$

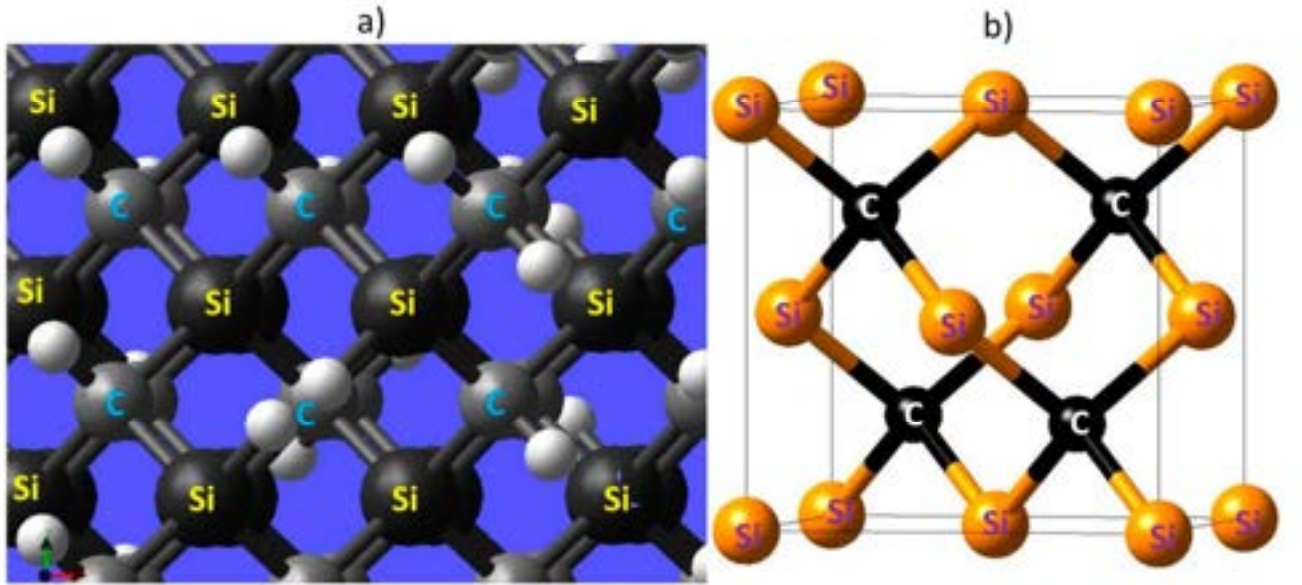
burada, $c(t)$ müəyyən t müddətində termik işlənmədən sonra mövcud Frenkel cütlərinin konsentrasiyasıdır. Aydındır ki, $t=0$ halında $f_i(t) = 0$ olar. Üçölçülü diffuziya modeli üçün rekombinasiya funksiyası aşağıdakı kimi ifadə olunur [65, c.3, s.96; 100, s.32; 134, c.1, s.41; 270, s.431]:

$$f_i(t) = 4\pi r_v \int_{r_i}^{\infty} r_v g_i(r) \exp\left\{-\frac{r_v - r}{\sqrt{4D_i t}}\right\} dr \quad (4.72)$$

burada, r_i rekombinasiya olunan boşluğun radiusu, r_v mövcud defektlər arasındakı məsafə, D_i defektlərin diffuziya kofisienti və $g_i(r)$ boşluq ətrafındakı defektlərin paylanma funksiyasıdır.

Defektlərin yaranması üçün zəruri olan (n,γ) və (n,n') nüvə reaksiyaları NNDC (National Nuclear Data Center) bazasından və ENDF (Evaluated Nuclear Data File) sistemlərindən istifadə olunaraq öyrənilmişdir. Neytron selinin nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaratdığı defektlərin təbiəti və növləri “Virtual NanoLab” və “Atomistix ToolKit” proqramlarında kompüter modelləsməsi ilə öyrənilmişdir. Neytronlarla şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində daha çox ehtimallı olan qəfəs atomlarının mümkün yerdəyişməsi (Primary Knock-on Atom - PKA), yüksək enerji təpməsi nəticəsində kaskadların yaranması, Frenkel cütləri, Si və C boşluqlarının yaranması kimi defekt halları nəzərdən keçirilmişdir [2, s.5]. İlk olaraq ümumi şəkildə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fəza quruluşunu nəzərdən keçirək (Şəkil 4.4.1). Məlumdur ki, 3C-SiC kristalları qəfəs parametrləri

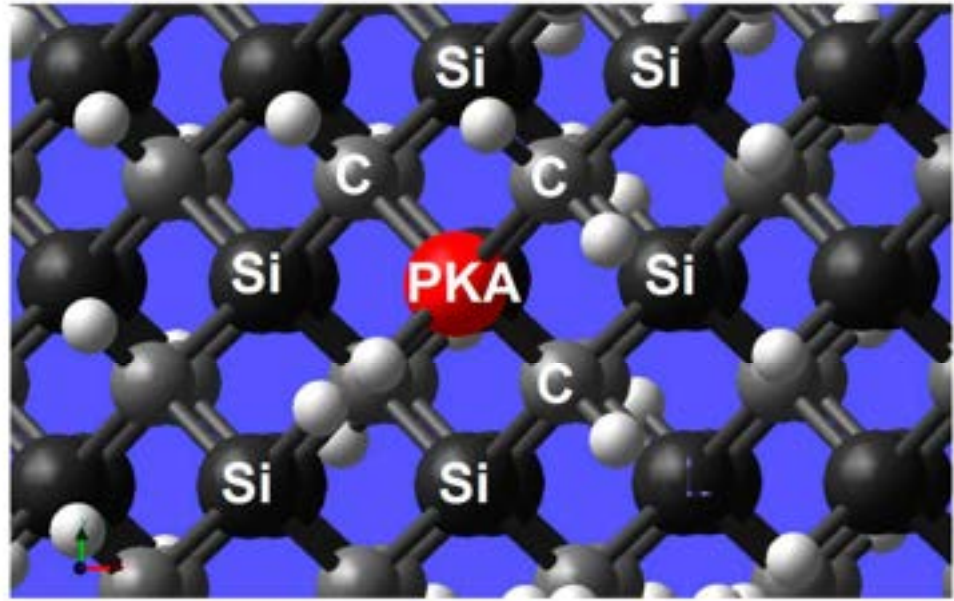
$a=b=c=4.3596\text{\AA}$ olan kubik modifikasiyadadır. Nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri Si və C atomlarının kovalent rabitələri ilə formalaşmışdır (Şəkil 4.4.1a). 3C-SiC nanokristallarını təşkil edən hər bir silisium atomları qonşu dörd karbon və eyni zamanda əksinə hər bir C atomları qonşu dörd Si atomları ilə tetraedrik formada kovalent rabitələrlə birləşmişdir (Şəkil 4.4.1b).



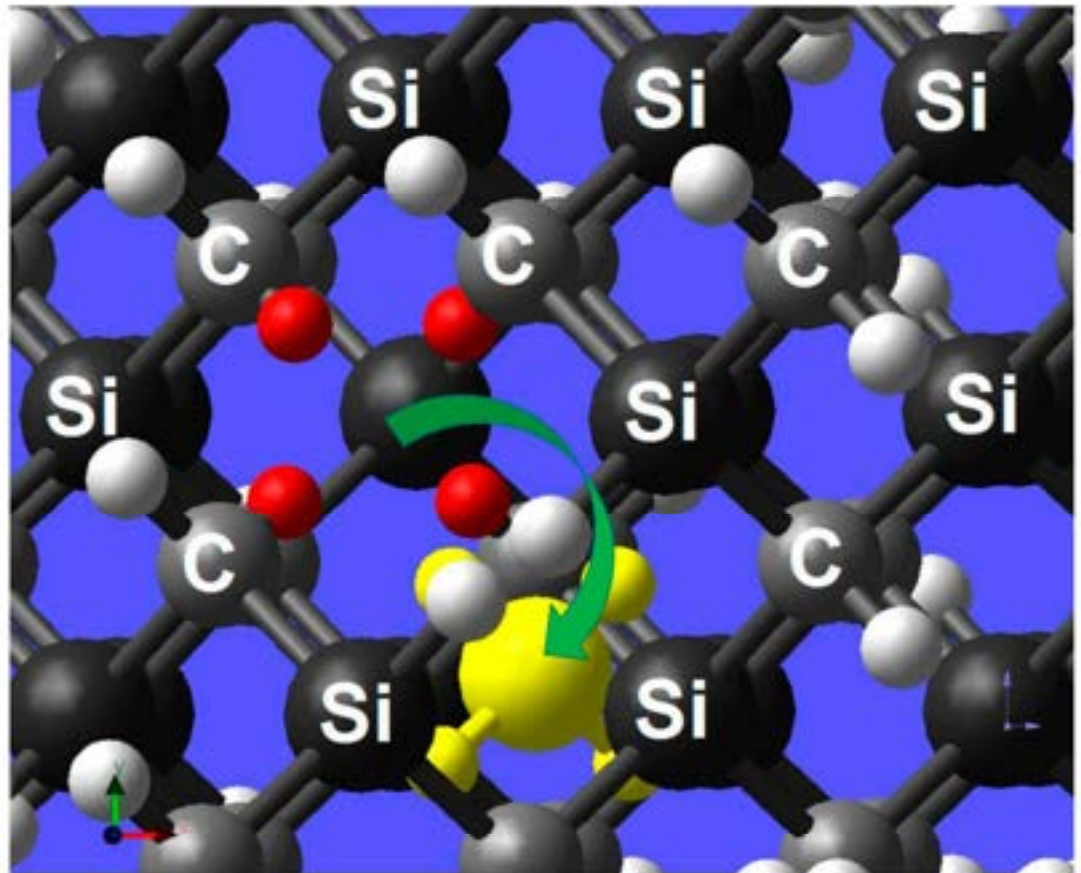
Şəkil 4.4.1 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fəza quruluşununun ümumi təsviri

Neytron seli ilə şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində mümkün PKA yaranmasını nəzərdən keçirək (Şəkil 4.4.2). PKA dedikdə neytronlarla şüalanma zamanı neytronun birbaşa qarşılıqlı təsirdə olduğu ilk atom nəzərdə tutulur. Bu halda düşən neytronların və hədəf atomun kristal qəfəsdə saxlanma enerjisindən asılı olaraq PKA bir və ya bir neçə atomu qəfəsdən çıxara bilər. Müəyyən mənada PKA hallarının yaranması Frenkel cütlərinin yaranmasına ekvivalentdir. Belə ki, bir prosesdə qəfəsi tərk edən atomlardan ilki PKA adlanır, digərləri isə ilkin atom da daxil olmaqla Frenkel cütləri yarada bilər (Şəkil 4.4.3). PKA hallarından bir neçə Frenkel cütünün yaranması üçün düşən neytronun enerjisi qəfəs atomunun enerjisinin tam misillirindən böyük olmalıdır. Başqa sözlə əgər qəfəs atomlarının sərhəd enerjisi E olarsa, PKA – dan bir neçə Frenkel cütünün yaranması

üçün neytronun minimal enerjisi $2E$, $3E$ və s. böyük olmalıdır.



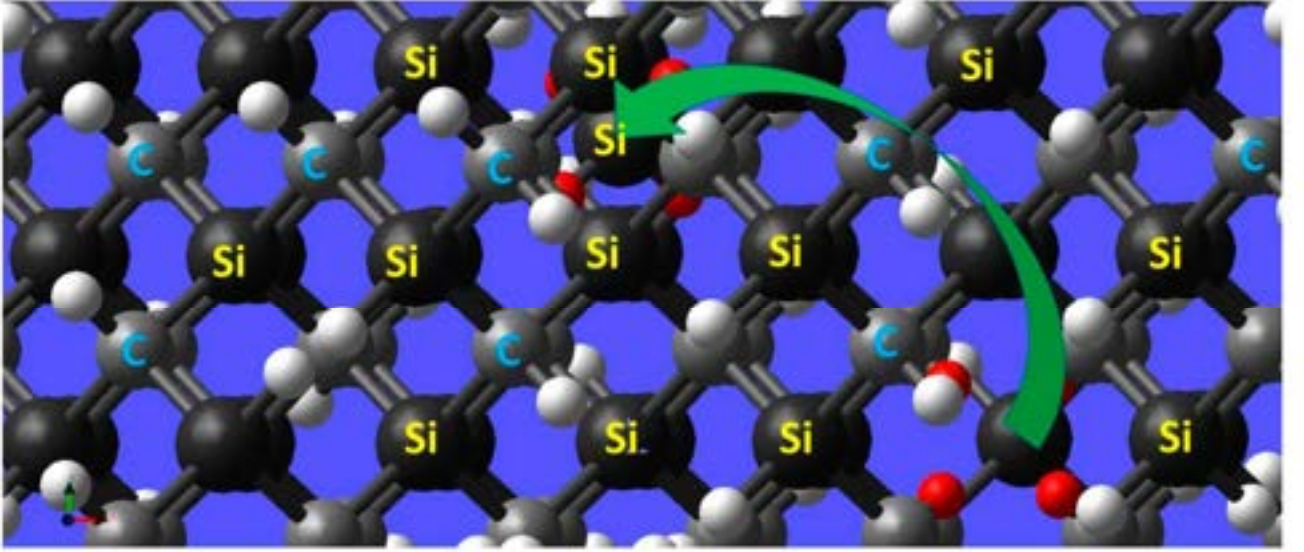
Şəkil 4.4.2 Neytron seli ilə şülanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaranan PKA halları (Si atomu təmsalində)



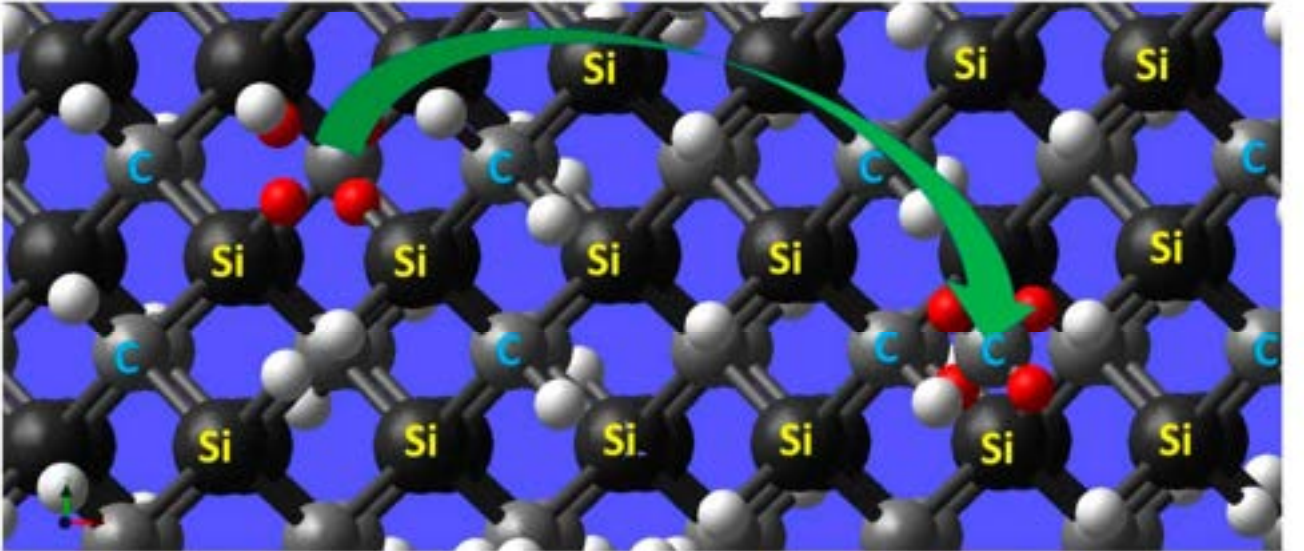
Şəkil 4.4.3 Neytron seli ilə şülanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində Frenkel cütlərinin yaranma modeli (Si atomu təmsalində)

Yaranmış Frenkel cütləri prosesdə iştirak edən neytronların enerjisindən asılı olaraq stabil və ya qeyri stabil olmaqla C və Si atomları vasitəsi ilə mümkün ola bilər. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində Si və C atomları vasitəsi ilə mümkün Frenkel cütlərinin yaranmasına ekvivalent olaraq boşluq halların (Si və ya C vakansiyaları) yaranması mümkündür (Şəkil 4.4.4).

Silicon vacancy



Carbon vacancy

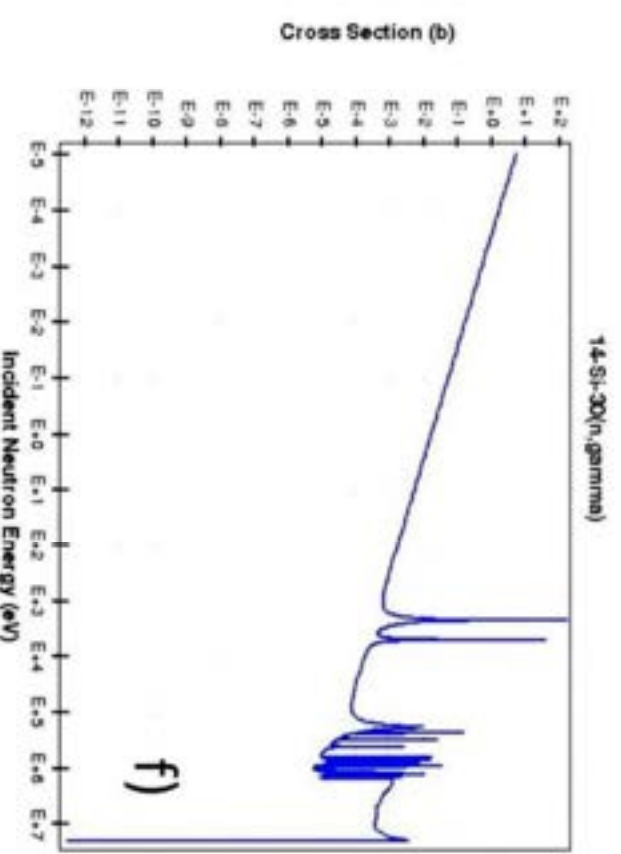
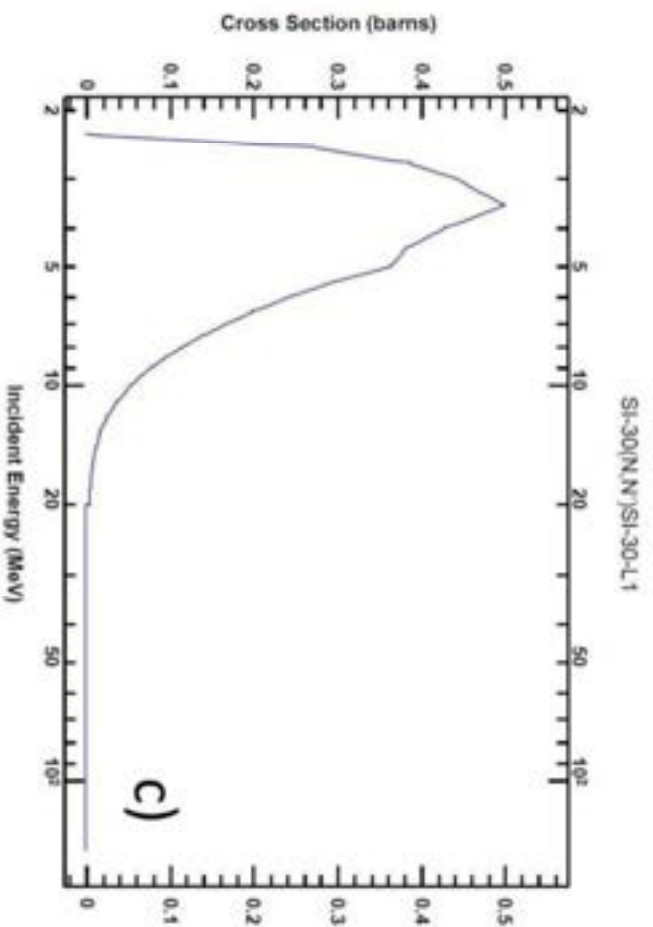


Şəkil 4.4.4 Neytron seli ilə şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində Si və C boşluqlarının yaranma modeli.

Neytron seli ilə şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində Si və

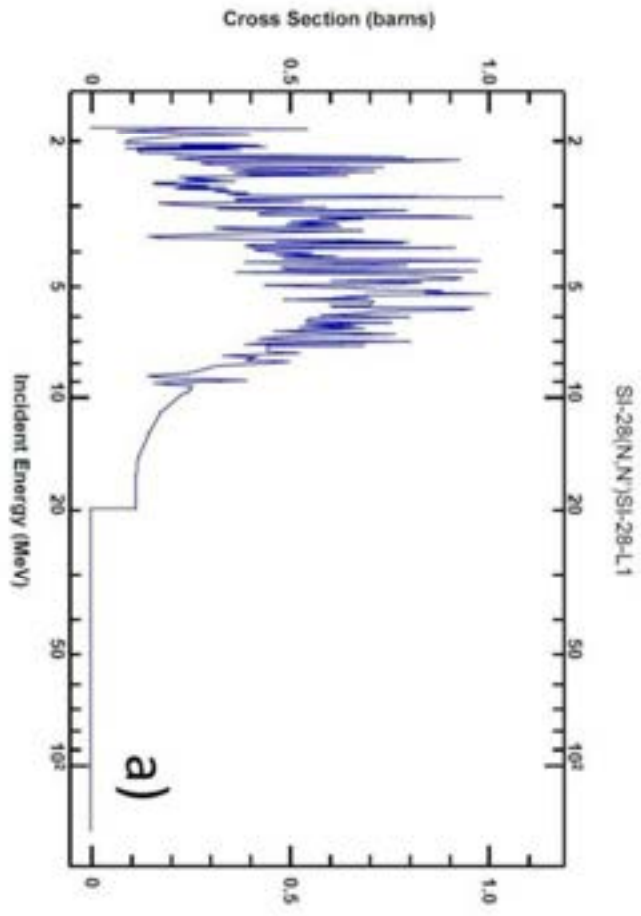
C atomları vasitəsi ilə mümkün boşluqların yaranması yalnız o hallarda mümkün ola bilər ki, nüvə çevrilmələri olamadan düşən neytronun enerjisi kristal qəfəsdən uyğun isotopu çıxarmağa kifayət etsin. Belə ki, əgər prosesdə hər hansı (n,p) , (n,α) və s. kimi nüvə çevrilmələri baş verərsə, bu zaman uyğun boşluqların yaranma ehtimalı sıfıra qədər azalar. Ümumi yanaşmada adətən neytronlarla şüalanma zamanı defektlərin yaranması üçün (n,γ) və ya (n,n') nüvə reaksiyalarından hər hansı birinin baş verməsi zəruridir. Bu tip nüvə reaksiyalarının baş vermə ehtimalı birbaşa hər bir nüvə üçün xarakterik olan effektiv en kəsiyi ilə xarakterizə olunur. Belə ki, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərini təşkil edən Si və C atomlarının fərqli stabil izotoplarında (təbii tərkib Si üçün 92.23% ^{28}Si , 4.67% ^{29}Si və 3.1% ^{30}Si , C üçün 98.93% ^{12}C və 1.07% ^{13}C) effektiv en kəsiyi fərqli olduğu üçün hər bir stabil izotop üçün (n,γ) və (n,n') nüvə reaksiyaları ayrılıqda öyrənilmişdir. İlk öncə Si izotopları üçün (n,γ) və (n,n') nüvə reaksiyalarını nəzərdən keçirək (**Şəkil 4.4.5**).

Spektrlərdən görüldüyü kimi, (n,n') nüvə reaksiyaları 2MeV-10MeV enerjili neytronlarda daha çox ehtimallıdır (**Şəkil 4.4.5a,b,c**). Enerjinin $E>10\text{MeV}$ qiymətindən sonra prosesin effektiv en kəsiyi demək olar ki, sıfıra qədər azalır. Belə olan halda isə, $E>10\text{MeV}$ enerjilərdə silisium izotopları üçün (n,n') nüvə reaksiyaları demək olar ki baş vermir. Başqa sözlə düşən neytronların enerjilərinin nisbətən böyük qiymətlərində, nöqtəvi defektlərdən daha çox xətti, laylı və s. tip defektlər yarada və ya digər nüvə reaksiyaları baş verə bilər. Digər tərəfdən fərqli stabil Si izotoplarında (n,γ) nüvə reaksiyaları enerjinin təribən 1MeV ətrafında rezonans halda olur (**Şəkil 4.4.5d,e,f**). Ümumi yanaşmada buradan belə nəticəyə gəlmək olar ki, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində silisium izotopları vasitəsi ilə mümkün nöqtəvi defektlərin yaranma ehtimalı düşən neytronların 1MeV-10MeV enerji aralığında maksimum olur. Eyni zamanda nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində C izotopları ilə (n,γ) və (n,n') nüvə reaksiyalarının effektiv en kəsikləri neytronun enerjisinin funksiyası kimi öyrənilmişdir (**Şəkil 4.4.6**).

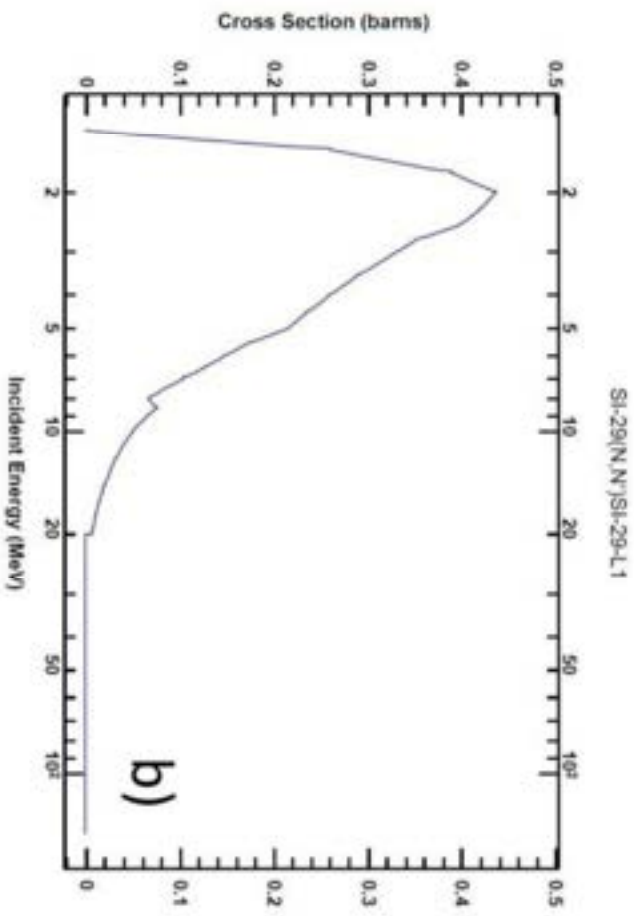
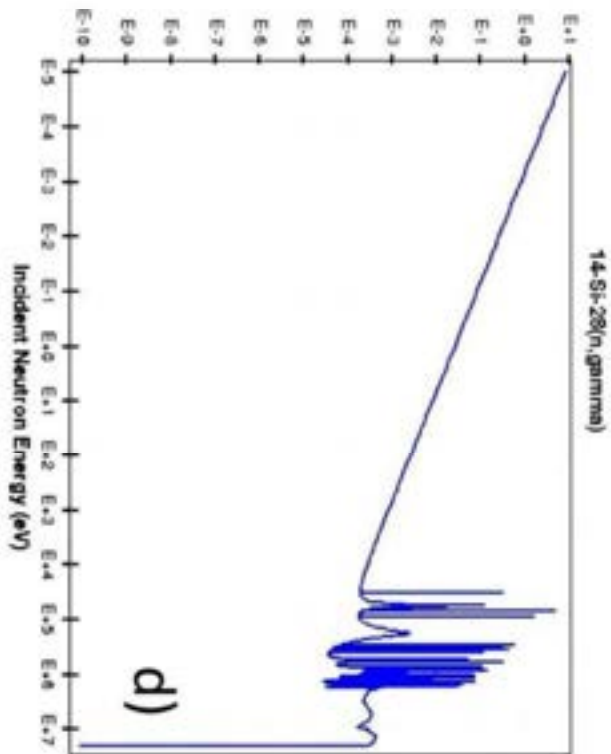


Şekil 4.4.5 Neytron selinin silisium farklı stabil izotoplarında yarattığı (n,n')

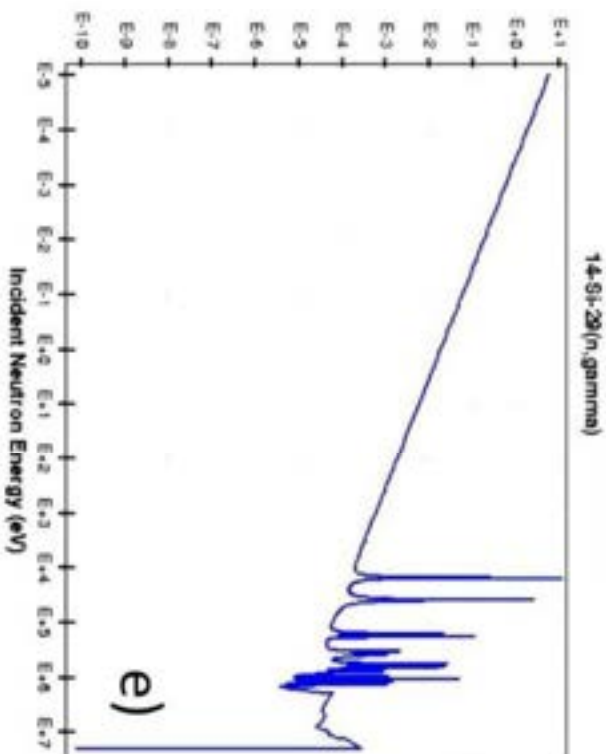
ve (n, γ) nüve reaksiyalarının efektif en kesiyi spektrleri.

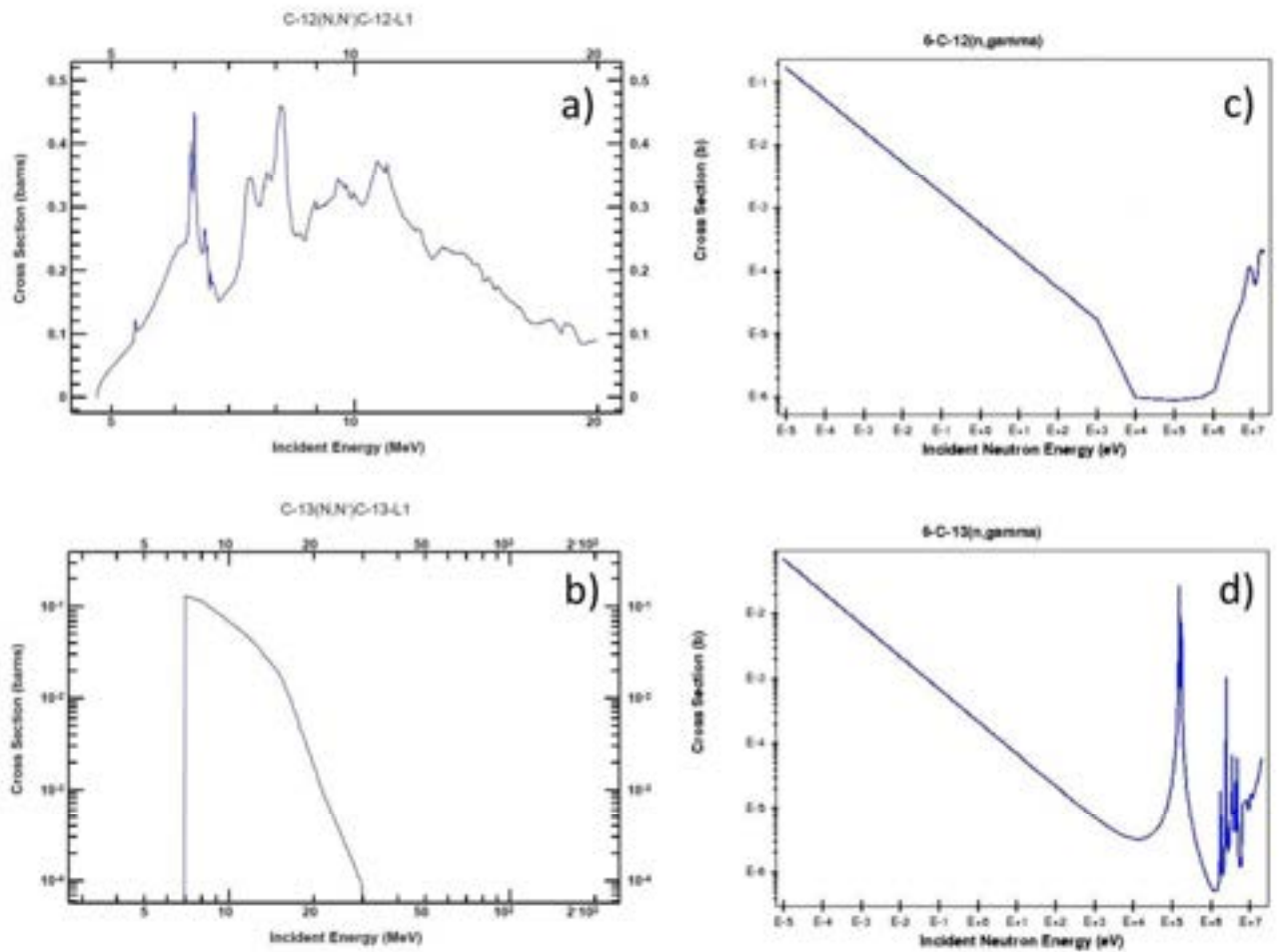


Cross Section (b)



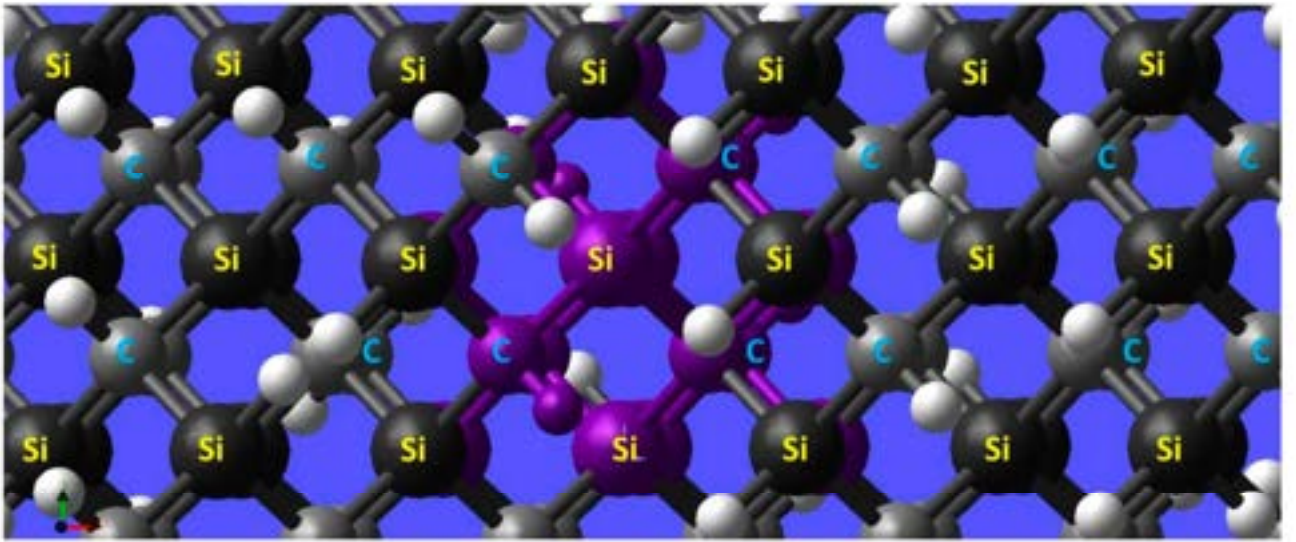
Cross Section (b)





Şəkil 4.4.6 Neytron selinin karbonun fərqli stabil izotoplarında yaratdığı (n,n') və (n,γ) nüvə reaksiyalarının effektiv en kəsiyi spektrləri.

(n,n') nüvə reaksiyaları C izotopları üçün enerjinin təqribən 7MeV-10MeV intervalında daha intensiv olur (Şəkil 4.4.6a,b). Digər tərəfdən stabil C izotoplarında (n,γ) nüvə reaksiyaları enerjinin 0.1MeV-1MeV intervalında rezonans haldadır (Şəkil 4.4.6c,d). Ümumi yanaşmada demək olar ki, Si izotoplarında olduğu kimi C izotoplarında da enerjinin maksimum 10MeV qiymətində intensiv olur. Başqa sözlə, ümumi halda demək olar ki, düşən neytronların enerjisinin 0.1MeV-10MeV intervalında C izotopları vasitəsilə nöqtəvi defektlərin yaranma ehtimalı maksimum olur. Neytronlarla şüalanma zamanı düşən neytronların enerjisinin $E < 1\text{MeV}$ qiymətlərində nöqtəvi defektlərin yaranması ilə yanaşı həm Si, həm də C izotopları vasitəsilə kəsqad hallarının yaranması daha çox ehtimallıdır (Şəkil 4.4.7).



Şəkil 4.4.7 Neytron seli ilə şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində kaskadların yaranma modeli

Neytronlarla şüalanma zamanı kaskad hallarının yaranması nəzəriyyəsi, müəyyən enerjiyə malik neytronun hər hansı bir atomla qarşılıqlı təsirdə olaraq həmin izotopu həyəcanlandırması və həyəcanlanmış izotopun qonşu atomları həyəcanlandıraraq enerjini ətrafa ötürməsi kimi izah olunur. Qeyd edək ki, neytronlara şüalanma zamanı kaskad hallarının yaranması sadəcə (n,γ) və (n,n') nüvə reaksiyaları ilə deyil, ümumiyyətlə neytronlarla atomların qarşılıqlı təsiri nəticəsində yarana bilər. Həmçinin nöqtəvi və ya digər tip defektlərin yaranması halı da, sadəcə (n,γ) və (n,n') nüvə reaksiyaları ilə deyil, ümumiyyətlə neytronların atomlarla istənilən növ qarşılıqlı təsiri nəticəsində yarana bilər.

4.5 Təcrübi nəticələrin müzakirəsi

Kompüter modelləşməsindən, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərini təşkil edən müxtəlif silisium və karbon izotoplarında neytron selinin zəbtinin effektiv en kəsiyinin ədədi qiymətinin fərqli olması məlum olmuşdur. ^{28}Si , ^{29}Si və ^{30}Si izotoplarında udulma spektrlərində müşahidə olunan rezonans halların minimal enerjisi uyğun olaraq təqribən $5 \cdot 10^{-2}$ MeV, 10^{-2} MeV və 10^{-3} MeV kimi tapılmışdır. ^{30}Si izotopunda neytronların enerjisinin 10^{-3} MeV qiymətindən başlayan neytron zəbti nəticəsində nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri neytron seli ilə ^{31}P izotopu ilə

aşqarlana bilir. Silisium izotopları ilə yanaşı, ^{12}C və ^{13}C izotoplarında da neytron zəbti nəzərə alın keçirilmiş və məlum olmuşdur ki, yalnız ^{13}C izotopunda enerjinin təqribən 10^{-1}MeV qiyməti ətrafında rezonans hal mövcuddur. Qarşılıqlı analizlərdən məlum olmuşdur ki, Si stabil izotopları üçün neytron zəbtinin effektiv en kəsiyi C stabil izotopları ilə müqayisədə təqribən 10^3 dəfə çoxdur.

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərini təşkil edən müxtəlif silisium və karbon izotoplarında (n, p) və (n, α) çevrilmələrinin kompüter modelləşməsi ilə analizindən məlum olmuşdur ki, hər bir stabil izotop üçün çevrilmə prosesi fərqli enerjilərdə başlayır. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində mövcud ^{28}Si , ^{29}Si və ^{30}Si izotoplarında (n, p) və (n, α) çevrilmələrinin baş verməsi üçün neytronların minimal enerjisi uyğun olaraq (n, p) çevrilmələri üçün 3.86MeV, 2.9MeV, 7.75MeV və (n, α) çevrilmələri üçün 2.65MeV, 0.035MeV, 4.2MeV kimi qiymətləndirilmişdir. Eyni zamanda, bütün Si izotoplarında (n, p) və (n, α) çevrilmələrinin rezonans halının enerjinin təqribən 10MeV ətrafında olması müəyyən edilmişdir. Digər tərəfdən, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində mövcud ^{12}C və ^{13}C izotoplarında (n, p) və (n, α) çevrilmələri zamanı neytronlardan tələb olunan minimal enerji uyğun olaraq (n, p) çevrilmələri üçün 12.58MeV, 12.65MeV və (n, α) çevrilmələri üçün 5.7MeV, 3.83MeV kimi tapılmışdır. ^{12}C və ^{13}C izotoplarında (n, p) və (n, α) çevrilmələrində rezonans hal ümumi yanaşmada enerjinin 10MeV-20MeV aralığında mövcuddur.

Aparılan analizlərdən məlum olmuşdur ki, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində neytron selinin təsiri ilə yaranan fərqli təbiətli defektlər düşən neytronların enerjisindən müəyyən qədər asılıdır. Düşən neytronun enerjisinin qiymətinə uyğun olaraq hansı tip defektin yaranma ehtimalının daha çox olması haqda öncədən fikir söyləmək mümkündür. Eyni zamanda, defektlərin yaranması üçün neytronların daha çox ehtimallı enerjiləri qiymətləndirilmişdir və məlum olmuşdur ki, nöqtəvi defektlər adətən (n, γ) və (n,n') nüvə reaksiyalarında daha çox ehtimallıdır. Analizlərdən məlum olmuşdur ki, Si izotopları üçün (n,n') nüvə reaksiyaları 2MeV-10MeV enerjili və (n, γ) nüvə reaksiyaları isə təqribən 1MeV enerjili neytronlarla daha çox ehtimallıdır. Digər tərəfdən C izotopları üçün (n, γ) nüvə reaksiyalarının enerjinin 0.1MeV-1MeV intervalında və (n,n') nüvə

reaksiyalarının enerjinin təqribən 7MeV-10MeV intervalında daha çox intensiv olması tapılmışdır.

Kompüter modelləşməsindən, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərini təşkil edən müxtəlif silisium və karbon izotoplarından neytron selinin səpilməsinin ədədi qiymətinin fərqli olması məlum olmuşdur. ^{28}Si izotopunda elastik səpilmənin dominant olmasına baxmayaraq ^{29}Si və ^{30}Si izotoplarında elastik səpilmə ilə yanaşı elastik olmayan səpilmənin də nisbətən yüksək ehtimalı proses olması aşkarlanmışdır. Məhz elastik olmayan səpilmənin nisbətən yüksək ehtimalı olması (neytron selinin effektiv en kəsiyinə uyğun olaraq) nəticəsində nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri neytron seli ilə ^{31}P izotopu ilə aşqarlana bilir. Digər tərəfdən ^{12}C və ^{13}C izotoplarında qeyri elastik səpilmənin aşağı ehtimalı proses olduğu tapılmışdır. Bununla yanaşı ^{12}C və ^{13}C izotoplarında elastik və elastik olmayan səpilmə ehtimalı nisbətən yüksəkdir.

V FƏSİL

NEYTRON SELİNİN NANOKRİSTALLİK 3C-SiC HİSSƏCİKLƏRİNİN

ELEKTRİK XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ

Bu fəsildə, 3C-SiC nanokristallarının elektrik keçiriciliyi temperatur və tezliyin uyğun olaraq 100K - 400K və 0.1Hz – 2.5MHz aralıklarında neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra temperatur və tezliyin funksiyası kimi nəzərdən keçirilmişdir. Neytron seli ilə modifikasiya olunmuş 3C-SiC nanomaterialında radiasiya səbəbindən keçiricilik (radiation-induced conductivity – RIC) izah edilmişdir. Elektrik keçiriciliyinin həqiqi və xəyali hissələri ayr – ayrılıqda öyrənilmiş və şərh edilmişdir. Eyni zamanda göstərilən tezlik və temperatur intervalında 3C-SiC nanohissəciklərinin impedans spektrləri neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli analiz edilmişdir. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində neytron selinin təsiri ilə yeni yaranan ³¹P izotoplarının impedans spektrlərinə və relaksasiya müddətlərinə təsiri təhlil edilmişdir. Həmçinin, 3C-SiC nanohissəciklərinin kompleks impedans spektroskopiyasından keçiriciliyin təbiəti və metal – yarımkəçirici keçid temperaturu izah edilmişdir. 3C-SiC nanokristallarının volt – amper xarakteristikaları otaq temperaturunda -100V – +100V gərginlik aralığında, 5V addım ilə nəzərdən keçirilib. Bu fəsildə neytron selinin nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin elektrik xassələrinə təsiri və şüalanma nəticəsində meydana gələn yeni effektlər ətrafı şərh edilmişdir. İlk olaraq, hissəcik ölçüləri 18 nm olan kubik modifikasiyalı silicon karbid (3C-SiC) nanomaterialı neytron seli ilə fərqli müddətlərdə şüalandırılmışdır. Elektrik keçiriciliyinin tezlik asılılıqları və neytron selinin təsiri işdə müqayisəli şərh olunmuşdur. İlk halda və müxtəlif müddətlərdə neytronlarla şüalandırılmış 3C-SiC nanohissəciklərin elektrik keçiriciliyinin tezlik asılılıqları 100K - 400K temperatur aralığında nəzərdən keçirilib. Hər bir temperaturda xarici sahə tezliyinin 0.1Hz – 2.5MHz aralığında fərqli qiymətlərdə ölçmələr aparılmışdır. Neytronlarla şüalanma zamanı 3C-SiC nanomaterialında

radiasiya səbəbindən keçiricilik (radiation-induced conductivity – RIC) müşahidə olunmuşdur və bu keçiricilik tezliyin funksiyası kimi tədqiq edilmişdir. Elektrik keçiriciliyinin həqiqi və xəyali hissələrinin qarşılıqlı asılılıqlarından keçiriciliyin tipi müəyyənləşdirilmişdir. Eyni zamanda, neytron seli ilə şüalanmış nano 3C-SiC – in elektrik keçiriciliyinə temperatur və düşən neytronların miqdarının müxtəlif tezlik oblastında təsiri tədqiq olunub. Müəyyən edilib ki, neytronların birbaşa, yaxud da aktivləşmə məhsullarının buraxdıqları şüaların təsiri altında əlavə elektroaktiv defektlər əmələ gəlir. Belə ki, neytron selinin $6,7 \times 10^{17} \div 2,7 \times 10^{18}$ n/sm²san intervalında dəyişməsi nano 3C-SiC – in elektrik keçiriciliyini artırır. Elektrik keçiriciliyinin ədədi qiymətinin artmasında əsas səbəb kimi, neytron çevrilmələri nəticəsində nanomaterial daxilində yaranmış yeni ³¹P izotopları göstərilmişdir. Neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra Arenius yanaşması ilə nümunələrin aktivləşmə enerjiləri tezliyin iki müxtəlif sabit qiymətləri üçün hesablanmışdır. Alınmış nəticələri izah edən mexanizim irəli sürülüb.

Əlavə olaraq, bu fəsildə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedans spektrləri neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli analiz edilmişdir. Neytronlarla şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedans spektrlərində müşahidə olunan rezonans hallar və sürüşmələr fərqli yanaşmalarla izah edilmişdir. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedansının həqiqi və xəyali hissələrinin qarşılıqlı asılılıqlarından relaksasiya müddətləri hesablanmışdır. Hesablanmış relaksasiya müddətləri neytronlarla şüalanma vaxtının funksiyası kimi analiz edilmişdir. Neytron çevrilmələri (neutron transmutation) nəticəsində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaranan ³¹P izotoplarının impedans spektrlərinə və relaksasiya müddətlərinə təsiri təhlil edilmişdir. Əlavə olaraq, TEM və SEM metodları ilə öyrənilmiş nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin amorflaşması və ya aqlomerasiyasının polyarlaşma dərəcəsinə və relaksasiya müddətinə təsiri araşdırılmışdır. Eyni zamanda bu fəsildə, ilkin halda və müxtəlif müddətlərdə kəsilməz olaraq neytron selinin təsirinə məruz qalmış kubik modifikasiyalı nano silisium karbidin (3C-SiC) impedans spektrləri temperaturun funksiyası kimi öyrənilmişdir. Nümunənin impedans spektrləri tezliyin 0.1Hz – 2.5MHz və

temperaturun 100K – 400K aralıklarında tədqiq olunmuşdur. Nümunələrin impedans spektrlərinin temperatur asılılıqları şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli tədqiq edilmişdir. Komplek impedans spektroskopiyasından keçiriciliyin təbiəti və metal – yarımkeçirici keçid temperaturu müəyyən edilmişdir. Neytron selinin təsir müddətinin artması ilə polyarlaşmanın artması müşahidə olunmuşdur. Təcrübələrdə müşahidə olunmuş bütün effektlərin mexanizimləri verilmişdir.

Digər tərəfdən bu fəsildə 3C-SiC nanokristallarının V – A xarakteristikası - 100V – +100V gərginlik aralığında 5V addım ilə neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli nəzərdən keçirilmişdir. Neytron selinin təsir müddətinin artması ilə nanomaterialın V – A xarakteristikasında bucaq sürüşməsi müşahidə olunmuşdur. Eyni zamanda məlum olmuşdur ki, neytronlarla şüalanmadan sonra 3C-SiC nanokristallarının müqaviməti təqribən 4 MΩ-dan 1 MΩ-a qədər azalmışdır. Əlavə olaraq, Fowler–Nordheim asılılıqlarından məlum olmuşdur ki, 3C-SiC nanokristallarında baş verən proseslər birbaşa tunel hadisəsinə əsaslanır və sahə emmissiyası müşahidə olunmur. Fowler–Nordheim asılılıqlarından 3C-SiC nanokristallarında şüalanmadan öncə və sonra termal aktivliyin bütün aralıklarda dominant olması tapılmışdır.

5.1 3C-SiC nanokristallarının elektrik keçiriciliyində neytronlarla şüalanma effektləri

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin elektrik keçiriciliyində neytronlarla şüalanma effektləri 100K - 400K temperatur və 0.1Hz – 2.5MHz tezlik aralıklarında nəzərdən keçirilmişdir. 3C-SiC nanokristallarının elektrik keçiriciliyinin həqiqi və xəyali hissələri qarşılıqlı öyrənilmiş, nisbi və fərq hallarında RIC tədqiq edilmişdir. Eyni zamanda, neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra Arenius yanaşması ilə 3C-SiC nanokristallarının aktivləşmə enerjiləri tezliyin müxtəlif sabit qiymətləri üçün hesablanmışdır.

5.1.1 Elektrik keçiriciliyinin tezlik asılılığında neytron şüalanma

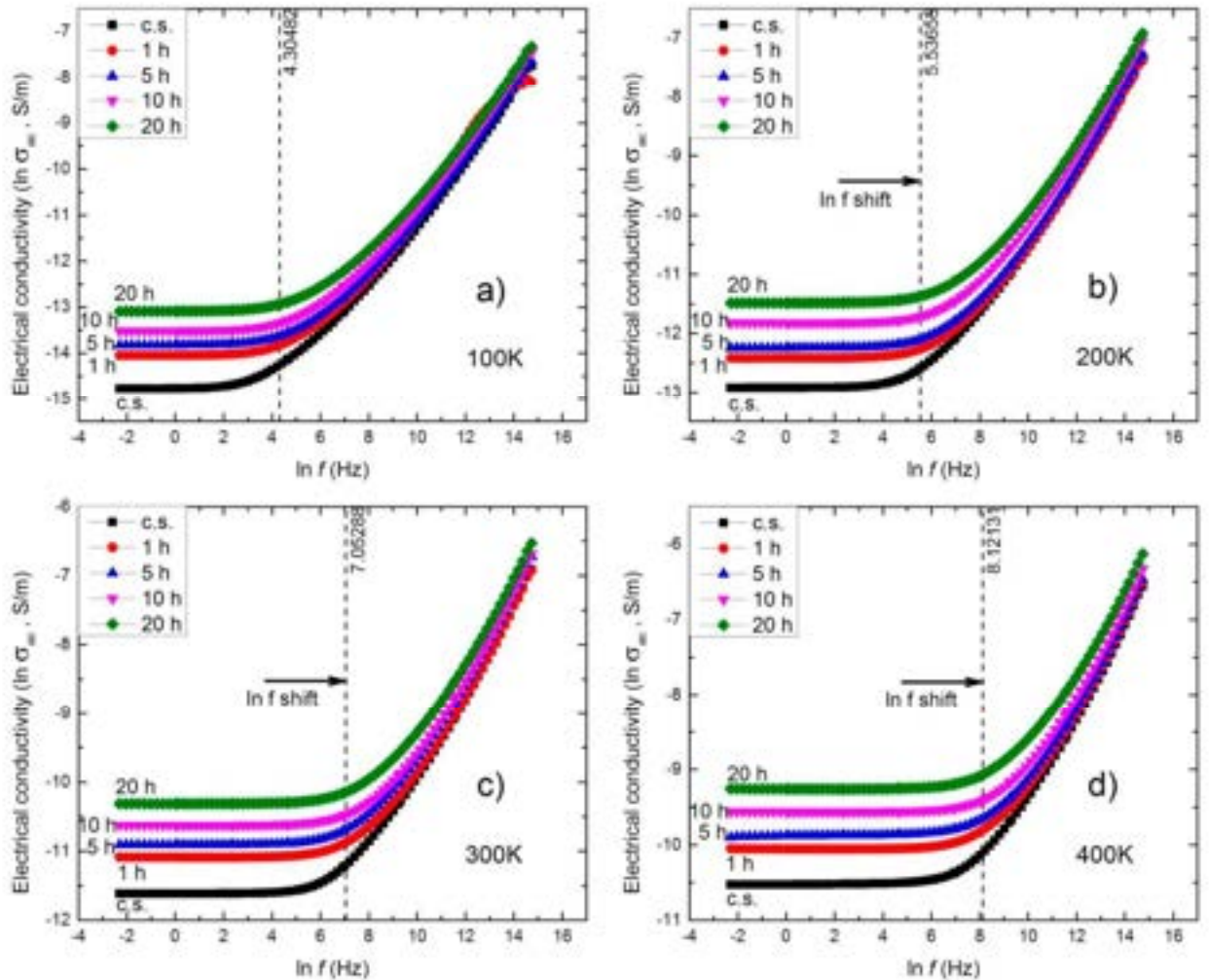
efektləri

Ölçmələr zamanı nümunələrin elektrik keçiriciliyinin tezlik asılılıqları temperaturun müxtəlif sabit qiymətlərində nəzərdən keçirilmişdir. Təcrübələr tezliyin 0.1Hz – 2.5MHz aralığında 88 müxtəlif sabit qiymətlərində aparılmışdır. Ölçmələr zamanı məlum olmuşdur ki, temperaturun müxtəlif qiymətlərində elektrik keçiriciliyinin tezlik asılılığı fərqlidir. Biz burada ilkin, müxtəlif müddətlərdə şüalanmış və temperaturun fərqli qiymətlərində elektrik keçiriciliyinin tezlik asılılıqlarını nəzərdən keçirmişik. İlk olaraq temperaturun 100K və 200K qiymətlərində elektrik keçiriciliyinin tezlik asılılıqlarını nəzərdən keçirək (**Şəkil 5.1.1 a və b**). Şəkildən görüldüyü kimi temperaturun 100K qiymətində 3C-SiC – in elektrik keçiriciliyinin $f(\ln f) = f(\ln \sigma)$ asılılığında $\ln f < 4,3$ oblastına qədər tezlikdən asılılıq demək olar ki, müşahidə olunmur (stabil oblast) (**Şəkil 5.1.1a**). Lakin bu oblastda neytron şüalanmanın təsiri açıq aşkar müşahidə olunur. Digər tərəfdən $\ln f > 4,3$ oblastında 3C-SiC – in elektrik keçiriciliyi tezlikdən asılı olaraq artır. Eyni zamanda $\ln f > 4,3$ oblastında neytron selinin təsiri nəticəsində artım çox az müşahidə olunur. Temperaturun 200K qiymətində $f(\ln f) = f(\ln \sigma)$ asılılıqlarında stabil oblast temperaturun təsiri nəticəsində $\ln f < 5,5$ qədər sürüşür (**Şəkil 5.1.1b**). $\ln f > 5,5$ oblastında isə 3C-SiC – in elektrik keçiriciliyinin ədədi qiymətində tezlikdən asılı olaraq artma müşahidə olunur.

300K və 400K temperaturlarda stabil oblast uyğun olaraq $\ln f < 7$ və $\ln f < 8,1$ kimi müşahidə olunur (**Şəkil 5.1.1 c və d**). Eyni zamanda bu stabil oblastlarda aşağı temperaturlarda olduğu kimi neytron selinin təsir effekti aşkar müşahidə olunur. Həmçinin 300K və 400K temperaturlarda uyğun olaraq $\ln f > 7$ və $\ln f > 8,1$ oblastlarında 3C-SiC – in elektrik keçiriciliyi tezliklə düz mütənasib olaraq artır və neytron selinin təsir effekti az müşahidə olunur.

Bütün temperaturlarda aparılan ölçmələr nəticəsində məlum olmuşdur ki, 3C-SiC nanomaterialının elektrik keçiriciliyi kiçik tezliklərdə demək olar ki, tezlikdən asılı deyil. Lakin kiçik tezlik oblastlarında neytron şüalanmanın təsiri nəticəsində nanomaterial daxilində yaranan əlavə yükdaşıyıcılar, neytron effektlərinin daha aşkar

müşahidə olunmasına səbəb olur. Belə ki, neytronlarla şüalanma nəticəsində lokal hallarda mövcud yükdaşıyıcıların və ya elektronların keçiricilikdə aktiv iştirakı mümkündür. Bu isə 3C-SiC – in elektrik keçiriciliyinin ədədi qiymətinin artmasına səbəb olur. Digər tərəfdən böyük tezliklər oblastında xarici elektrik sahəsinin təsiri neytron effektlərini üstələyir. Bunun nəticəsində böyük tezliklərdə neytron effektləri az, elektrik sahəsinin tezlik effektləri isə çox müşahidə olunur. Həmçinin temperaturun artması ilə stabil oblastın keçiriciliyinin artması istiqamətində sürüşməsi müşahidə olunmuşdur (Şəkil 5.1.1). Bunun isə əsas səbəbi temperaturun təsiri ilə keçiriciliyinin ədədi qiymətinin artmasıdır. Belə ki, nisbətən yüksək temperaturlarda, temperatur effektləri uyğun tezlik effektlərini üstələyir.



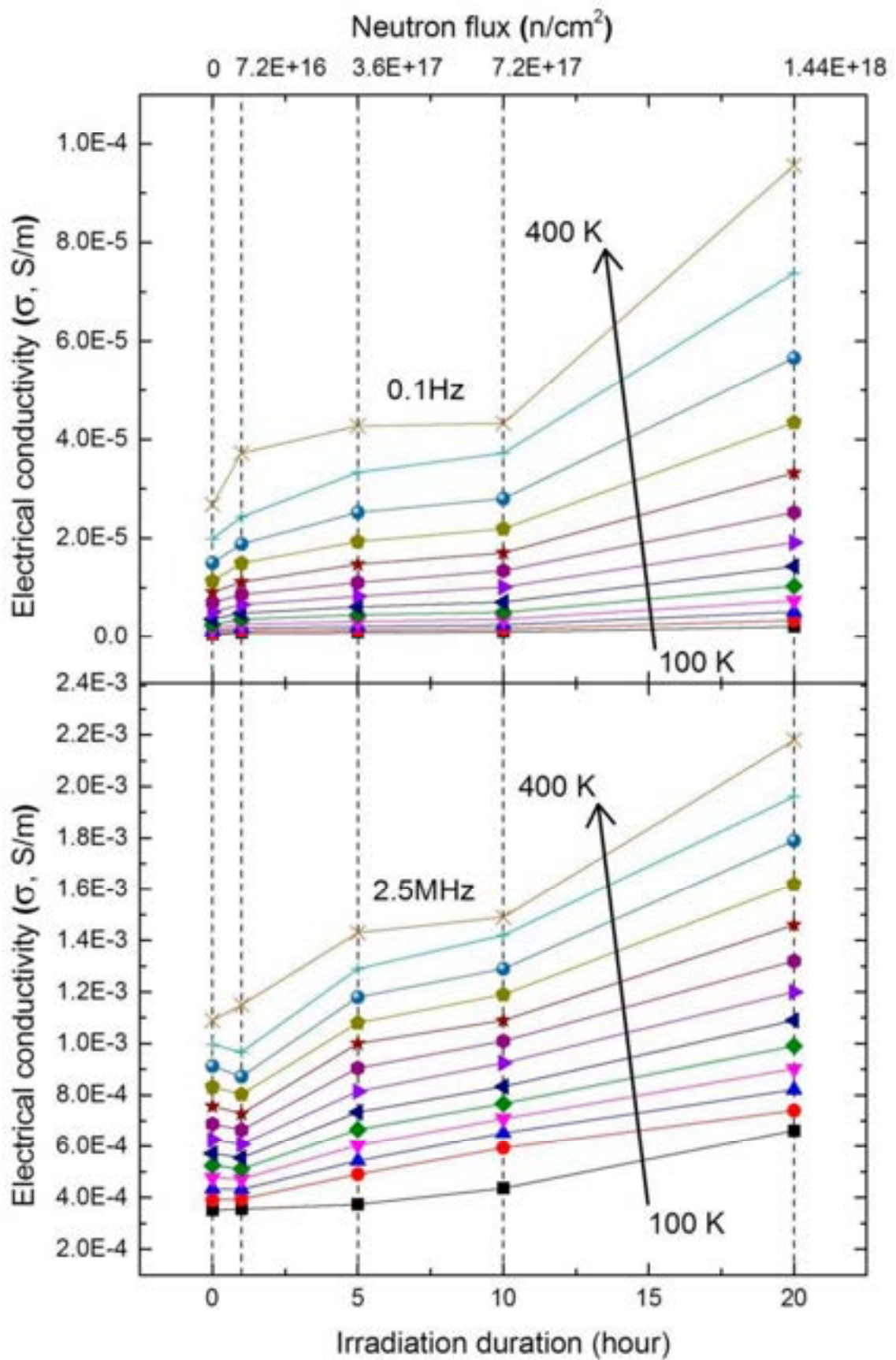
Şəkil 5.1.1 İlkin və müxtəlif müddətlərdə neytron selinin təsirinə məruz qalmış 3C-SiC nanohissəciklərinin fərqli temperaturlarda elektrik keçiriciliyinin tezlik asılılıqları

Origin Pro 9 programından istifadə edərək, elektrik keçiriciliyinin tezlik asılılığının nəzəri qanunauyğunluğu tapılmışdır. Bu məqsədlə elektrik keçiriciliyinin təcrübələrdən alınmış əyriyələri nəzəri qrafiklə uyğunlaşdırılmışdır. Məlum olmuşdur ki, elektrik keçiriciliyinin tezlik asılılığı ümumi tendensiyada aşağıdakı düstur ilə xarakterizə oluna bilər:

$$\sigma(f) = a + bf^c \quad (5.1)$$

burada, a, b və c neytron selinin təsir müddətindən və temperaturdan asılı olan sabit kəmiyyətlərdir.

Elektrik keçiriciliyinin aşağı və yüksək tezlikdə fərqli temperaturlarda neytron selinin təsir müddətindən asılılıqları **şəkil 5.1.2** – də təsvir edilmişdir. Neytron selinin təsir müddətinin artması ilə elektrik keçiriciliyinin artması şəkildən aşkar müşahidə olunur. Həmçinin neytron seli fərqli temperatur və tezliklərdə nanomateriala fərqli təsir göstərir. Tezliyi 0.1Hz qiymətində aşağı temperaturlarda elektrik keçiriciliyinin demək olar ki şüalanma müddətindən asılı deyil (**Şəkil 5.1.2a**). Lakin tezliyin 2.5MHz qiymətində bütün temperatur oblastında elektrik keçiriciliyinin şüalanma müddətinə mütənasib olaraq artması müşahidə olunur (**Şəkil 5.1.2b**). Bütün hallarda şüalanma müddətinin artması ilə elektrik keçiriciliyinin ədədi qiymətinin artmasına səbəb, şüalanma nəticəsində nanomaterial daxilində yaranan əlavə yükdaşıyıcı və ya aşqar elementin konsentrasiyasının artmasıdır.



Şəkil 5.1.2 3C-SiC – in elektrik keçiriciliyinin aşağı (a) və yüksək (b) tezlikdə fərqli temperaturalarda neytron selinin təsir müddətindən asılılıqları

3C-SiC nanomaterialında elektrik keçiriciliyinin təbiətini müəyən etmək məqsədilə keçiriciliyin həqiqi və xəyali hissələri hesablanmışdır. Ədəbiyyatlardan [110, s.392; 182, s.175]

$$\sigma = \varepsilon_0 \omega \varepsilon'' = 2\pi f \varepsilon_0 \varepsilon''$$

$$\sigma' = \sigma \cos \varphi \quad (5.2)$$

$$\sigma'' = \sigma \sin \varphi$$

məlum ifadələrindən istifadə edərək təcrübədən alınmış dielektrik nüfuzluğu və ölçmələr zamanı istifadə olunan tezliyinin köməyiylə alınmış qiymətlərə uyğun $f(\ln\sigma') = f(\ln\sigma'')$ asılılıqları **şəkil 5.1.3** – də təsvir edilmişdir. Elektrik keçiriciliyinin həqiqi və xəyali hissələrinin qarşılıqlı asılılıqlarında pik hissələrə uyğun tezliyin qiymətindən ($10^3 \sim 10^4$ Hz) 3C-SiC nanomaterialında keçiriciliyin əsasən ion tip olmasını iddia etmək olar. Neytron selinin nanomateriala təsiri nəticəsində elektrik keçiriciliyinin həqiqi və xəyali hissələrinin qarşılıqlı asılılıqlarında pik hissə tezliyin böyük qiymətinə (10^3 Hz – dən 10^4 Hz – ə qədər) doğru sürüşür (**Şəkil 5.1.3**). Bu isə, onu deməyə əsas verir ki, neytron şüalanma nəticəsində 3C-SiC nanomaterialında əsasən ion tip əlavə yükdaşıyıcılar yaranır.

Alınmış təcrübi nəticələrdən nano 3C-SiC – in elektrikal aktivləşmə enerjisi şüalanmadan öncə və sonra Arenius yanaşması ilə hesablanmışdır. Elektrik keçiriciliyinin natural loqarifmasının $1000/T$ – dən asılılıq qrafikində meyl bucağının tangensi birbaşa aktivləşmə enerjisini ifadə edir. Hesablamalar iki tezlik üçün aparılmışdır (0.1Hz və 2.5MHz). Temperturun artması ($T_{p1} < T_{p2}$) ilə aktivləşmə enerjisində artma müşahidə olunur. Aparılmış hesablamalara uyğun alınmış aktivləşmə enerjisinin ədədi qiymətləri cədvəl 5.1 – də təsvir edilmişdir. Məlum olmuşdur ki, bütün hallarda şüalanma müddətinin artması ilə aktivləşmə enerjisinin ədədi qiyməti azalır. Bunu isə şüalanma nəticəsində nümunə daxilində yaranan əlavə yükdaşıyıcılar və ya aşqar elementlərin konsentrasiyasının artması ilə izah etmək olar. Həmçinin, tezliyin artması ilə aktivləşmə enerjisində azalma müşahidə olunur.

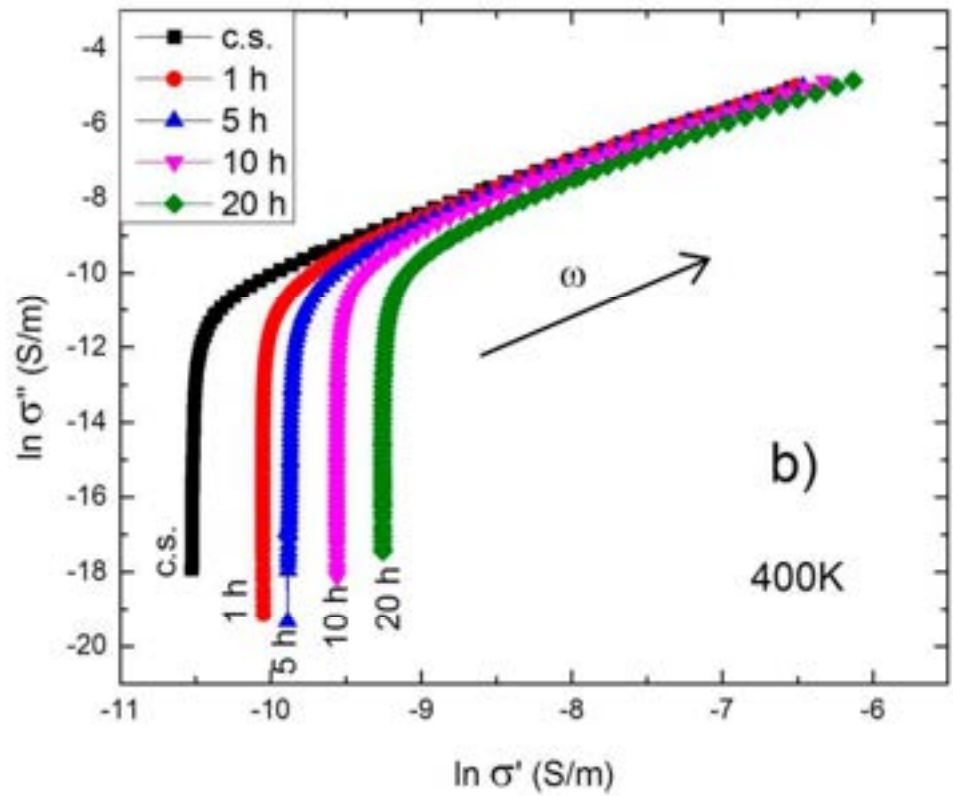
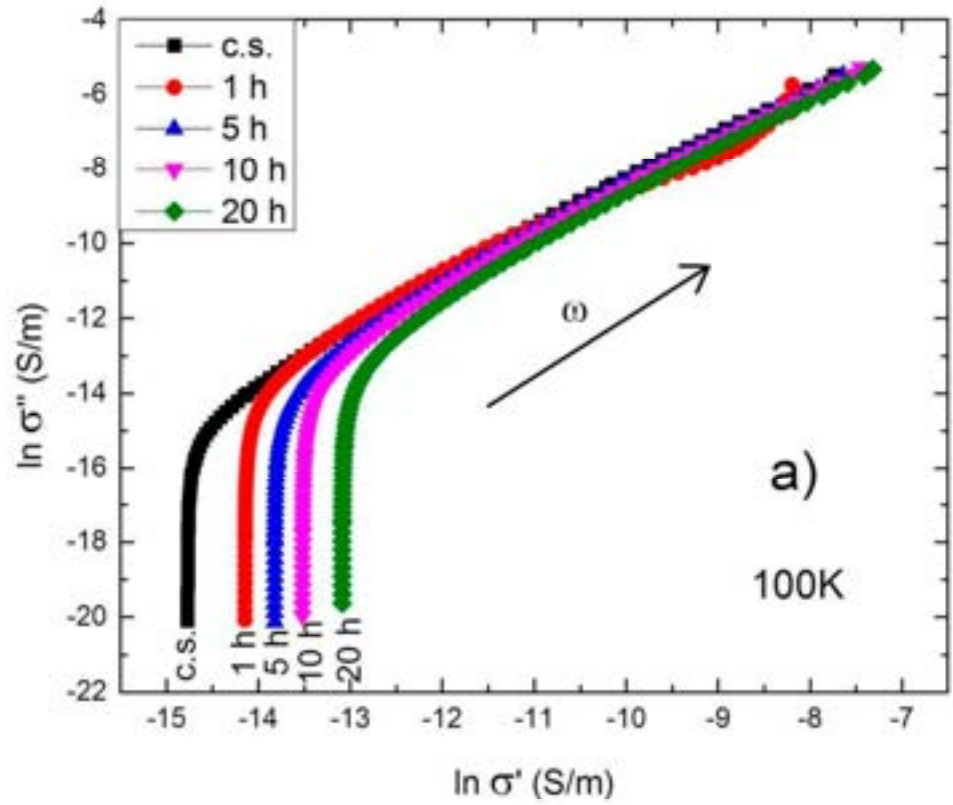
Bunu da səbəbi, daha dərin səviyyələrdə olan yükdaşıyıcıların nisbətən yüksək tezliklərdə keçiricilikdə aktiv iştirakıdır.

Cədvəl 5.1.1 3C-SiC – in Neytron selinin təsirindən öncə və sonra aktivləşmə enerjisinin fərqli tezliklərdə qiymətləri

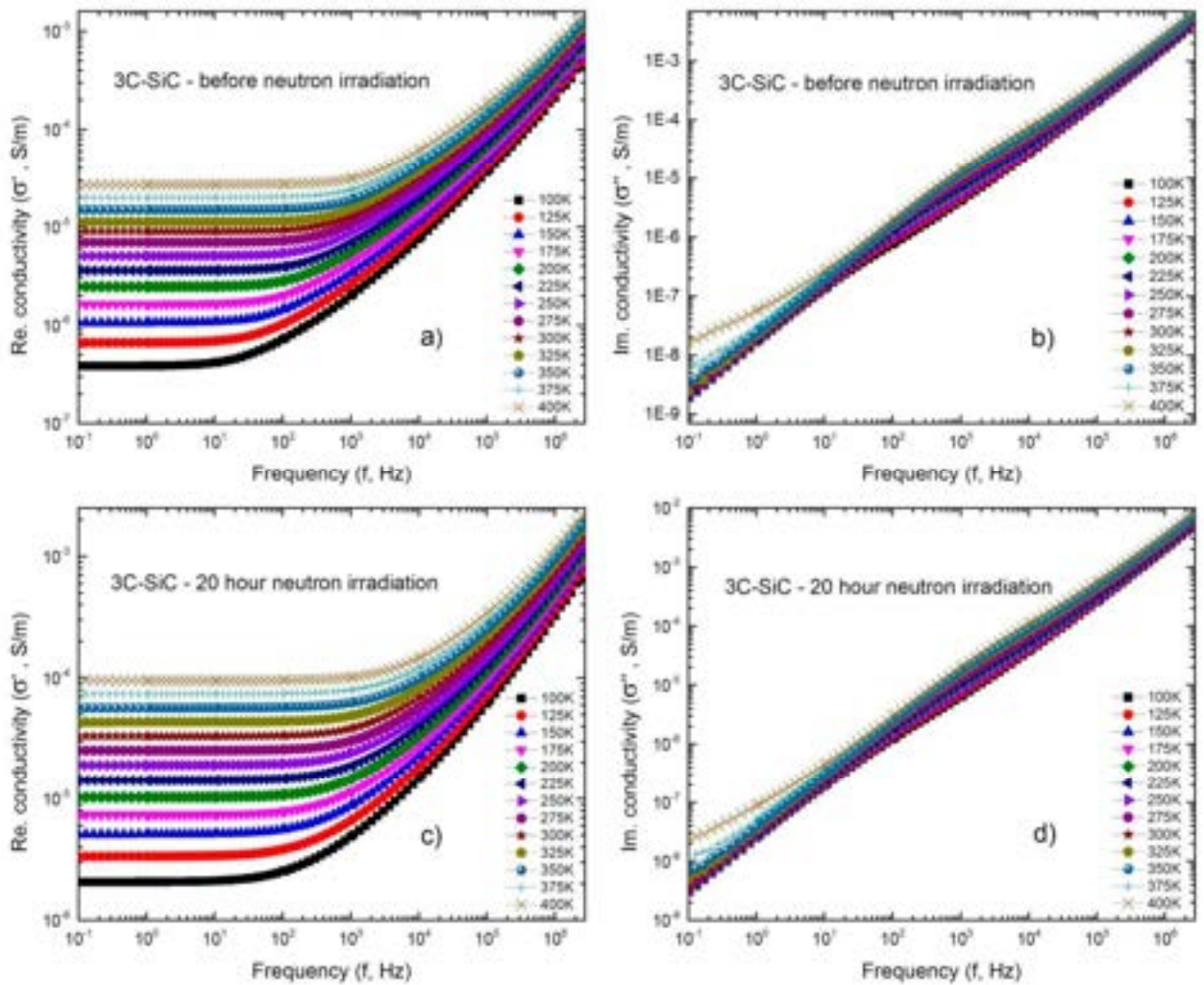
Nümunə	Activation energy (eV)			
	0.1 Hz		2.5MHz	
	I hissə	II hissə	I hissə	II hissə
Şüalanadan öncə	0.383333	1.531579	0.088388	0.462766
1 h	0.364421	1.393035	0.08167	0.42
5 h	0.346552	1.311404	0.078397	0.394737
10 h	0.323729	1.213992	0.071429	0.363265
20 h	0.306799	1.155378	0.065109	0.350806

Elektrik keçiriciliyinin həqiqi və xəyali hissələrinin fərqli temperaturlarda tezlik asılılıqlarını yalnız şüalanmadan öncə və 20 saat neytron selinin təsirinə məruz qalmış hal üçün nəzərdən keçirək (**Şəkil 5.1.4**). Nano 3C-SiC – in elektrik keçiriciliyinin həqiqi hissəsi şüalanmadan öncə kiçik tezliklərdə demək olar ki, tezlikdən asılı deyil (**Şəkil 5.1.4a**). Lakin kiçik tezliklər oblastında temperaturdan asılı olaraq artma mövcuddur. Bu artma böyük tezliklər oblastına nisbətən daha aşkar nəzərə çarpır. Digər tərəfdən, böyük tezliklərdə keçiriciliyin həqiqi hissəsi tezlikdən asılı olaraq kəskin artır. Nano 3C-SiC – in elektrik keçiriciliyinin xəyali hissəsinin tezlik asılılığı isə bir qədər fərqlidir (**Şəkil 5.1.4b**). Belə ki, elektrik keçiriciliyinin xəyali hissəsi tezlikdən demək olar ki xətti asılı olaraq artır və temperaturdan asılı deyil.

Elektrik keçiriciliyinin həqiqi və xəyali hissələrinin fərqli temperaturlarda 20 saat neytron şüalanmasından sonrakı tezlik asılılıqları digər hallarla analogi xarakter daşıyır (**Şəkil 5.1.4 c və d**).

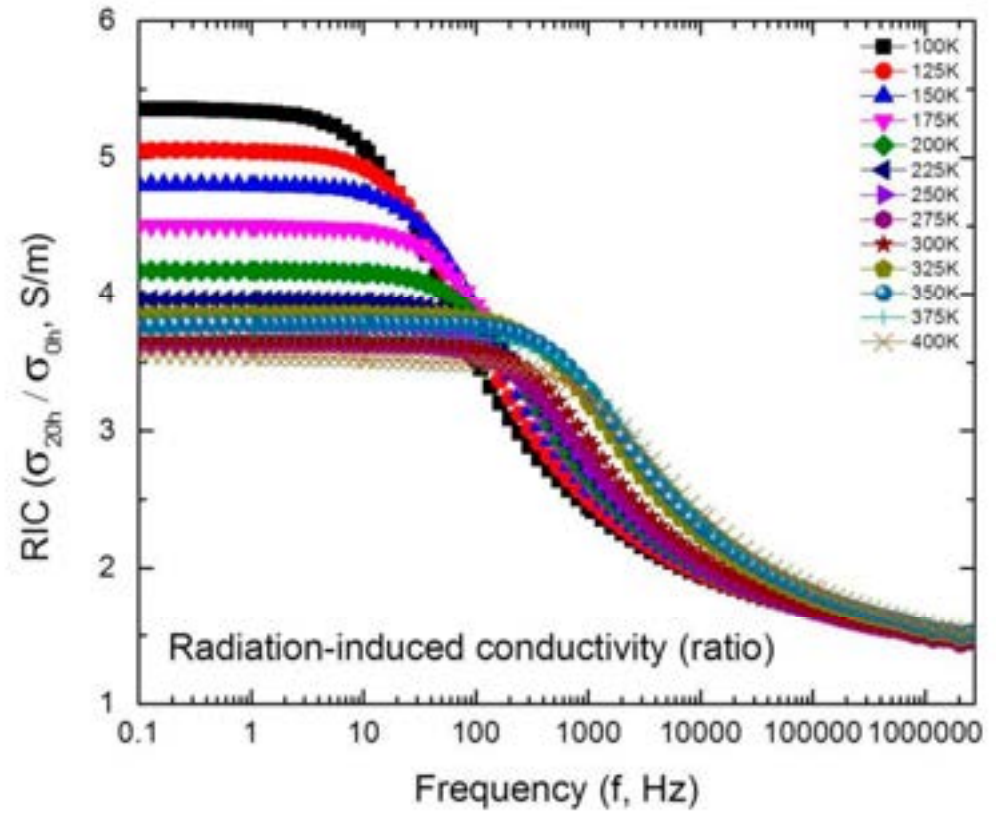
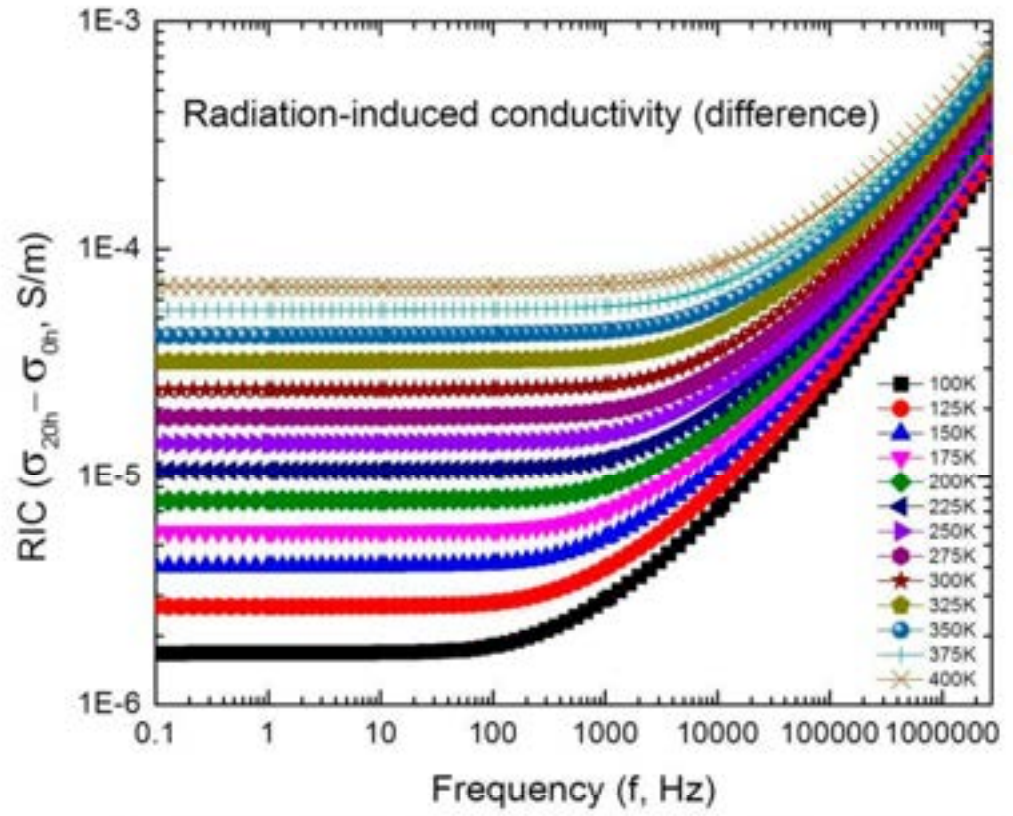


Şəkil 5.1.3 Nano 3C-SiC hissəciklərinin şüalanmadan öncə və sonra temperaturun müxtəlif qiymətlərində elektrik keçiriciliyinin həqiqi və xəyali hissələrinin qarşılıqlı asılılıqları



Şəkil 5.1.4 Nano 3C-SiC hissəciklərinin elektrik keçiriciliyinin həqiqi və xəyali hissələrinin fərqli temperaturlarda şüalanmadan öncə və sonra tezlik asılılıqları

Lakin 20 saat şüalanmadan sonra nano 3C-SiC – in elektrik keçiriciliyinin həqiqi və xəyali hissələrinin ədədi qiyməti təqribən 5.5 dəfəyə qədər artmışdır. Eyni zamanda, öncəki hallara uyğun olaraq (Şəkil 5.1.1 və 5.1.2) 20 saat şüalanmadan sonra stabil oblast tezliyin artmasına doğru sürüşmüşdür. Neytron seli ilə 20 saat şüalanma zamanı nano 3C-SiC – də yaranan əlavə radiasiya səbəbindən keçiricilik (radiation-induced conductivity RİC) fərqli temperaturlarda 0.1Hz – 2.5MHz tezlik intervalında hesablanmışdır (Şəkil 5.1.5). RİC keçiriciliyi 20 saat şüalanmış nümunə üçün $\sigma_{0h} - \sigma_{20h}$ (fərq) və σ_{20h}/σ_{0h} (nisbət) yanaşmaları ilə hesablanmışdır. Hansı ki, burada σ_{0h} – şüalanmadan öncəki və σ_{20h} – 20 saat şüalanmış nano 3C-SiC – in elektrik keçiriciliyinin eksperimental qiymətləridir.



Şəkil 5.1.5 3C-SiC nanomaterialının RİC (fərq, a) və RİC (nisbət, b) keçiriciliyinin fərqli temperaturlarda tezlik asılılıqları

RİC (fərq) keçiriciliyinin tezlik asılılığından məlum olmuşdur ki, $f < 1\text{kHz}$

tezlik oblastında radiasiya effektləri tezlikdən asılı deyil (**Şəkil 5.1.5a**). Lakin, tezliyin $f > 1\text{kHz}$ oblastında RİC (fərq) keçiriciliyi tezlikdən düz mütənasib asılı olaraq artır. Digər tərəfdən, RİC (fərq) keçiriciliyi temperaturdan asılı olaraq artır. Belə ki, temperaturun 100K qiymətində RİC (fərq) keçiriciliyi 2×10^{-6} S/m olursa, 400K temperaturda RİC (fərq) artaraq 8×10^{-5} S/m olur. Qeyd edək ki, bu fərq yüksək tezliklər oblastında daha az qiymət alır. Ümumi yanaşmada təcrübələrdə məlum olmuşdur ki, neytron selinin təsiri nəticəsində nümunələrdə yaranan RİC (fərq) keçiriciliyinin maksimum qiyməti təqribən 7.5×10^{-4} S/m olur. RİC (fərq) keçiriciliyi ən böyük qiymətini temperatur və tezliyin maksimum qiymətində alır. Buradan belə nəticəyə gəlmək olar ki, neytron seli nanomaterialda yüksək tezlik və temperaturlarda daha çox yükdaşıyıcılar yaradır. RİC (nisbi) keçiriciliyi isə **Şəkil 5.1.1-5.1.2** – də qeyd olunan faktları təstiqləyir. Belə ki, yuxarı tezliklərdə nisbi keçiricilik daha az müşahidə olunur (**Şəkil 5.1.5b**). Nisbi keçiricilik aşağı tezliklərdə tezlikdən asılı deyil (RİC fərqə uyğun olaraq). Nisbi keçiriciliyin tezlik asılılıqlarından məlum olmuşdur ki, tezliyin maksimum qiymətində RİC (nisbi) minimum qiymətini alır (1.5 dəfə artım). Nisbi keçiricilikdə maksimum artım aşağı tezliklər oblastında 100K temperaturda müşahidə olunmuşdur (5.5 dəfə artım).

Radiasiya səbəbindən keçiriciliklərin (radiation-induced conductivity RİC) ədədi qiymətində baş verən dəyişikliklər bir çox ədəbiyyatlarda şərh edilmişdir [41, s.2487; 112, s.421; 159, s.1221; 160, s.639; 173, s.1163; 179, s.360; 202, s.133104; 282, s.1098; 297, s.524]. Keçid yanaşmasına görə (transient phenomenon) şüalanma nəticəsində keçirici zonaya keçən elektron RİC keçiriciliyinə səbəb ola bilər. Bu isə öz növbəsində, keçiriciliyi $\sigma = \sigma_0 + kR^\alpha$ qanununa uyğun olaraq artırır. Hansı ki, burada σ_0 ilkin keçiricilik (base conductivity), R – şüalanma dozası, k və α şüalanma müddəti və materialın növündən asılı sabitlərdir [119, s.3087]. SiC nanomaterialında RİC keçiriciliyinə bir neçə amillər təsir göstərə bilər. İlk növbədə, şüalanma nəticəsində həyəcanlanmış Si və C atomlarında daha dərin səviyyələrdə yerləşən yükdaşıyıcılar keçiricilikdə iştirak edir. Əlavə olaraq, neytron seli ilə şüalanma zamanı nanomaterialda dərin səviyyələr kimi bilinən, donör və ya akseptor defektlər (acceptor or donör defects) yaranır. Radiasiya təsirindən yaranan defektlər

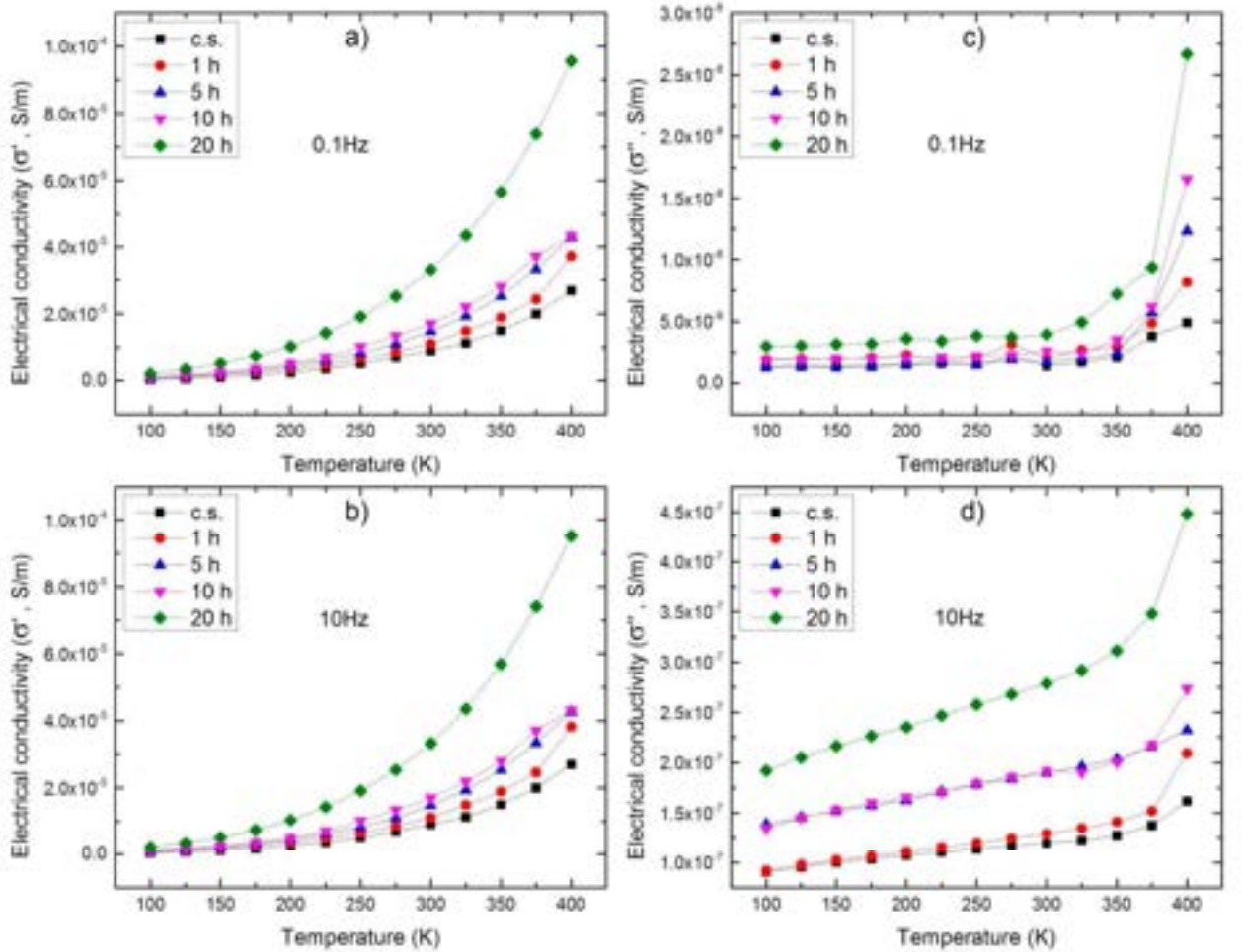
(radiation-induced defects) keçirici zonada (conduction band) olan yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını dəyişir. Neytronla şüalanma zamanı 3C-SiC nanomaterialı daxilində nüvə çevrilmələri nəticəsində donör (n-tip donör, ^{31}P) atomlarının konsentrasiyası artır ki, bu da keçiriciliyin artmasına səbəb olan amillərdəndir.

5.1.2 Elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılığında neytron şüalanma effektləri

Ölçmələr zamanı nümunələrin elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılıqları müxtəlif tezliklərin sabit qiymətlərində nəzərdən keçirilmişdir. Təcrübələr tezliyin 0.1Hz – 2.5MHz aralığında 88 müxtəlif sabit qiymətlərində aparılmışdır və ölçmələr zamanı məlum olmuşdur ki, tezliyin müxtəlif qiymətlərində keçiriciliyin temperatur asılılığı fərqlidir. Tezlik aralığının geniş olduğunu və sabit qiymətlərin çoxluğunu nəzərə alaraq biz burada bu tezlik aralıqlarını şərti olaraq üç qrupa ayırmışıq (hər qrupda 2 tezlik olmaqla ümumilikdə 6 sabit tezlik oblastında elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılığı nəzərdən keçirilmişdir). Birinci qrupu şərti olaraq aşağı tezliklər (0.1Hz – 10 Hz) oblastı, ikinci qrupu orta tezliklər (1kHz – 0.1MHz) oblastı və üçüncü qrupu yüksək tezliklər (1MHz – 2.5MHz) oblastına ayırmaq olar. İlk olaraq, aşağı tezlik oblastında elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılıqlarını nəzərdən keçirək (**Şəkil 5.1.6**).

Şəkildən görüldüyü kimi aşağı tezliklər oblastında neytron selinin təsir müddətinin artması ilə nümunələrin elektrik keçiriciliyi artıb. Temperaturun artması ilə bu artım daha kəskin müşahidə olunur. Aşağı tezliklərdə $T < 150\text{K}$ temperatur oblastında elektrik keçiriciliyinin həqiqi hissəsində şüalanma müddətindən asılılıq çox zəifdir (**Şəkil 5.1.6 a və b**). Tezliyin 0.1Hz qiymətində elektrik keçiriciliyinin xəyali hissəsində aşağı temperaturlarda ($T < 300\text{K}$) neytron selinin təsiri nəticəsində artma çox az müşahidə olunur (**Şəkil 5.1.6c**). Lakin, tezliyin 10Hz qiymətində bütün temperatur oblastında neytron selinin təsir müddətinin artması ilə elektrik keçiriciliyinin xəyali hissəsində artma müşahidə olunur (**Şəkil 5.1.6d**). Orta tezliklər oblastında, 1kHz tezliyin $T < 125\text{K}$ temperatur oblastında elektrik keçiriciliyinin

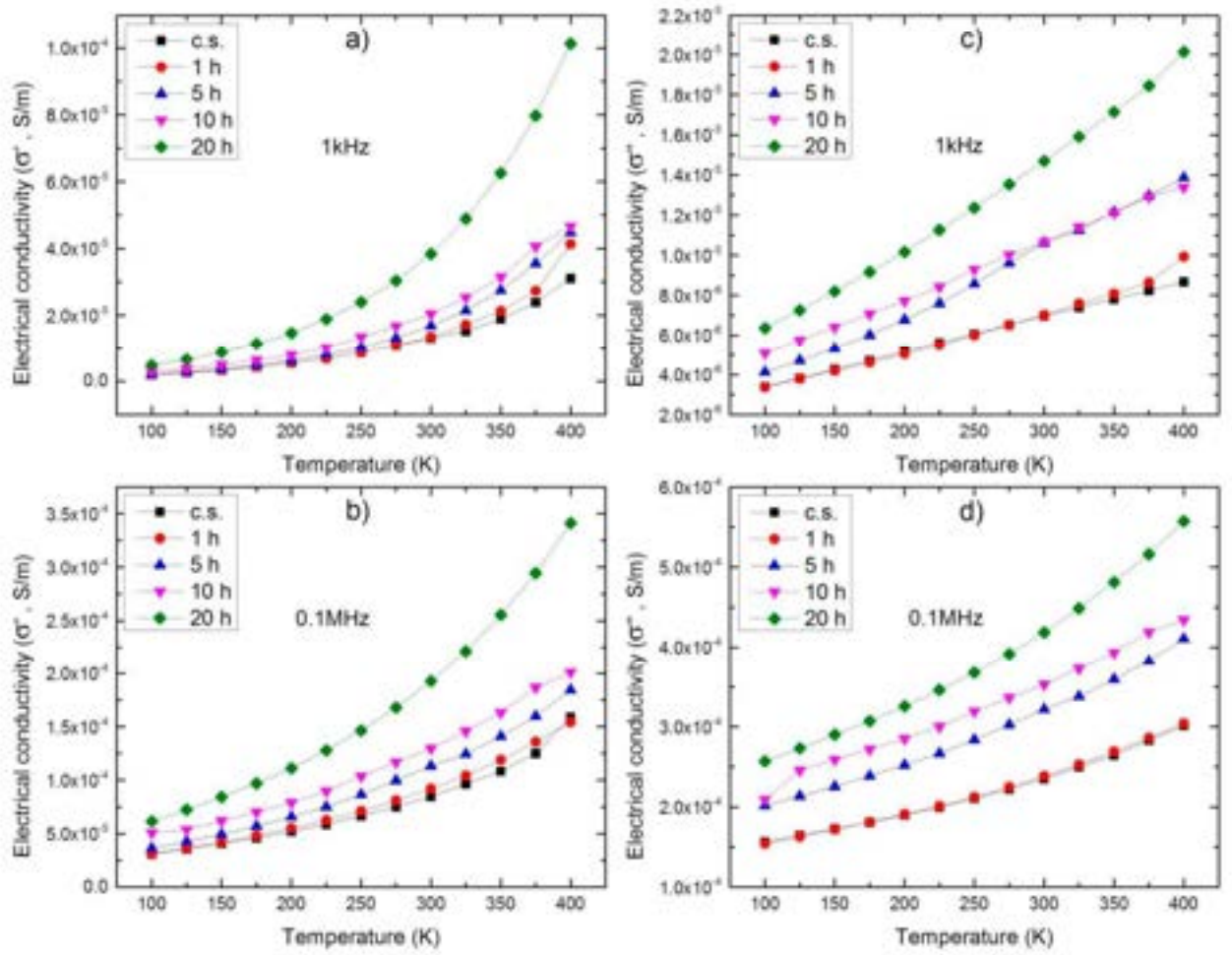
həqiqi hissəsində şüalanma müddətindən asılılıq zəifdir (Şəkil 5.1.7a). Lakin, tezliyin 0.1MHz qiymətində elektrik keçiriciliyinin həqiqi hissəsində şüalanma müddətindən asılılıq aşkar müşahidə olunur (Şəkil 5.1.7b).



Şəkil 5.1.6 İlkin halda (c.s.) və müxtəlif müddətlərdə (1,5,10,20 saat) neytron selinin təsirinə məruz qalmış nano 3C-SiC – in aşağı tezliklər oblastında müxtəlif tezliklərdə elektrik keçiriciliyinin həqiqi (a və b) və xəyali (c və d) hissələrinin temperatur asılılıqları

Orta tezliklər oblastında elektrik keçiriciliyinin xəyali hissəsinin temperatur asılılığı demək olar ki, xətti xarakter daşıyır (Şəkil 5.7 c və d). Neytron selinin təsir müddətinin artması ilə elektrik keçiriciliyin xəyali hissəsində artma bütün temperatur oblastında aşkar müşahidə olunur. Yüksək tezliklərdə elektrik keçiriciliyinin xəyali və həqiqi hissələrinin temperatur asılılıqlarında şüalanma effektləri aşkar müşahidə

olunur (Şəkil 5.1.8).

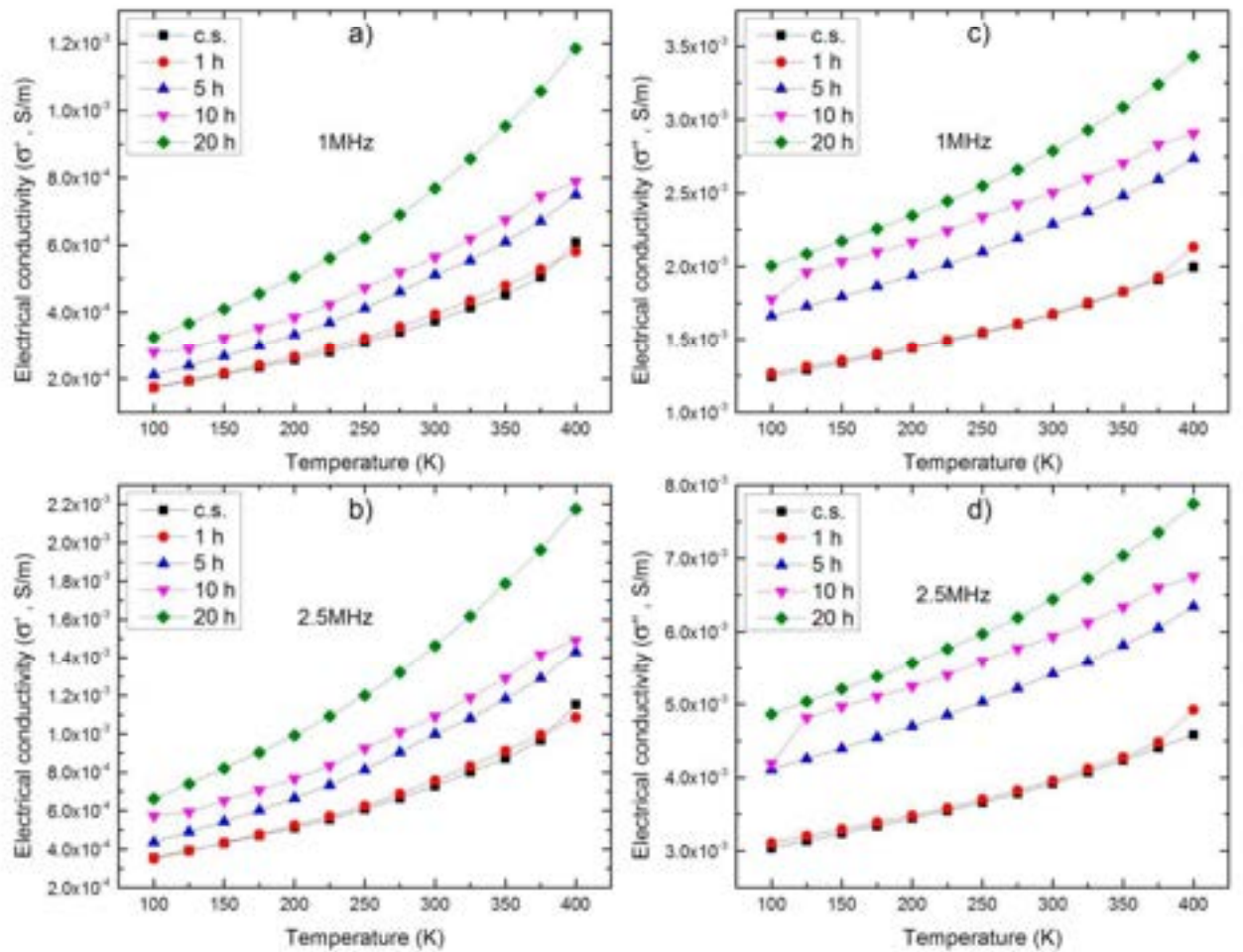


Şəkil 5.1.7 İlkin halda (c.s.) və müxtəlif müddətlərdə (1,5,10,20 saat) neytron selinin təsirinə məruz qalmış nano 3C-SiC – in orta tezliklər oblastında müxtəlif tezliklərdə elektrik keçiriciliyinin həqiqi (a və b) və xəyali (c və d) hissələrinin temperatur asılılıqları

Həmçinin, yüksək tezliklərdə elektrik keçiriciliyinin ədədi qiymətində nəzərə çarpacaq dərəcədə artma müşahidə olunur. Bu artım elektrik keçiriciliyinin xəyali hissəsində daha kəskin müşahidə olunur.

Ümumi yanaşmada, bütün tezliklərdə elektrik keçiriciliyinin həqiqi hissəsinin temperatur asılılığı eksponensial xarakter daşıyır. Origin Pro 9 proqramından istifadə edərək, elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılığının nəzəri qanunauyğunluğu tapılmışdır. Bu məqsədlə elektrik keçiriciliyinin təcrübələrdən alınmış əyriləri nəzəri

qrafiklə uyğunlaşdırılmışdır.



Şəkil 5.1.8 İlk halda (c.s.) və müxtəlif müddətlərdə (1,5,10,20 saat) neytron selinin təsirinə məruz qalmış nano 3C-SiC – in yüksək tezliklər oblastında müxtəlif tezliklərdə elektrik keçiriciliyinin həqiqi (a və b) və xəyali (c və d) hissələrinin temperatur asılılıqları

Məlum olmuşdur ki, elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılığı ümumi tendensiyada aşağıdakı düstur ilə xarakterizə oluna bilər:

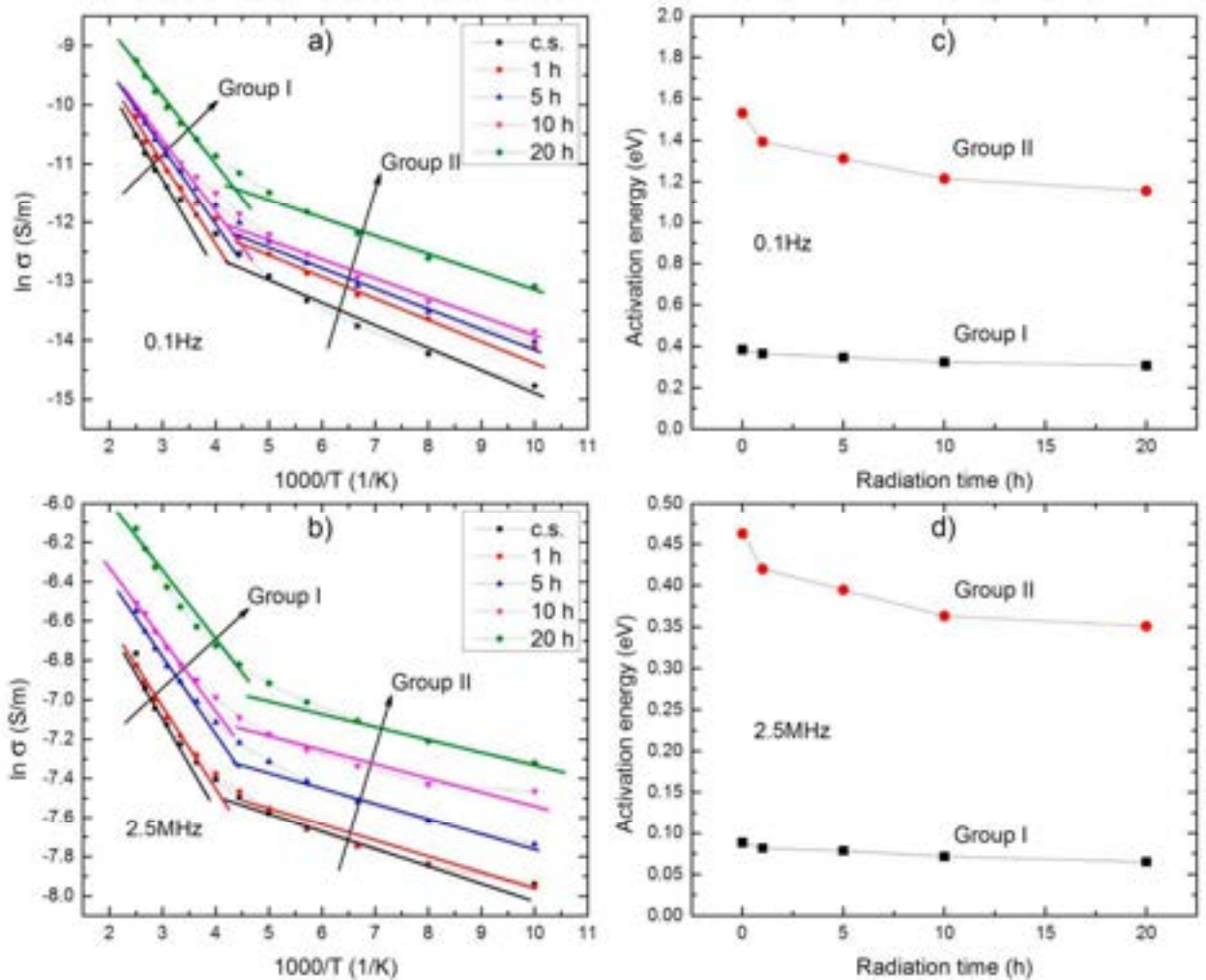
$$\sigma(T) = \sigma_0 + A_1 \exp\left[\frac{T}{B_1}\right] + A_2 \exp\left[\frac{T}{B_2}\right] + A_3 \exp\left[\frac{T}{B_3}\right] \quad (5.3)$$

və ya sadə halda:

$$\sigma(T) = \sigma_0 + A \exp [BT] \quad (5.4)$$

burada, σ_0 , A , A_1 , A_2 , A_3 , B , B_1 , B_2 , B_3 neytron selinin təsir müddətindən və tezlikdən asılı olan sabit kəmiyyətlərdir.

Alınmış təcrübi nəticələrdən nano 3C-SiC – in elektrik aktivləşmə enerjisi şüalanmadan öncə və sonra Arenius yanaşması ilə hesablanmışdır (Şəkil 5.1.9). Elektrik keçiriciliyinin natural loqarifmasınının $1000/T$ – dən asılılıq qrafikində meyl bucağının tangensi (Şəkil 5.1.9a və b) birbaşa aktivləşmə enerjisini ifadə edir.



Şəkil 5.1.9 İlkin halda (c.s.) və müxtəlif müddətlərdə (1,5,10,20 saat) neytron selinin təsirinə məruz qalmış nano 3C-SiC – in elektrik keçiriciliyinin $1000/T$ – dən və aktivləşmə enerjilərinin fərqli tezliklərdə neytron selinin təsir müddətindən asılılıqları

Məlumdur ki, aktivləşmə enerjisi fərqli tezlik və temperaturlarda fərqli qiymətlər alır. Hesablamalar təcrübələr aparılan tezliklərdə minimum (0.1Hz) və maksimum (2.5MHz) qiymətlər üçün aparılmışdır (**Şəkil 5.1.9a və b**). Hər iki tezlikdə, təcrübələr aparılan temperatur oblastında iki qrup aktivləşmə enerjisi müşahidə olunmuşdur. Aparılmış hesablamalara uyğun alınmış aktivləşmə enerjisinin şüalanma müddətindən asılılıq qrafikləri qurulmuşdur (**Şəkil 5.1.9c və d**). Məlum olmuşdur ki, bütün hallarda şüalanma müddətinin artması ilə aktivləşmə enerjisinin ədədi qiyməti azalır. Bunu isə şüalanma nəticəsində nümunə daxilində yaranan əlavə yükdaşıyıcılar və ya aşqar elementlərin konsentrasiyasının artması ilə izah etmək olar. Həmçinin, tezliyin artması ilə aktivləşmə enerjisində azalma müşahidə olunur. Bunu da səbəbi, daha dərin səviyyələrdə olan yükdaşıyıcıların nisbətən yüksək tezliklərdə keçiricilikdə aktiv iştirakıdır.

Neytron seli ilə şüalanma zamanı 3C-SiC nanomaterialının elektrik keçiriciliyinin ədədi qiymətinin artmasına bir neçə amil təsir göstərə bilər. İlk növbədə şüalanma zamanı yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının artması elektrik keçiriciliyini artırır. Əlavə olaraq, neytronlarla şüalanma zamanı 3C-SiC nanomaterialı daxilində yaranan yeni tip izotoplar keçiriciliyə fərqli təsirlər edir. Yaranmış yeni izotopların n və ya p tip aşqar olmasından asılı olaraq elektrik keçiriciliyi uyğun olaraq artıb və ya azala bilər. 3C-SiC nanomaterialında neytronlarla şüalanma zamanı P31 izotopu yaranır. Bu isə n tip aşqardır və P31 izotopunun konsentrasiyasının artması elektrik keçiriciliyinin ədədi qiymətinin artmasına səbəb olur.

5.2 Neytron şüalanmanın nanokristallik 3C-SiC-in impedans

spektrlərinə təsiri

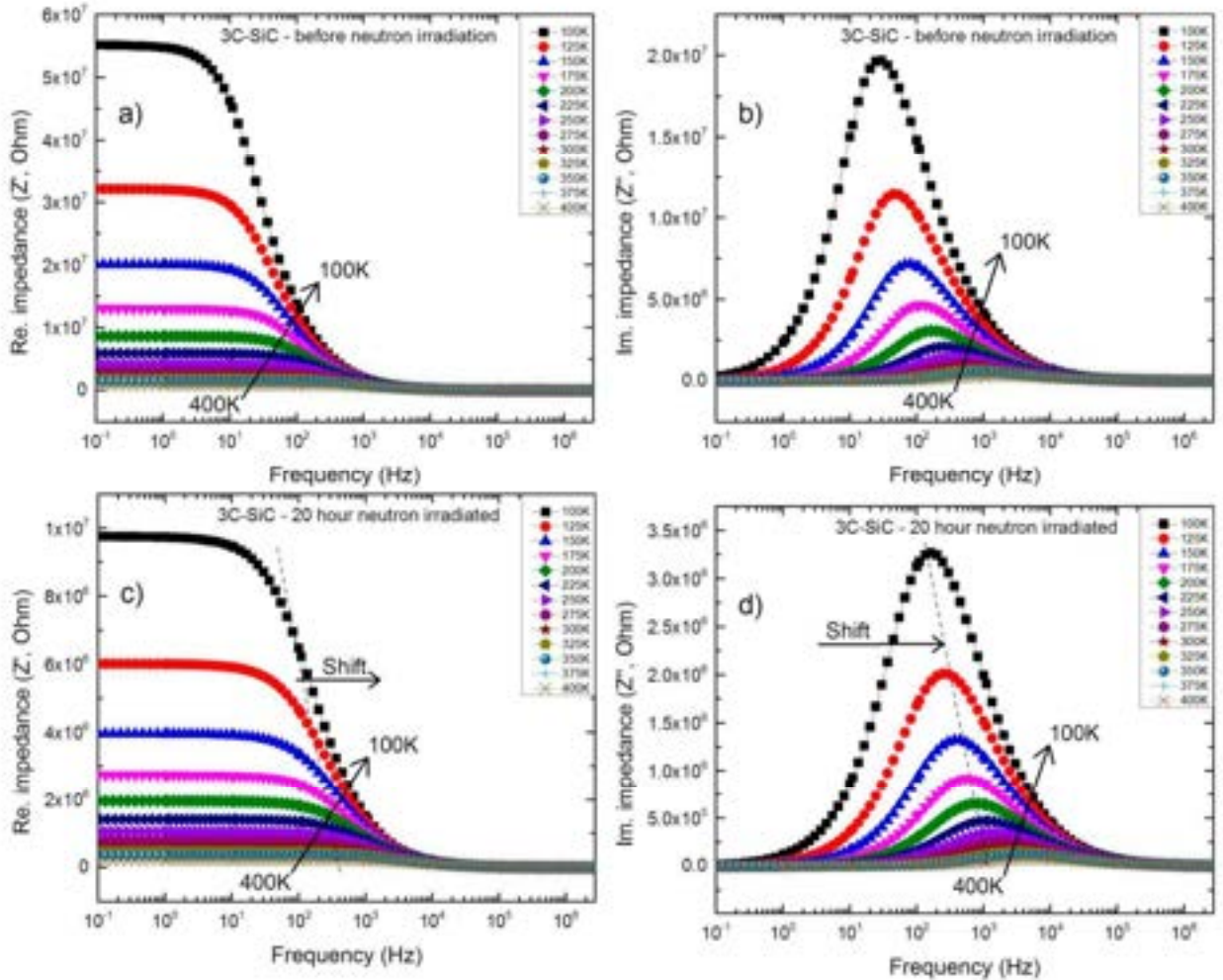
Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedans spektrlərində neytronlarla şüalanma effektləri şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli analiz edilmişdir. neytron selinin təsiri nəticəsində 3C-SiC nanokristallarının impedans spektrlərində müşahidə olunan rezonans hallar və sürüşmələr müxtəlif yanaşmalarla izah edilmişdir.

Həmçinin nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedansının həqiqi və xəyali hissələrinin qarşılıqlı asılılıqları nəzərdən keçirilmişdir. Nanomaterialın impedans spektrləri tezliyin 0.1Hz – 2.5MHz və temperaturun 100K – 400K aralıklarında araşdırılmışdır.

5.2.1 İmpedansın tezlik asılılığında neytron şüalanma effektləri

Ölçmələr zamanı nümunələrin impedans spektrləri temperaturun müxtəlif sabit qiymətlərində nəzərdən keçirilmişdir. Təcrübələr tezliyin 0.1Hz – 2.5MHz aralığında 88 müxtəlif sabit qiymətlərində aparılmışdır. Ölçmələr zamanı məlum olmuşdur ki, temperaturun müxtəlif qiymətlərində impedans spektrlərinin tezlik asılılığı fərqlidir. Biz burada ilkin, müxtəlif müddətlərdə şüalanmış və temperaturun fərqli qiymətlərində impedans spektrlərinin tezlik asılılıqlarını nəzərdən keçirmişik. İlk olaraq temperaturun müxtəlif qiymətlərində şüalanmadan öncə və sonra ümumi halda impedans spektrlərini nəzərdən keçirək (**Şəkil 5.2.1**). Şəkildən görüldüyü kimi, şüalanmadan əvvəl və sonra nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedansının həqiqi və xəyali hissələrində effektiv hallar mövcuddur. İmpedansın həqiqi hissəsinin tezlik asılılığından görüldüyü kimi, temperaturun və tezliyin artması ilə impedansın ədədi qiyməti azalır (**Şəkil 5.2.1a, c**). Bu isə temperatur və tezliyin təsiri ilə digər fiziki parametrlərin dəyişməsinə səbəb olur [119, s.3086; 120, s.753; 123, s.30; 124, s.23; 125, s.44; 126, s.191; 127, s.99; 128, s.995; 129, s.1830002; 130, s.1750068]. Həmçinin, tezliyin müəyyən qiymətində sıçrayılı keçid mövcuddur ki, bunu da həmin tezlikdə mövcud relaksor hal kimi qiymətləndirmək olar. Anoloji sıçrayışlı hal nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedansının xəyali hissələrində də müşahidə olunur (**Şəkil 5.2.1b, d**). Digər tərəfdən, şüalanmadan sonra impedans spektrlərində tezliyin artması istiqamətində sürüşmələr (təqribən bir tərtib, 10 dəfə) müşahidə edilmişdir (**Şəkil 5.2.1c, d**). Eyni zamanda, neytronlarla şüalanma nəticəsində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedansının ədədi qiyməti təqribən 5.5 dəfəyə qədər azalır. Neytronlarla şüalanma nəticəsində impedans spektrlərində müşahidə olunan azalmalar və sürüşmələrin səbəbi şüalanma nəticəsində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaranan aşqar elementlər və ya əlavə yükdaşıyıcılar ilə izah olunur

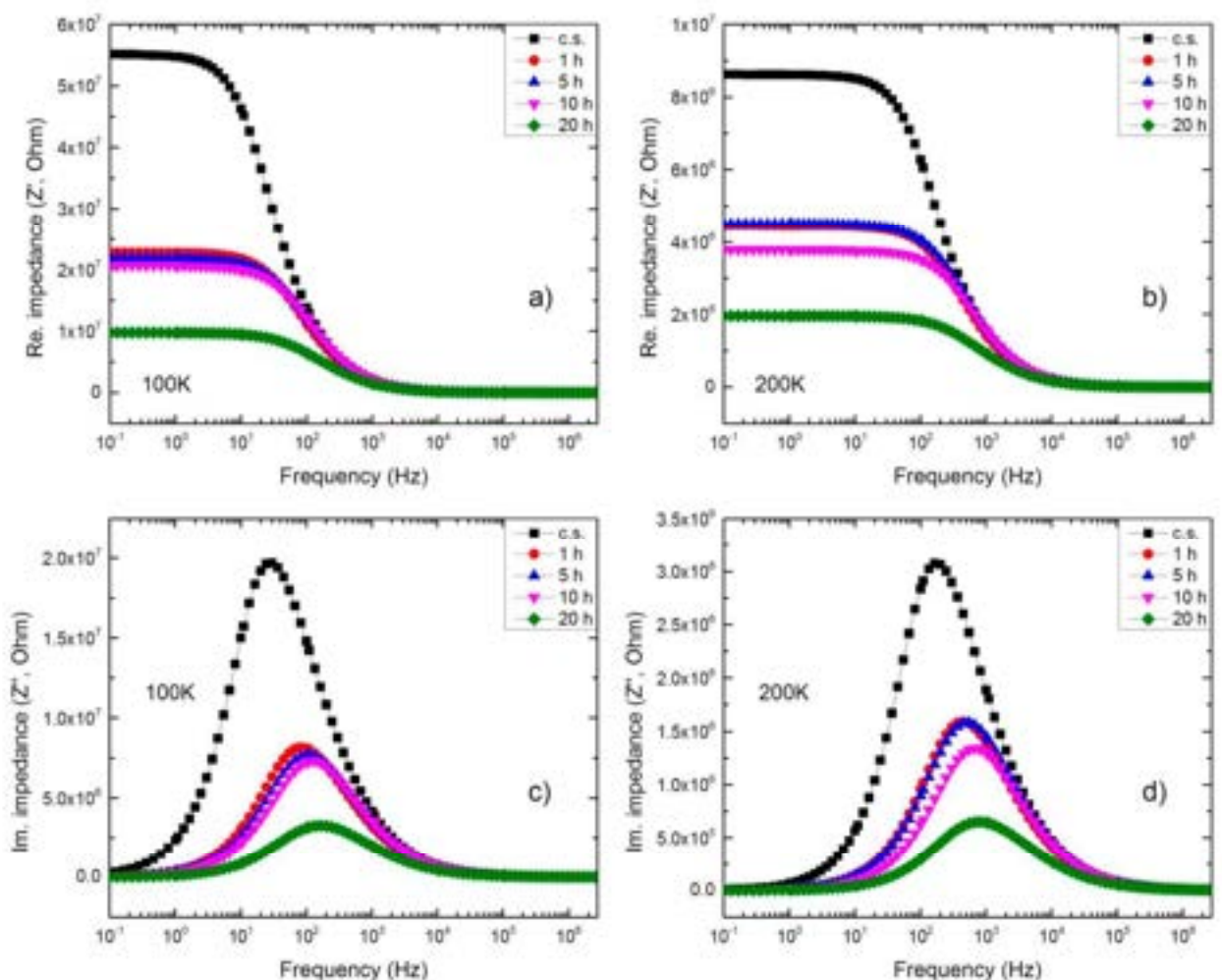
[119, s.3086; 120, s.753; 123, s.30; 124, s.23; 125, s.44; 126, s.191; 127, s.99; 128, s.995; 129, s.1830002; 130, s.1750068]. Temperaturun 100K və 200K qiymətlərində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin imedans spektrləri neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli nəzərdən keçirilmişdir (Şəkil 5.2.2).



Şəkil 5.2.1 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin neytron şüalanmadan öncə və sonra impedans spektrləri.

Nisbətən aşağı tezliklər oblastında impedansın həqiqi hissəsinin neytronlarla şüalanmadan sonra azalması aşkar müşahidə olunur (Şəkil 5.2.2a, b). Tezliyin təqribən 10^3 Hz qiyməti ətrafında rezonans hal müşahidə olunur və nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedansının həqiqi hissəsi sıçrayışla azalır. Rezonans hal nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedansının xəyali hissəsələrinin tezlik asılılıqlarında aşkar müşahidə olunur (Şəkil 5.2.2c, d). Həmçinin impedansın xəyali

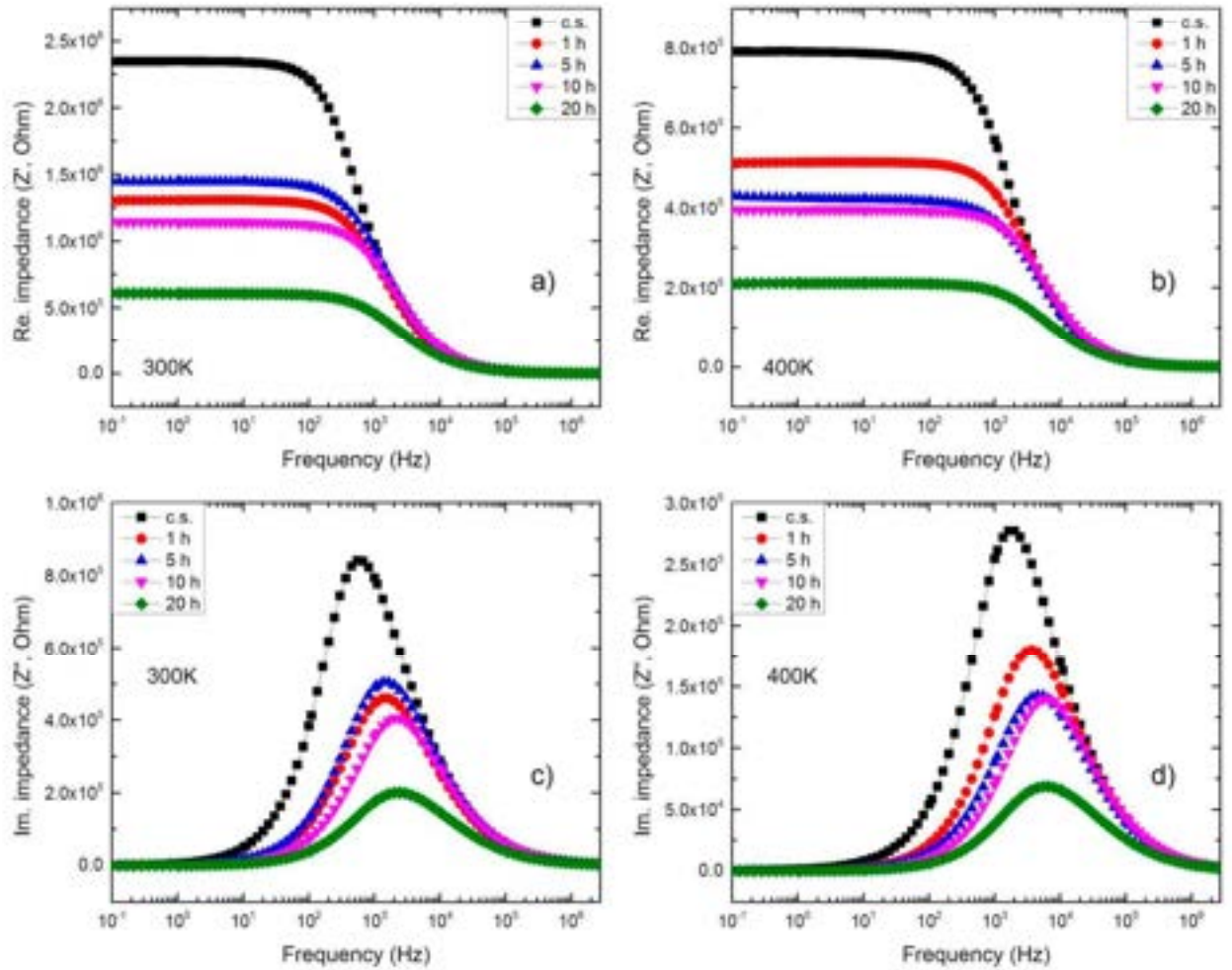
hissəsələrinin tezlik asılılıqlarında neytronlarla şüalanma müddətlərinə mütənəsib olaraq tezliyin artması istiqamətində sürüşmələr müşahidə olunur. Mövcud sürüşmələr neytronlarla şüalanma müddətinə uyğun olaraq nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaranan aşqar elementlərlə asanlıqla izah oluna bilər [119, s.3086; 120, s.753; 123, s.30; 124, s.23; 125, s.44; 126, s.191; 127, s.99; 128, s.995; 129, s.1830002; 130, s.1750068]. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedans spektrlərində anoloji hallar temperaturun 300K və 400K qiymətlərində də müşahidə olunur (Şəkil 5.2.3).



Şəkil 5.2.2 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin 100K və 200K temperaturlarda neytron şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli impedans spektrləri.

300K və 400K temperaturlarda impedansın həqiqi hissəsinin sıçrayışla azalması uyğun olaraq təqribən $f > 5 \times 10^3 \text{ Hz}$ və $f > 10^4 \text{ Hz}$ tezliklərdə müşahidə olunur

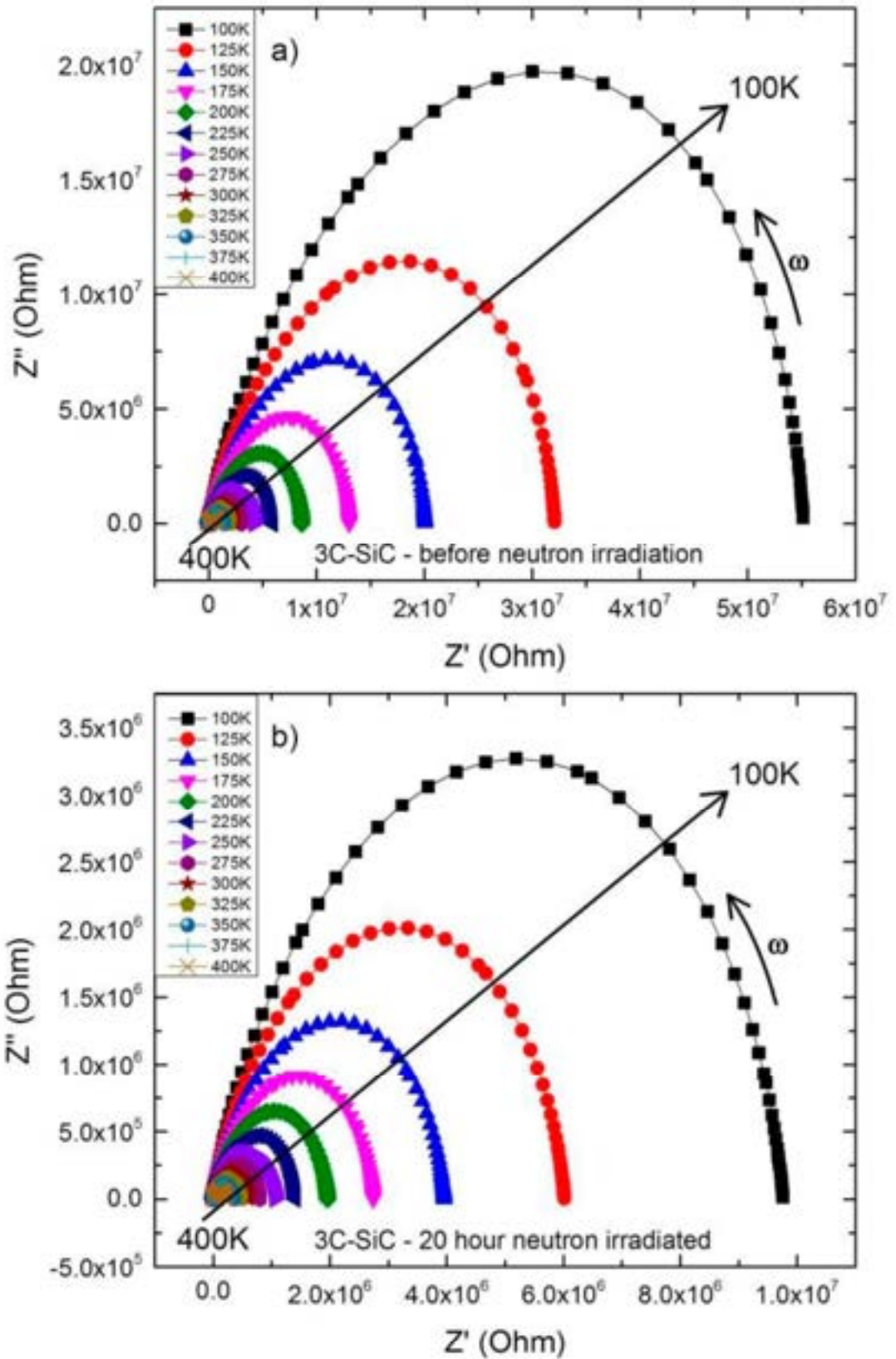
(Şəkil 5.2.3a, b). $10^3\text{Hz} - 10^4\text{Hz}$ tezliklər aralığında nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedansının xəyali hissəsələrində rezonans hallar mövcuddur (Şəkil 3c, d). Ümumi yavaşmada temperaturun artması ilə impedans spektrlərində müşahidə olunan rezonans hallar tezliyin artması istiqamətində sürüşür (Şəkil 5.2.2, 5.2.3). Belə ki, 100K temperaturda ehtəka tezliyin 10^3Hz qiyməti ətrafında müşahidə olunurdusa, 400K temperaturda ehtəka 10^4Hz tezlikdə müşahidə olunur.



Şəkil 5.2.3 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin 300K və 400K temperaturlarda neytron şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli impedans spektrləri.

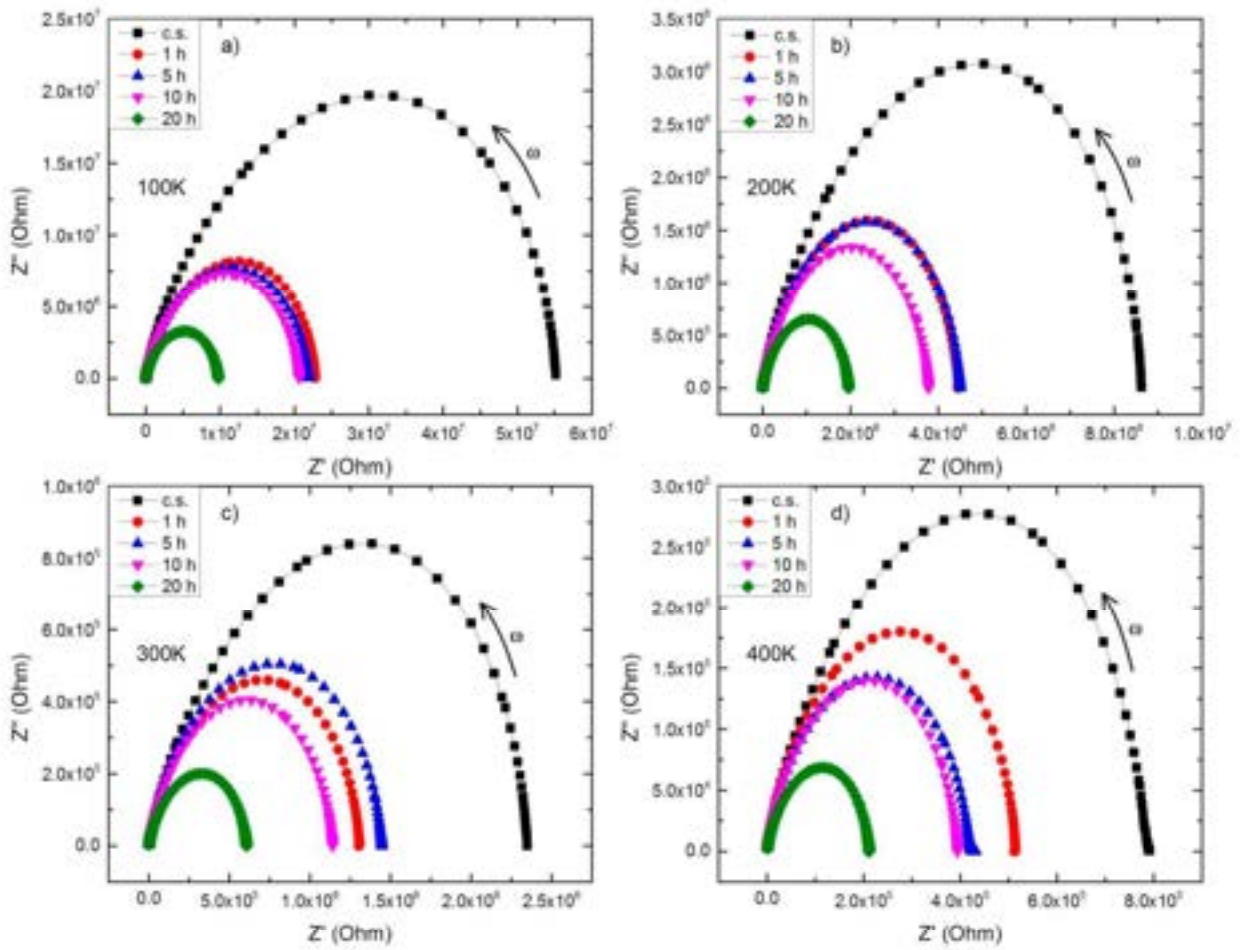
Neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedansının həqiqi və xəyali hissələrinin qarşılıqlı asılılıqlarını nəzərdən keçirək (Şəkil 5.2.4). Şəkildən görüldüyü kimi neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra müşahidə olunan əyrilərin tipində heç bir dəyişiklik müşahidə olunmur (ədədi qiymət

və sürüşmələr istisna olmaqla). Şüalanmadan öncə və sonra temperaturun təsiri ilə, impedansın ədədi qiymətinin azalması aşkar müşahidə olunur.



Şəkil 5.2.4 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra impedansının həqiqi və xəyali hissələrinin qarşılıqlı asılılıqları.

Neytronlarla şüalanmandan öncə və sonra fərqli sabit temperaturlarda impedansın həqiqi və xəyali hissələrinin qarşılıqlı asılılıqlarından şüalanma effektləri aşkar görünür (Şəkil 5.2.5). Neytron selinin təsiri ilə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedansının bütün temperaturlarda azalması müşahidə olunur. Bu isə, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin digər fiziki xassələrinə birbaşa təsir edir. Təcrübi nəticələrdən alınmış bu tip əyriləri izah etmək üçün uyğun yollardan biri Cole – Cole yanaşmasıdır.



Şəkil 5.2.5 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin müxtəlif sabit temperaturlarda (100K, 200K, 300K və 400K) impedansının həqiqi və xəyali hissələrinin neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli qarşılıqlı asılılıqları.

Təcrübələrdən alınmış nəticələri ümumi şəkildə aşağıdakı Cole – Cole münasibəti ifadə etmək olar:

$$Z^* = R_\infty + \frac{R_0 - R_\infty}{1 + (i\omega\tau)^{1-h}} \quad (5.5)$$

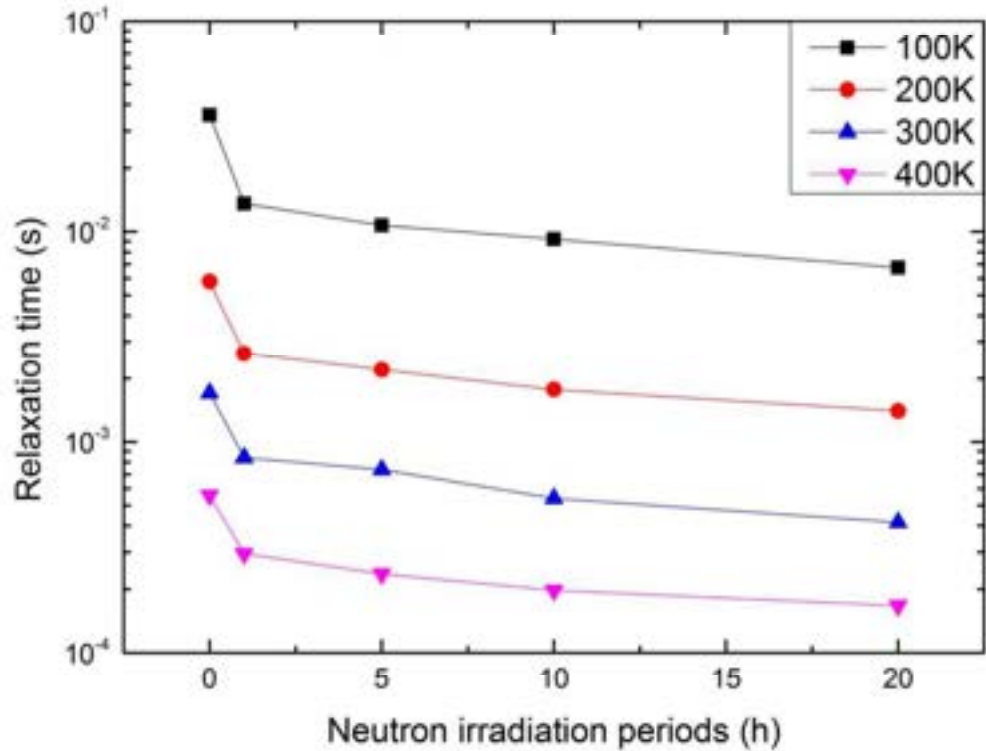
burada R_0 - R_∞ fəza sabiti adlanan həd, R_0 və R_∞ isə uyğun olaraq tezliyin aşağı və yuxarı qiymətlərində müqavimət, h – relaksasiya vaxtının paylanması xarakterizə edən parametrdir. Monodispersiv relaksasiya zamanı $h = 0$ və $0 < h < 1$ sistemdə relaksasiya müddətinin paylanması göstərir. h parametri Cole – Cole diaqramında qövsün yalnız yuxarıda qalan hissəsi ilə mərkəzi yerindən təyin oluna bilər [78, s.214103; 79, s.1450012]. Şəkil 5.2.5 – dən görünündüyü kimi relaksasiya spektrinin polidispersivliyi şüalanma müddətinin artması ilə artır. Alınmış bu nəticələr qəbulolunandır [78, s.214103; 79, s.1450012; 110, s.391; 114, s.51702] və bu onu göstərir ki, proses bir relaksasiya müddəti ilə çox yaxşı izah oluna bilər. Cole – Cole diaqramlarına uyğun nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin müxtəlif sabit temperaturatlarda relaksasiya müddətləri hesablanmışdır. Hesablanmalardan alınmış relaksasiya müddətlərinin ədədi qiymətləri cədvəl 5.2 – də verilmişdir.

Cədvəl 5.2.1 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin müxtəlif sabit temperaturatlarda (100K, 200K, 300K və 400K) relaksasiya müddətləri

Nümunə	Relaksasiya müddəti (san)			
	100K	200K	300K	400K
c.s.	$3.57 \cdot 10^{-2}$	$5.8 \cdot 10^{-3}$	$1.7 \cdot 10^{-3}$	$5.57 \cdot 10^{-4}$
1h	$1.36 \cdot 10^{-2}$	$2.63 \cdot 10^{-3}$	$8.4 \cdot 10^{-4}$	$2.95 \cdot 10^{-4}$
5h	$1.07 \cdot 10^{-2}$	$2.2 \cdot 10^{-3}$	$7.37 \cdot 10^{-4}$	$2.37 \cdot 10^{-4}$
10h	$9.2 \cdot 10^{-3}$	$1.77 \cdot 10^{-3}$	$5.4 \cdot 10^{-4}$	$1.98 \cdot 10^{-4}$
20h	$6.75 \cdot 10^{-3}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$	$4.15 \cdot 10^{-4}$	$1.67 \cdot 10^{-4}$

Neytronlarla şüalanma və temperaturun təsir effektlərini daha aşkar müşahidə etmək üçün müxtəlif sabit temperaturatlarda relaksasiya müddətinin şüalanma vaxtından asılılığını nəzərdən keçirək (Şəkil 5.2.6). Şəkildən göründüyü kimi, bütün

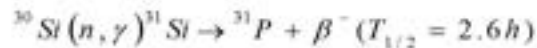
temperaturlarda şüalanma müddətinin artması ilə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin relaksasiya müddətləri azalır. Relaksasiya müddətinin neytronlarla şüalanmaya mütənasib olaraq azalması yaranmış yeni aşqar elementlərlə əlaqədar ola bilər. Əlavə olaraq, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin amorflaşması və ya aqlomerasiyası birbaşa nümunənin polyarlaşma dərəcəsinə təsir edir. Bu isə öz növbəsində, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin relaksasiya müddətinin azalmasına təsir göstərən digər faktor ola bilər.



Şəkil 5.2.6 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin müxtəlif sabit temperaturatlarda (100K, 200K, 300K və 400K) relaksasiya müddətinin şüalanma vaxtından asılılıqları.

Neytronlarla şüalanmanın nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedans spektrlərinə təsirinin əsas səbəbi şüalanma nəticəsində nümunə daxilində yaranan əlavə aşqar elementlərdir. Təbii halda nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində mövcud silisiumun 92.23% - i ^{28}Si , 4.67% - ^{29}Si və 3.1% - i ^{30}Si izotopunun payına düşür. Sadalanan silisium izotoplarının hər üçü stabil izotopdur və heç bir radioaktiv çevrilməyə məruz qalmır. Lakin, neytronla şüalanma zamanı, ^{30}Si izotopu bir neytron zəbt edərək ^{31}Si radioaktiv izotopuna çevirilir [208, s.3672; 292, c.1, s.231]. ^{31}Si

izotopu isə 157.36 dəq yarımparçalanma müddətinə malik β aktiv izotopdur. β parçalanma nəticəsində ^{31}Si izotopu ^{31}P izotopuna çevrilir və ^{31}P izotopu 3C-SiC nanomaterialında n-tip aşqar olur. Neytronlarla şüalanma zamanı ^{31}P izotopunun yaranmasını sxematik olaraq aşağıdakı kimi təsvir etmək olar:

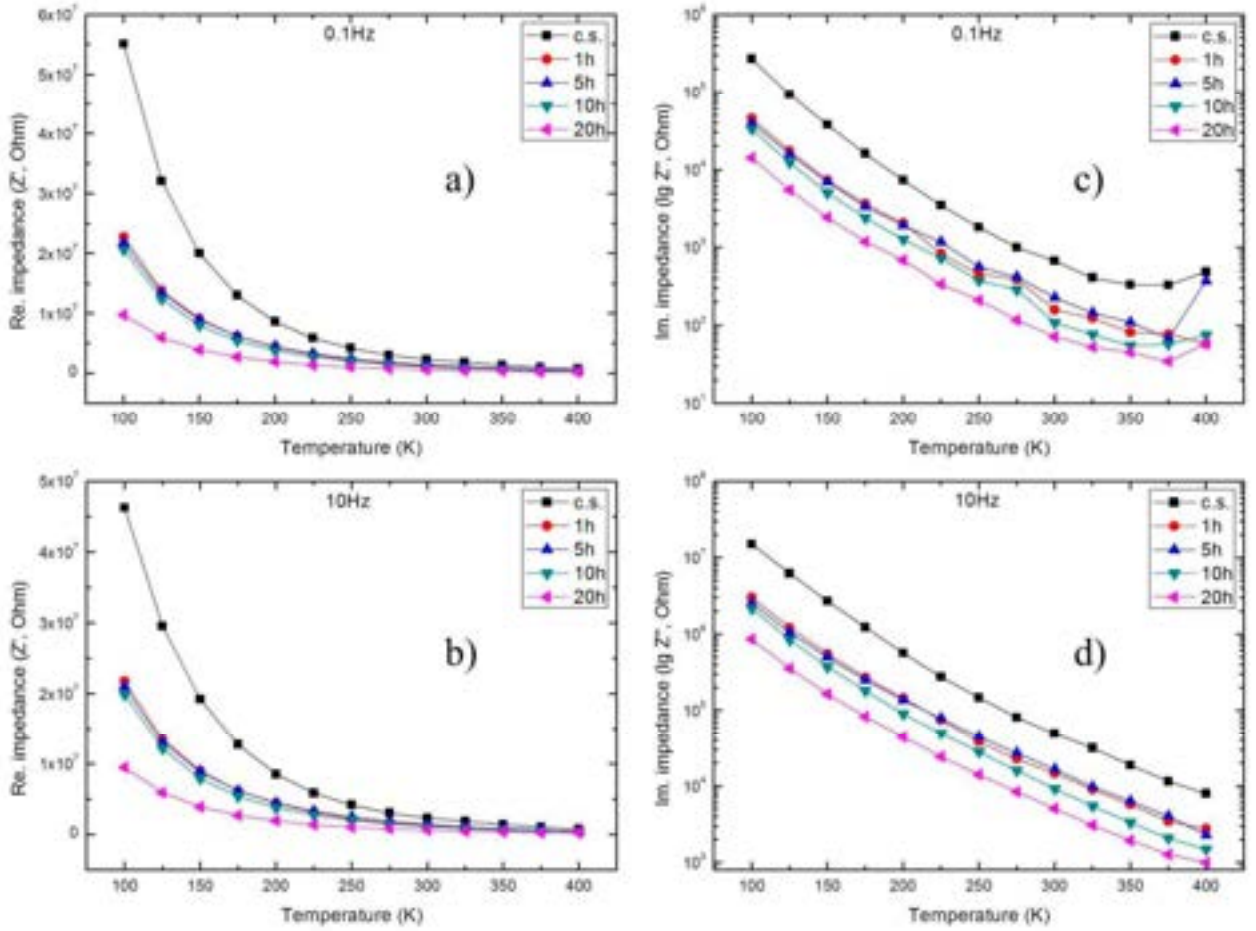


Neytronlarla şüalanma müddətinə mütənasib olaraq ^{31}P izotopunun konsentrasiyasının artması nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedansının azalmasına səbəb olur. Qeyd edək ki, çox aşağı ehtimalla ikinci nüvə reaksiyası baş verə bilər. ^{31}P izotopu bir neytron zəbt edərək ^{32}P izotopuna çevrilə bilər. ^{32}P izotopu isə 14 gün yarımparçalanma müddətinə malik β aktiv izotopdur ki, bu da stabil ^{32}S izotopuna çevrilir. Bunu qeyd etmək önəmlidir ki, ^{32}S izotopunun yaranma ehtimalı çox aşağıdır və miqdarı birbaşa ^{31}P izotopunun konsentrasiyasından asılıdır. Təqdim olunan işdə ^{32}S stabil izotopunun yaranma ehtialı çox aşağı olduğu üçün impedans spektrlərinə təsiri nəzərə alınmayıb.

5.2.2 İmpedansın temperatur asılılığında neytron şüalanma effektləri

Ölçmələr zamanı nümunələrin impedans spektrləri temperaturun funksiyası kimi tezliyin müxtəlif sabit qiymətlərində nəzərdən keçirilmişdir. Təcrübələr tezliyin 0.1Hz – 2.5MHz aralığında 88 müxtəlif sabit qiymətlərində aparılmışdır və ölçmələr zamanı məlum olmuşdur ki, tezliyin müxtəlif qiymətlərində impedans spektrləri fərqlidir. Tezlik aralığının geniş olduğunu və sabit qiymətlərin çoxluğunu nəzərə alaraq bu tezlik aralıqları şərti olaraq üç qrupa ayrılmışdır. Hər qrupda 2 tezlik olmaqla ümumilikdə 6 sabit tezlik oblastında impedans spektrləri temperaturun funksiyası kimi nəzərdən keçirilmişdir. Birinci qrupu şərti olaraq aşağı tezliklər (0.1Hz və 10Hz) oblastı, ikinci qrupu orta tezliklər (1kHz və 0.1MHz) oblastı və üçüncü qrupu yüksək tezliklər (1MHz və 2.5MHz) oblastına ayırmaq olar. İlk olaraq aşağı tezlik oblastında impedansın temperatur asılılıqları nəzərdən keçirilmişdir

(Şəkil 5.2.7).

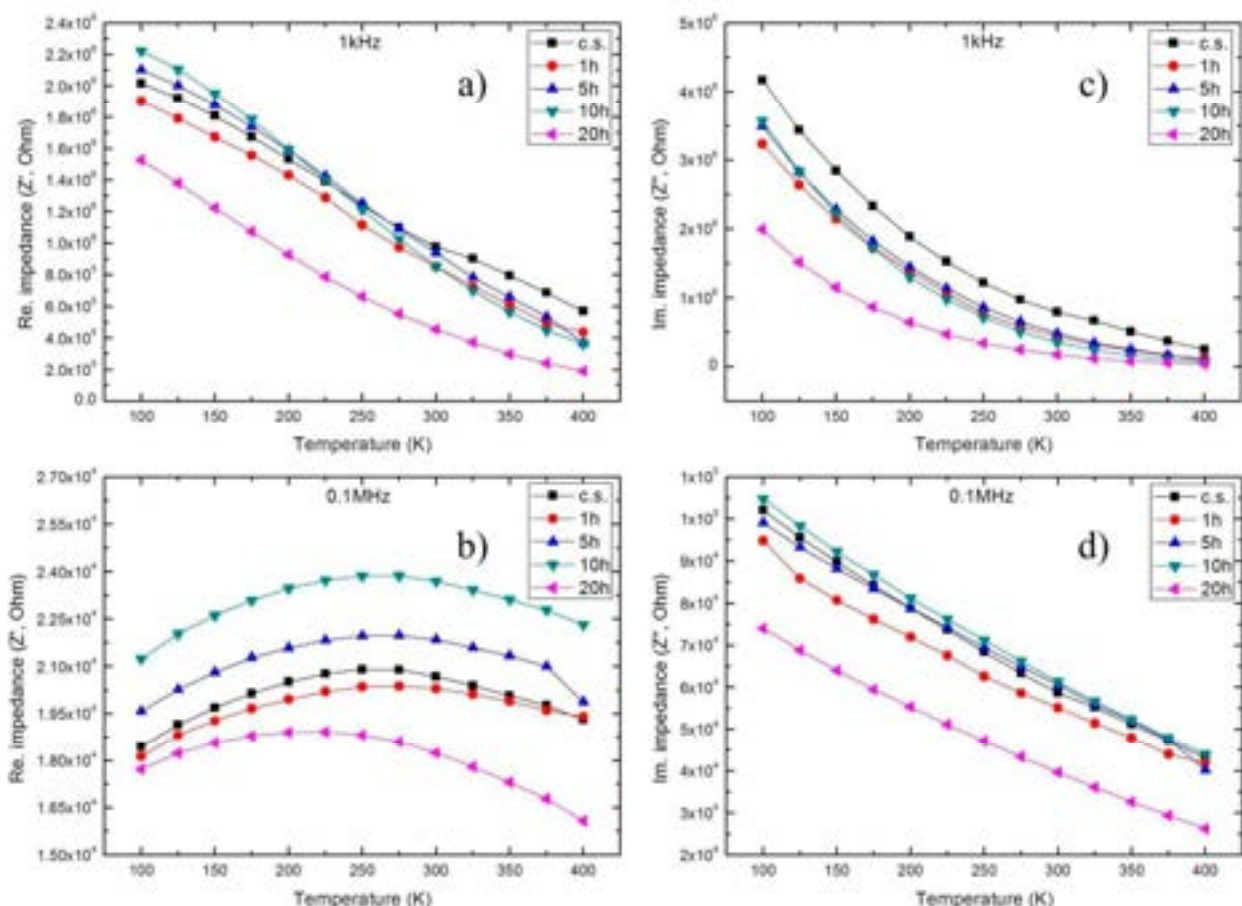


Şəkil 5.2.7 ilkin halda (c.s.) və müxtəlif müddətlərdə (1,5,10,20 saat) neytron selinin təsirinə məruz qalmış nanokristallik 3C-SiC – in aşağı tezlik oblastında müxtəlif tezliklərdə impedans spektrləri

Aşağı tezlik oblastında neytron şüalanmanın təsiri ilə 3C-SiC nanokristallarının impedansında azalmalar müşahidə olunur. Bu isə, şüalanma zamanı yeni yaranan neytron transmutasiya elementləri ilə izah edilə bilər. 3C-SiC nanokristallarında neytron transmutasiya elementləri, ^{30}Si izotoplarının bir neytron zəbt edərək ^{31}Si radioaktiv izotoplarına çevirilməsi nəticəsində yaranır [179, s.360]. Neytronlarla şüalanma nəticəsində yaranmış, ^{31}Si izotopu təqribən 2.6 saat yarımparçalanma müddətinə malik β aktiv izotopdur. β parçalanma nəticəsində ^{31}Si izotopu ^{31}P izotopuna çevirilir ki, bu da 3C-SiC nanomaterialında n-tip aşqardır. Neytronlarla şüalanma zamanı ^{31}P izotopunun yaranması $^{30}\text{Si}(n, \gamma)^{31}\text{Si} \rightarrow ^{31}\text{P} + \beta^- (T_{1/2} = 2.6\text{h})$ sxemi üzrə baş verir.

Neytronlarla şüalanma nəticəsində yaranmış ^{31}P izotoplarının konsentrasiyasının artması impedansın ədədi qiymətinin azalmasına səbəb olur. Eyni zamanda, temperaturun artması ilə impedansın ədədi qiyməti azalır. Temperaturun artması ilə impedansın həqiqi hissəsində daha kəskin azalma müşahidə olunur (**Şəkil 5.2.7a,b**). Baxmayaraq ki, impedansın xəyali hissəsində azalma demək olar ki xətti karakter daşıyır (**Şəkil 5.2.7c,d**). Ümumi yanaşmada impedansın temperatur asılılıqları həqiqi hissə üçün hiperbolik və xəyali hissə üçün isə xətti xarakterə malikdir. Hər iki halda temperaturun artması ilə elektronların əlavə enerji alması nəticəsində impedansın ədədi qiyməti azalır. Bu isə, 3C-SiC nanokristallarının yarımkəçirici təbiətli olmasının nəticəsidir. Orta tezliklərdə impedansın temperatur asılılığında fərqli situasiya müşahidə olunur (**Şəkil 5.2.8**).

Belə ki, orta tezliklər oblastında impedansın temperatur asılılıqları fərqli xarakterə malikdir. Tezliyin 1kHz qiymətində $f(Z')=f(T)$ asılılıqlarında demək olar ki, xəttilik müşahidə olunur (**Şəkil 5.2.8a**). Eyni zamanda neytron şüalanmasının təsir müddətinin və temperaturun artması ilə Z' -in ədədi qiyməti azalır. Tezliyin nisbətən böyük 0.1MHz qiymətində, təqribən 250K temperatura qədər temperaturun artması ilə impedansın həqiqi hissəsinin ədədi qiyməti artır (**Şəkil 5.2.8b**). 250K-400K aralığında isə $f(Z')=f(T)$ asılılıqlarında xarakterik azalma müşahidə olunur. Anoloji hal nisbətən yüksək tezliklər oblastında da müşahidə olunur (**Şəkil 5.2.8a,b**). 3C-SiC nanokristalları qadğan olunmuş zolağının eni 2.2eV olan yarımkəçirici olduğu üçün tezliyin artması impedans spektrlərində dəyişikliyə səbəb olur. Ola bilsin ki, tezliyin nisbətən böyük qiymətlərində 3C-SiC nanokristallarında elektron keçiricilik üstünlük təşkil edir (metallik keçid). Məhz bu səbəbdən, tezliyin 0.1MHz, 1MHz və 2.5MHz qiymətlərində temperaturun uyğun olaraq 250K, 325K və 370K qiymətlərinə qədər impedansın ədədi qiyməti metallik materiallara xas olan xarakterə malik olur (**Şəkil 5.2.8b, 5.2.9a,b**). Belə ki, temperaturun artması ilə 0.1MHz, 1MHz və 2.5MHz tezliklərdə impedansın həqiqi hissəsinin ədədi qiyməti artır. Digər tərəfdən, temperaturun müəyyən qiymətindən sonra yarımkəçiricilərə uyğun olaraq temperaturun artması ilə impedans azalır. Bunu isə belə izah etmək olar ki, temperaturun müəyyən qiymətinə qədər yükdaşıyıcılar metallik təbiətlidir.



Şəkil 5.2.8 İlkin halda (c.s.) və müxtəlif müddətlərdə (1,5,10,20 saat) neytron selinin təsirinə məruz qalmış nanokristallik 3C-SiC – in orta tezlik oblastında müxtəlif tezliklərdə impedans spektrləri

Temperaturun 250K, 325K və 370K qiymətlərindən sonra yarımkəçiricilərə xas xarakteristika müşahidə olunur. Temperaturun 250K, 325K və 370K qiymətləri 3C-SiC nanokristalları üçün metal-yarımkəçirici keçid (metal–semiconductor transition – T_{MS}) temperaturudur [69, s.92; 76, s.188; 164, s.195; 165, s.292]. Beləliklə, tezliyin 0.1MHz, 1MHz və 2.5MHz qiymətlərinə uyğun olaraq $T_{MS} = 250K, 325K$ və $370K$ temperaturlarda 3C-SiC nanokristallarında metal-yarımkəçirici keçidi müşahidə olurlar. Eyni zamanda, neytron şüalanmanın təsir müddətinin artması ilə, T_{MS} – in ədədi qiyməti temperaturun azalması istiqamətində sürüşür. Bunu isə, neytron çevrilmələri, rabitə sürüşməsi (dangling bonds), defekt və ya əlavə yükdaşıyıcıların yaranması ilə izah etmək olar. Qeyd edək ki, real halda sistem, ideal

komponentlərlə izah edilə bilmir və tutum (capacitor) sabit faza elementi (constant phase element - CPE) ilə izah edilir [69, s.92; 76, s.190; 164, s.195; 165, s.294]. Niquist (Nyquist) yanaşması ilə, elementar müqavimətlər seriyası R_g (grain resistance - R_g), elementar müqavimətin sərhədi R_{gb} (grain boundary resistance - R_{gb}) və impedansın sabit faza elementi Z_{CPE} (constant phase element impedance - Z_{CPE}) ilə kombinasiya olunur [69, s.93; 76, s.191; 164, s.197; 165, s.294]. Nümunənin CPE impedansı T və p kimi iki komponentlə təyin oluna bilər:

$$Z_{CPE} = \frac{1}{T(j\omega)^p} \quad (5.6)$$

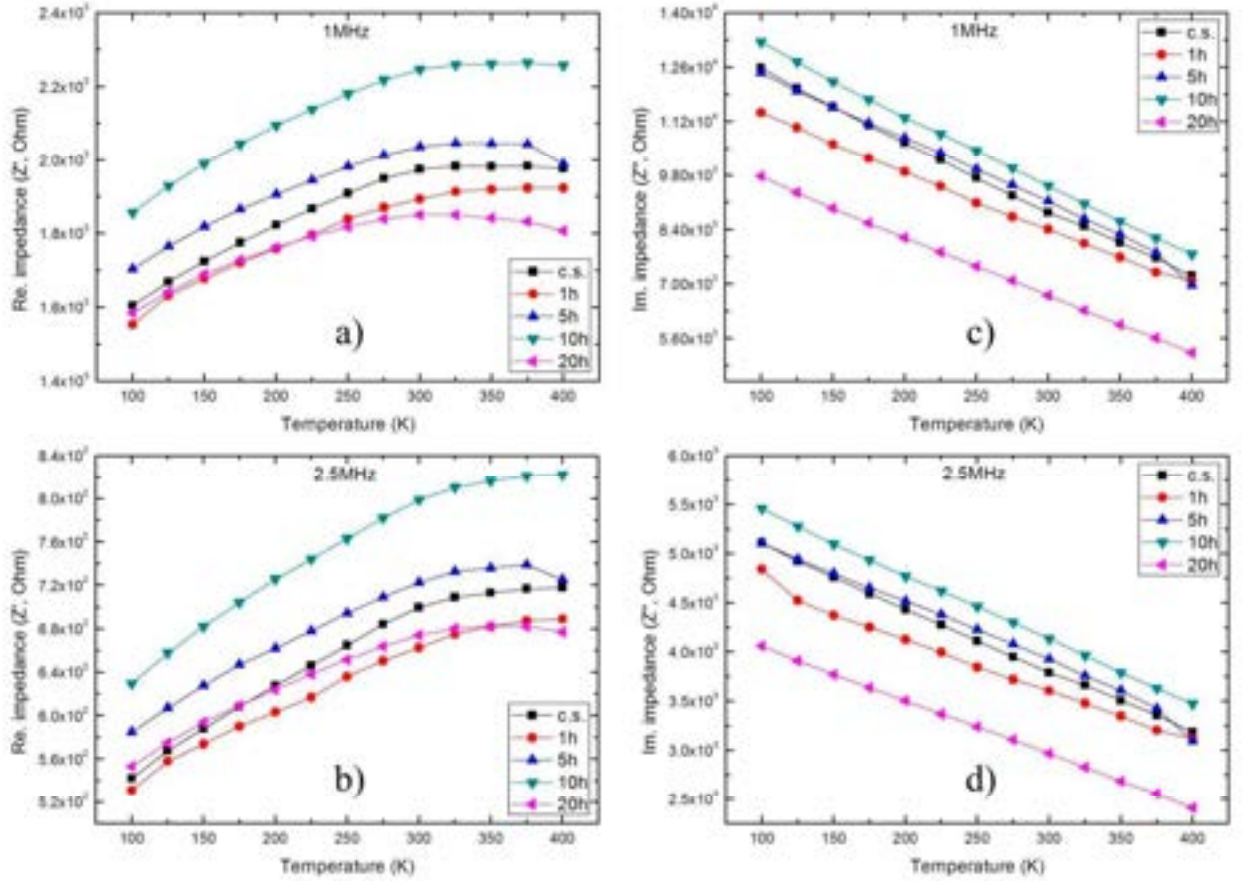
burada T - tutumun CPE elementinin qiyməti, $j = \sqrt{-1}$ və p – eksponensial faktordur ($0 \leq p \leq 1$). Əgər $p=1$ olarsa, bu elementin tutum təbiətini, $p=0.5$ olarsa bu Warburg impedansını və əgər $p=0$ olarsa bu sadə müqavimət halını izah edir [76, s.188]. Qeyd etmək önəmlidir ki, son tənlikdə mövcud T və p parametrləri temperaturdan asılıdır. Real halda sistemin impedansının həqiqi və xəyali hissələri aşağıdakı bərabərliklərlə ifadə edilə bilər:

$$Z' = R_g + \frac{R_{gb} + \left(1 + R_{gb}T\omega^p \cos\left(\frac{p\pi}{2}\right)\right)}{\left[1 + R_{gb}T\omega^p \cos\left(\frac{p\pi}{2}\right)\right]^2 + \left[R_{gb}T\omega^p \sin\left(\frac{p\pi}{2}\right)\right]^2} \quad (5.7)$$

$$-Z'' = \frac{R_{gb}^2 T \omega^p \sin\left(\frac{p\pi}{2}\right)}{\left[1 + R_{gb}T\omega^p \cos\left(\frac{p\pi}{2}\right)\right]^2 + \left[R_{gb}T\omega^p \sin\left(\frac{p\pi}{2}\right)\right]^2} \quad (5.8)$$

Qeyd edək ki, R_g və R_{gb} müqavimətləri $T < T_{MS}$ intervalında temperaturun artması ilə artırlar (metallik davranış - metallic behavior). Eyni zamanda, $T > T_{MS}$

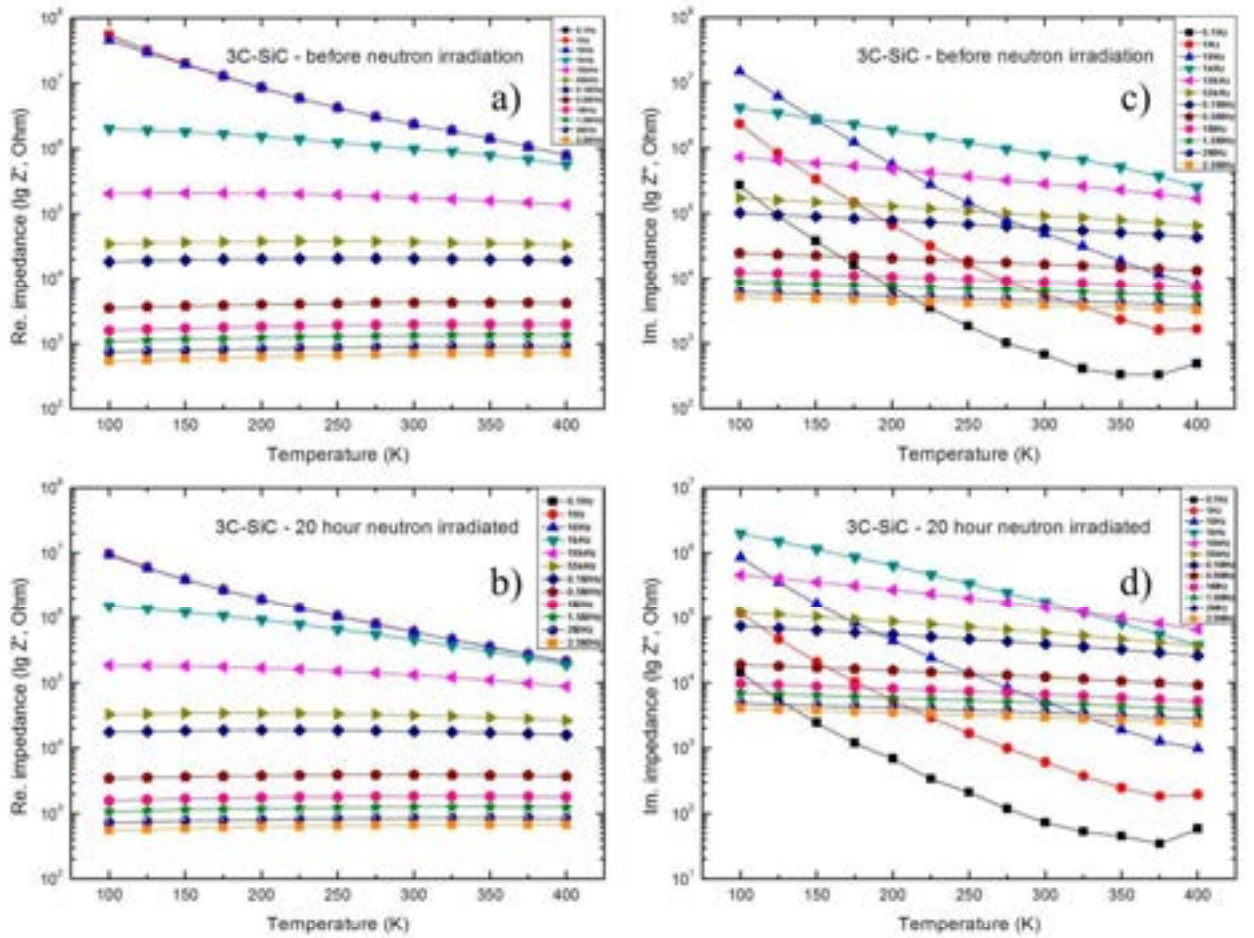
intervalında R_g və R_{gb} müqavimətləri temperaturdan tərs mütənasib asılıdırlar (yarımkeçiricilik davranışı - semiconducting behavior). Digər materiallarda da bu nəticələr müşahidə edilmişdir və qəbul olunandır [69, s.95; 76, s.191; 164, s.195; 165, s.292].



Şəkil 5.2.9 İlk halda (c.s.) və müxtəlif müddətlərdə (1,5,10,20 saat) neytron selinin təsirinə məruz qalmış nanokristallik 3C-SiC – in yüksək tezlik oblastında müxtəlif tezliklərdə impedans spektrləri

Tezliyin 0.1MHz, 1MHz və 2.5MHz qiymətlərində $f(Z')=f(T)$ asılılıqlarında mövcud maksimumların temperaturun artması istiqamətinə sürüşməsi açıq aydın müşahidə olunur (Şəkil 5.2.8b, 5.2.9a,b). Belə ki, 0.1MHz tezlikdə maksimum 250K – də, 1MHz tezlikdə maksimum temperaturun 300K-350K intervalına düşdüyü halda, 2.5MHz tezlikdə maksimum 350K-dən yuxarı temperaturlarda müşahidə olunur. Bunu isə belə izah etmək olar ki, tezliyin artması ilə daha çox elektron keçiricilikdə iştirak edir. Bunun nəticəsində metal-yarımkeçirici keçidi dahaha yüksək

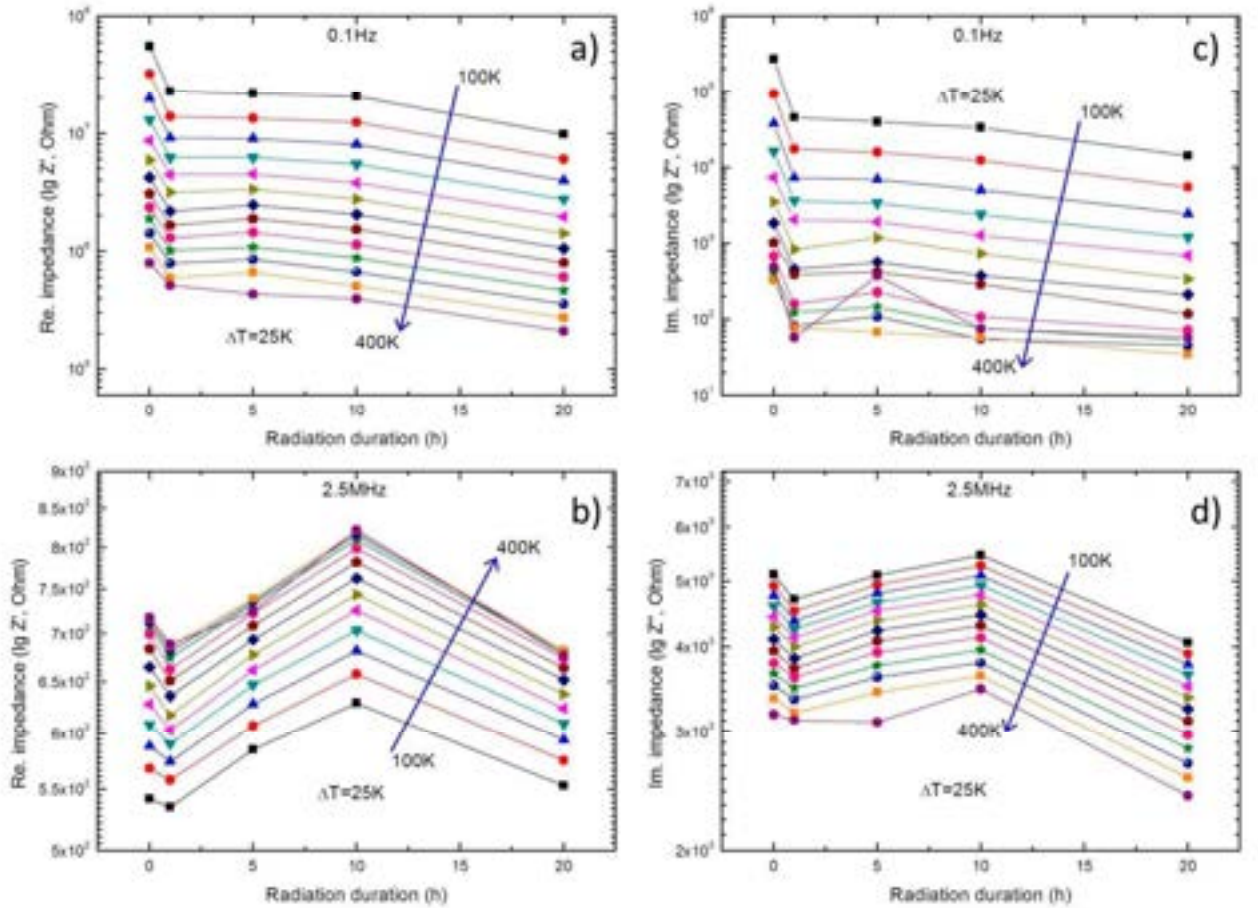
temperaturlarda mümkün olur. Həmçinin, impedansın ədədi qiyməti tezliyin artması ilə azalır və bu bir daha elektron konsentrasiyasının tezlik ilə mütənasib olaraq artmasını təstiqləyir (Şəkil 5.2.7, 5.2.8, 5.2.9). Digər tərəfdən bütün hallarda impedansın xəyalı hissəsinin temperatur asılılığı demək olar ki xəttidir (Şəkil 5.2.7c,d, 5.2.8c,d, 5.2.9c,d). Temperaturun və tezliyin artması ilə impedansın xəyalı hissəsinin ədədi qiyməti azalır. Tezliyin 12 fərqli qiymətində impedansın temperatur asılılıqları şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli nəzərdən keçirilmişdir (Şəkil 5.2.10).



Şəkil 5.2.10 Şüalanmadan öncə və sonra fərqli tezliklərdə impedans spektrləri temperaturun funksiyası kimi

Tezliyin artması ilə impedansın həqiqi hissəsinin ədədi qiymətinin azalması aşkar müşahidə olunur (Şəkil 5.2.10a,b). Eyni zamanda, temperaturun artması ilə nisbətən aşağı tezliklərdə impedansın həqiqi hissəsinin ədədi qiymətinin aşkar azalması müşahidə olunsada, yüksək tezliklərdə dəyişiklik aşkar görünmür. Bunun

isə əsas səbəbi, nisbətən yüksək tezliklərdə temperaturdan asılı olaraq baş verən dəyişikliyin aşağı tezliklərlə müqayisədə daha az olmasıdır. Digər tərəfdən impedansın xəyali hissəsinin temperatur asılılıqlarında aşağı tezliklərdə dəyişmə kəskin müşahidə olunur (Şəkil 5.2.10c,d). Xüsusən tezliyin 0.1Hz, 1Hz və 10Hz qiymətlərində temperaturdan asılı olaraq kəskin azalma mövcuddur. Məlumdur ki, impedansın xəyali hissəsinin fiziki mənası sistemdə saxlanılan enerjidir və ya başqa sözlə enerji itkisini xarakterizə edir. Bu yanaşma ilə 0.1Hz, 1Hz və 10Hz tezliklərdə temperaturun təsiri ilə daha az enerji itkisinin mövcudluğunu demək olar ki, bu da qəbul olunandır. Fərqli temperatur və tezliklərdə impedansın həqiqi və xəyali hissələri neytronlarla şüalanma müddətinin funksiyası kimi öyrənilmişdir (Şəkil 5.2.11).



Şəkil 5.2.11 Nanokristallik 3C-SiC – in impedansının neytronlarla şüalanma müddətindən asılılığı

0.1Hz telikdə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedansının həqiqi və

xəyali hissələrinin ədədi qiyməti temperatur və şüalanma müddətinin artması ilə azalır (**Şəkil 5.2.11a, c**). Digər tərəfdən, nisbətən yüksək 2.5MHz tezlikdə impedansın ədədi qiyməti temperaturun artması ilə artır (**Şəkil 5.2.11b**). Bu isə nisbətən yüksək tezliklərdə 3C-SiC nanokristallarında elektron keçiriciliyin (metallik davranışın) mövcudluğunun göstəricisidir. Eyni zamanda, 2.5MHz tezlikdə şüalanma müddətindən asılılıqda xaotiklik müşahidə olunur ki, bunu da neytronlarla şüalanma zamanı yaranan aşqar elementlər və defektlərin konsentrasiyası ilə izah etmək olar. Belə ki, neytronlarla şüalanma nəticəsində yeni yaranmış n tip aşqar elementlərin konsentrasiyasının artması ilkin mərhələdə impedansın azalmasına səbəb olur. Nisbətən yüksək tezliklərdə, neytronlarla şüalanmadan sonra (5 və 10 saat) yaranan defekt və digər effektlər daha aşqar müşahidə olunur və nəticədə impedansın qiyməti nisbətən artır. Neytron selinin təsir müddətinin 20 saat qiymətində n tip aşqarların konsentrasiyasının kəskin artması impedansın azalmasına səbəb olur. Anoloji mülahizələri impedansın xəyali hissəsi üçün də söyləmək olar (**Şəkil 5.2.11d**). Ümumi yanaşmada, 3C-SiC nanokristallarının impedansı neytron selinin təsiri ilə azalır. Bunun isə əsas səbəbi neytron transmutasiya elementlərinin şüalanma müddətinə mütənəşib olaraq konsentrasiyasının artmasıdır.

5.3 3C-SiC nanokristallarının Volt-Amper xarakteristikalarında

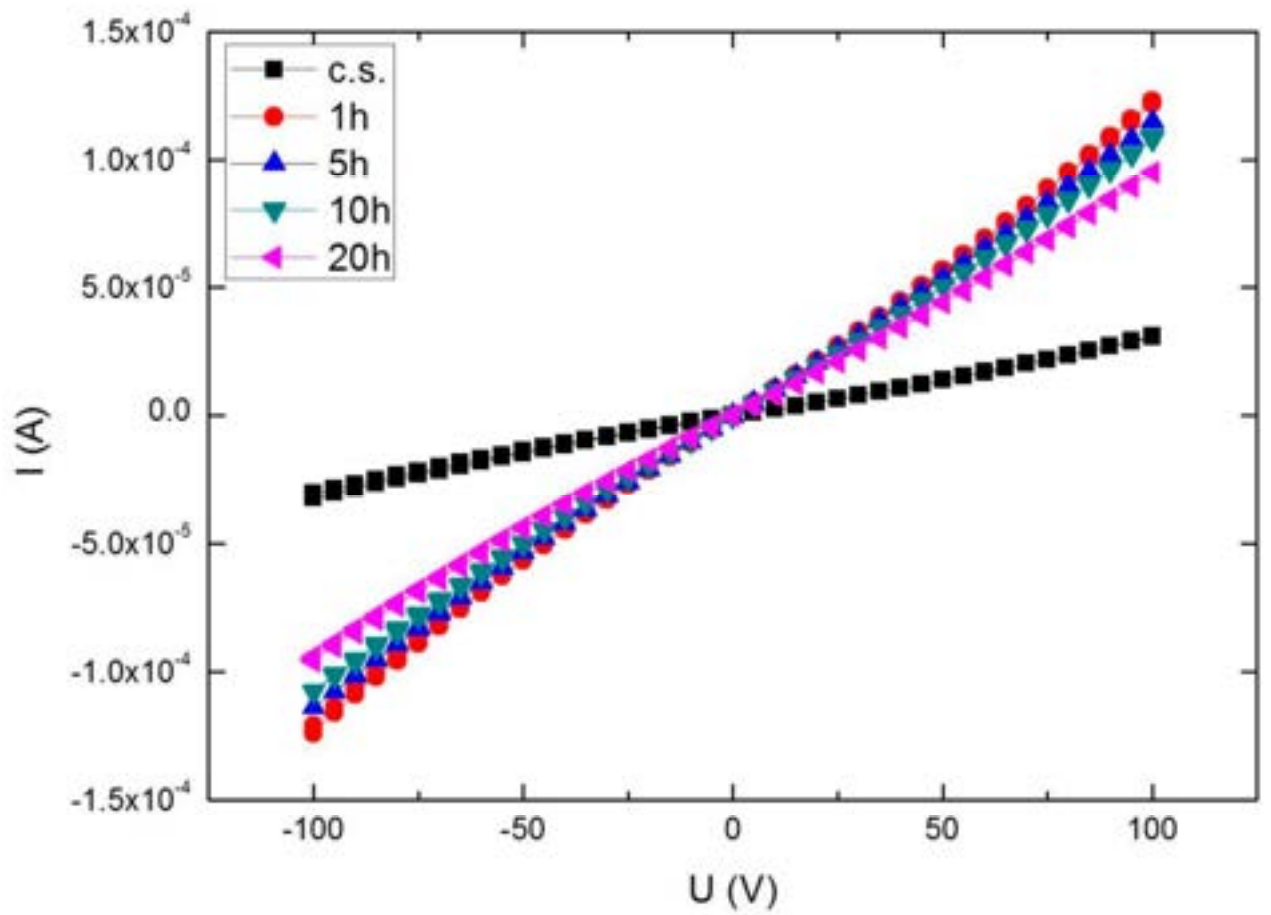
neytron şüalanma effektləri

Ölçmələr zamanı nümunələrin V – A xarakteristikaları otaq temperaturunda və gərginliyin -100V - +100V qiymətlərində nəzərdən keçirilmişdir. Təcrübələr zamanı məlum olmuşdur ki, neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra V – A, P-U, və s. asılılıqlarda fərqlər mövcuddur. İlk olaraq neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra V – A xarakteristikasını nəzərdən keçirək (**Şəkil 5.3.1**).

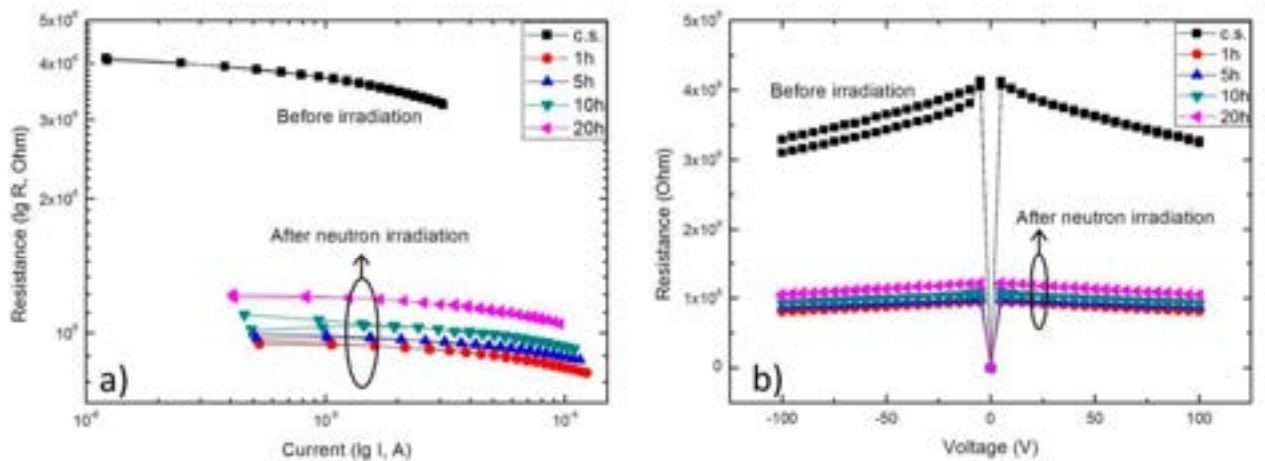
Şəkildən nümunənin şüalanmadan öncə V – A xarakteristikasının xətti və gərginlik oxuna nəzərən kiçik bucaq altında meyilli (slope) olması ilkin nümunənin nisbətən böyük müqavimətə malik olmasını göstərir. Eyni zamanda, xəttin gərginlik və cərəyan oxlarının sıfır nöqtələrinə nəzərən simmetrik olması nümunələrin kifayət

qədər təmiz olmasının göstəricisidir [325, s.95701]. Lakin, neytron selinin təsir müddətinin artması ilə nanomaterialın $V - A$ xarakteristikasında bucaq dəyişməsi (slope) müşahidə olunur. Belə ki, $3C-SiC$ nanokristallarının neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra $V - A$ xarakteristikasında müşahidə olunan əyrilərin gərginlik oxu ilə əmələ gətirdiyi bucaq, neytronlarla şüalanmadan sonra kəskin artır. Digər tərəfdən məlumdur ki, bu bucağın cotangensi birbaşa nümunənin müqavimətini xarakterizə edir: $\cot\alpha = R$. Neytron seli ilə şüalanmadan sonra əyrilərin gərginlik oxu ilə əmələ gətirdiyi bucağın artması nümunənin müqavimətinin azalmasına səbəb olur. Beləliklə, neytron selinin təsiri ilə nümunələrin elektrik keçiriciliyi artır ki, bu da digər təcrübələrdə təstiqlənmişdir. Əvvəlki təcrübələrə oxşar olaraq, bu artımı neytronlarla çevrilmələr, rabitə sürüşməsi (dangling bonds), defekt və ya əlavə yükdaşıyıcıların yaranması ilə izah etmək olar. Neytron selinin təsiri ilə cərəyan – müqavimət və gərginlik – müqavimət asılılıqlarında da sürüşmələr müşahidə olunur (Şəkil 5.3.2).

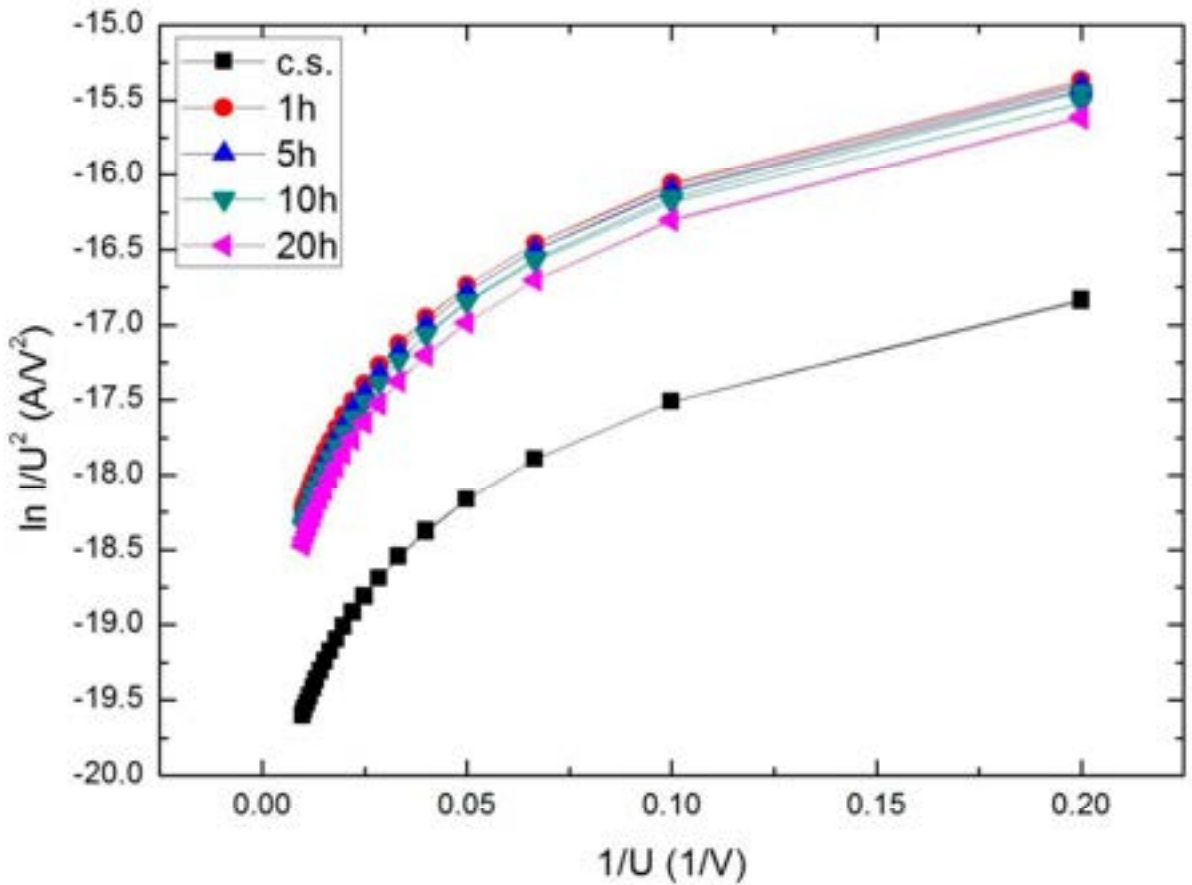
Şəkil 5.3.2-dən göründüyü kimi neytron selinin təsirindən sonra $3C-SiC$ nanokristallarında müqavimət kəskin azalır. Eyni zamanda, şəkil 5.3.2a – da cərəyan – müqavimət asılılıqlarında cərəyan oxuna nəzərən cərəyanın artması istiqamətində sürüşmə müşahidə olunur. Bu sürüşməyə əsasən demək olar ki, neytronlarla şüalanmadan sonra mühitdən keçən cərəyanın miqdarı artır. Şəkil 5.3.2b – dən göründüyü kimi, müsbət və mənfi gərginliyin qiyməti demək olar ki, nümunənin müqavimətinə təsir etmir. Baxmayaraq ki, neytronlarla şüalanmadan sonra $3C-SiC$ nanokristallarında müqavimətin kəskin azalması müşahidə olunur. Qeyd edək ki, neytronlarla şüalanmadan öncə müqavimət gərginlikdən asılı olaraq qismən azalır (Şəkil 5.3.2b). Eyni zamanda, şüalanmadan sonra müqavimətin qiyməti gərginlikdən demək olar ki asılı deyil. $3C-SiC$ nanokristallarında birbaşa tunnel keçidi və ya sahə emmissiyasını öyrənmək məqsədilə “Fowler–Nordheim” asılılıqlarını neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli nəzərdən keçirilmişdir (Şəkil 5.3.3).



Şəkil 5.3.1 3C-SiC nanokristallarının neytronlarla şüalanmadan öncə (c.s.) və sonra (1h,5h,10h və 20h) V – A xarakteristikası



Şəkil 5.3.2 3C-SiC nanokristallarının neytronlarla şüalanmadan öncə (c.s.) və sonra (1h,5h,10h və 20h) cərəyan – müqavimət (a) və gərginlik – müqavimət (b) asılılıqları.



Şəkil 5.3.3 3C-SiC nanokristallarının neytronlarla şüalanmadan öncə (c.s.) və sonra (1h,5h,10h və 20h) “Fowler–Nordheim” asılılıqları.

Sadə halda V-A asılılıqlarında molekulyar səviyyədə tunel bariyeri Simmons yanaşması ilə xarakterizə olunur [82, s.8396; 137, s.26801; 238, s.2635]:

$$I = \frac{qA}{4\pi^2 \hbar d^2} \left[\left(\phi - \frac{qV}{2} \right) \exp \left(-\frac{2d\sqrt{2m^*}}{\hbar} \sqrt{\phi - \frac{qV}{2}} \right) - \left(\phi + \frac{qV}{2} \right) \exp \left(-\frac{2d\sqrt{2m^*}}{\hbar} \sqrt{\phi + \frac{qV}{2}} \right) \right] \quad (5.9)$$

burada, A - molekulyar keçidin sahəsi (junction area), d – baryer eni, m^* – yükdaşıyıcının effektiv kütləsi (effective mass of the charge carrier), ϕ – baryer hündürlüyü, \hbar - azalmış Plank sabiti (reduced Planck’s constant) və q – elektronun yüküdür. “Fowler–Nordheim” asılılıqlarında prosesin tunel olma ehtimalı (tunneling probability) seçilmiş nümunənin barrierin formasından (shape of the barrier) asılıdır

[82, s.8396]. Limit halda, barieri düzbucaqlı qəbul etsək (the barrier is rectangular), V-A asılılıqları birbaşa tunel effekti ilə izah edilir [82, s.8396; 137, s.26801; 238, s.2635]:

$$I \propto V \exp \left(- \frac{2d \sqrt{2m^* \phi}}{h} \right) \quad (5.10)$$

Digər tərəfdən, əgər tətbiq olunan gərginlik barier hündürlüyünü aşarsa, o zaman barier düzbucaqlı formadan üçbucaq formasına çevrilər və bu üçbucaq deformasiyası “Fowler–Nordheim” tunelinin (sahə emmisiyasının) yaranmasına səbəb olur [82, s.8396; 137, s.26801; 238, s.2635]. Bu halda V-A asılılıqları aşağıdakı bərabərliklə xarakterizə oluna bilər:

$$I \propto V^2 \exp \left(- \frac{4d \sqrt{2m^* \phi^3}}{3hqV} \right) \quad (5.11)$$

Fowler–Nordheim qrafikləri (plots) prosesin birbaşa tunel və ya sahə emmisiyalı olmasını izah edir. Bu halda (5.10) və (5.11) bərabərlikləri aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər [82, s.8396]:

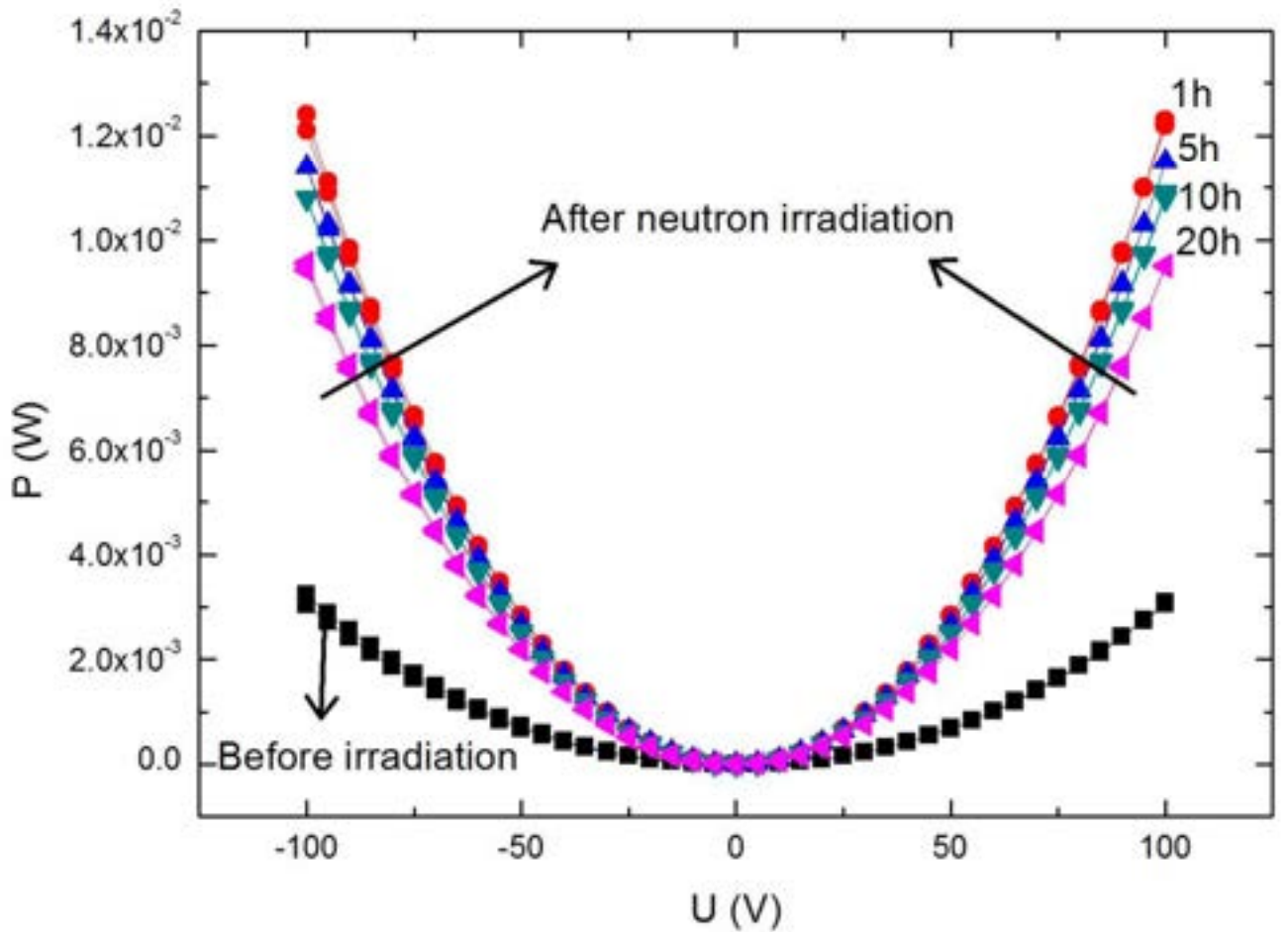
$$\ln \left(\frac{I}{V^2} \right) \propto \ln \left(\frac{1}{V} \right) - \frac{2d \sqrt{2m^* \phi}}{h} \quad (5.12)$$

$$\ln \left(\frac{I}{V^2} \right) \propto - \left(\frac{1}{V} \right) \frac{4d \sqrt{2m^* \phi^3}}{3hq} \quad (5.12a)$$

Qeyd edək ki, əgər Fowler–Nordheim asılılıqları loqaritmikdirsə proses birbaşa tunel hadisəsi ilə və asılılıqlar neqativ əyri (negative slope) xəttidirsə proses sahə emmisiyası ilə izah olunur [82, s.8396; 137, s.26801; 238, s.2635]. Şəkil 5.23 –

də mövcud $\ln(A/V^2) - 1/V$ asılılıqları (5.10) bərabərliyinə uyğundur ki, bu da birbaşa tunel effekti ilə baş verən prosesləri izah edir [82, s.8396; 137, s.26801; 238, s.2635]. Şəkil 5.3.3 – də “Fowler–Nordheim” asılılıqlarından məlum olur ki, təcrübələr aparılan temperaturda 3C-SiC nanokristallarında proses birbaşa tunel hadisəsinə əsaslanır və sahə emmissiyası müşahidə olunmur. Şəkil 5.3.3 – də müşahidə olunan ayrılardan məlum olur ki, 3C-SiC nanokristallarında şüalanmadan öncə və sonra termal aktivlik bütün aralıqlarda dominantdır [82, s.8396].

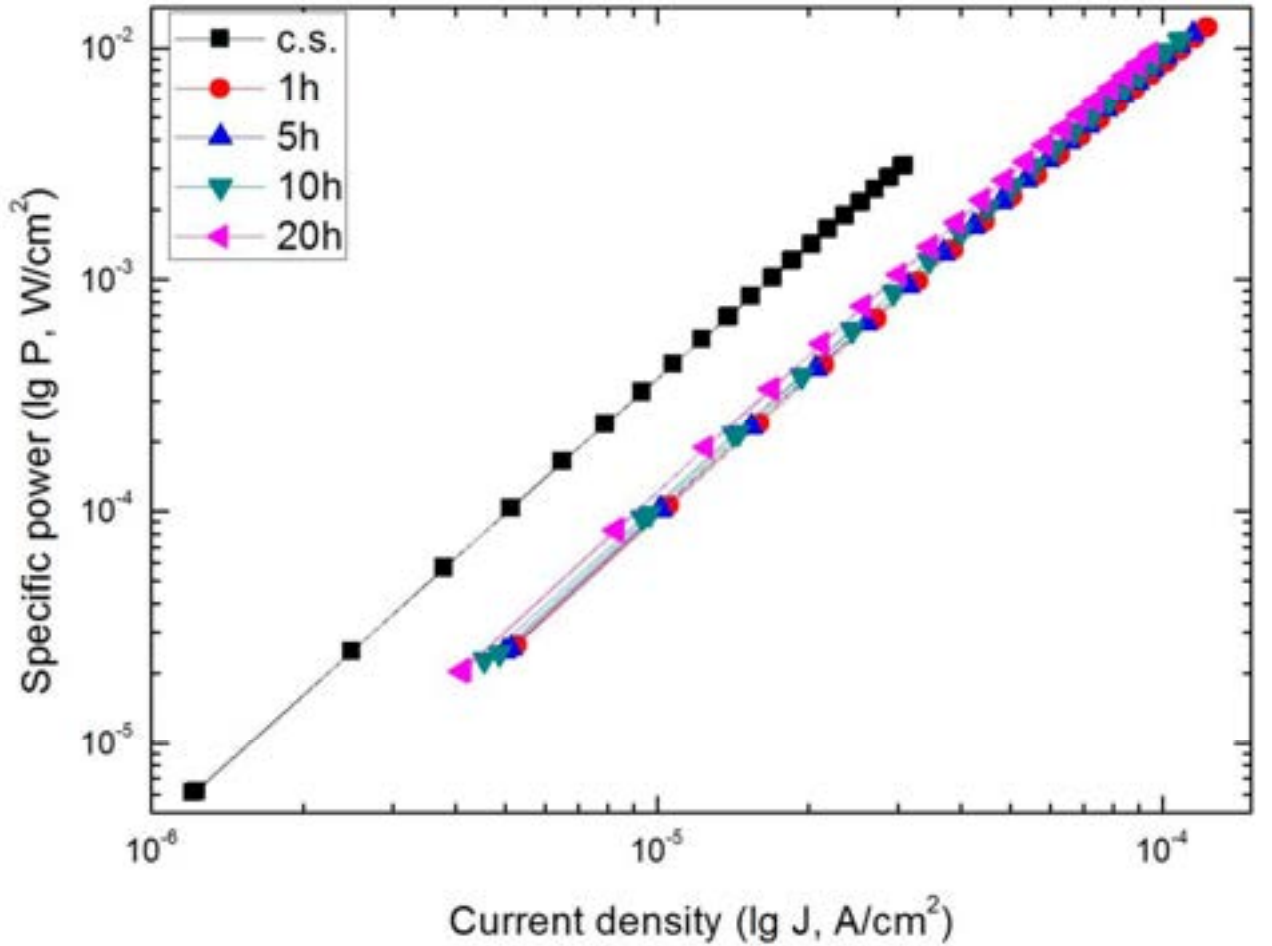
3C-SiC nanokristallarında effektiv iş gərginliyini müəyyən etmək məqsədilə Volt – Güc xarakteristikaları nəzərdən keçirilmişdir (Şəkil 5.3.4).



Şəkil 5.3.4 3C-SiC nanokristallarının neytronlarla şüalanmadan öncə (c.s.) və sonra (1h,5h,10h və 20h) gərginlik – güc asılılıqları.

Volt – Güc xarakteristikasından görünür ki, neytronlarla şüalanmadan sonra kiçik gərginlik dəyişməsində daha çox güc dəyişməsi müşahidə olunur. Lakin, 3C-

SiC nanokristallarının Volt – Güc xarakteristikası, günəş panellərində istifadə olunan fotoçeviricilərdən fərqli olaraq, göstərilən gərginlik aralığında hər hansı pik ilə müşahidə olunmur. Bu isə o deməkdir ki, bu nanomaterialda effektiv iş gərginliyi gərginliyin 100V qiymətindən çoxdur. Cərəyan sıxlığının güc sıxlığından asılılıqından neytronlarla şüalanmanın təsiri aşkar müşahidə olunur (Şəkil 5.3.5).



Şəkil 5.3.5 3C-SiC nanokristallarının neytronlarla şüalanmadan öncə (c.s.) və sonra (1h,5h,10h və 20h) xüsusi güc-cərəyan sıxlığı asılılıqları.

Neytronlarla şüalanma nəticəsində cərəyan sıxlığı – güc sıxlığı asılılıqlarında hər hansı meyl (slope) müşahidə edilmir. Cərəyan sıxlığı – güc sıxlığı asılılıqlarında şüalanmadan sonra müşahidə olunan sürüşməni isə digər hallara oxşar olaraq neytronlarla çevrilmələr, rabitə sürüşməsi (dangling bonds), defekt və ya əlavə yükdaşıyıcıların yaranması ilə izah etmək olar.

Ümumi yanaşmada V-A xarakteristikasında şüalanmadan sonra müşahidə

olunan dəyişikliklər neytron çevrilmələri ilə sıx bağlıdır. Neytronlara şüalanma nəticəsində 3C-SiC nanokristallarında mövcud ^{30}Si izotopu bir neytron zəbt edərək ^{31}Si izotopuna çevrilir. ^{31}Si izotopu isə β aktiv izotop olduğundan $^{30}\text{Si}(n, \gamma)^{31}\text{Si} \rightarrow ^{31}\text{P} + \beta^- (T_{1/2} = 2.6\text{h})$ kimi nüvə çevriləsi nəticəsində ^{31}P izotopuna çevrilir. ^{31}P izotopu isə 3C-SiC nanokristallarında n – tip aşqar rolunu oynayır. Beləliklə, ^{31}P izotopunun neytronlarla şüalanmadan sonra konsentrasiyasının artması birbaşa V-A xarakteristikasında özünü göstərir.

5.4 Təcrübi nəticələrin müzakirəsi

Neytron seli ilə şüalanma zamanı 3C-SiC nanomaterialında RIC keçiriciliyi müşahidə olunmuşdur. Müxtəlif temperaturalarda elektrik keçiriciliyinin tezlik asılılıqlarının müqayisəli analizlərindən məlum olmuşdur ki, neytron selinin təsiri nəticəsində elektrik keçiriciliyinin ədədi qiyməti artır. Neytron seli ilə şüalanma zamanı 3C-SiC nanomaterialında elektrik keçiriciliyinin ədədi qiyməti 7.5×10^{-4} S/m qədər və ya təqribən 5.5 dəfə artır. RIC keçiriciliyinə əsas səbəb kimi, neytron selinin təsiri ilə nano 3C-SiC daxilində yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının artması göstərilmişdir. Elektrik keçiriciliyinin həqiqi və xəyali hissələrinin qarşılıqlı asılılıqlarından neytron selinin təsiri nəticəsində elektrik keçiriciliyinin həqiqi hissəsinin elektrik keçiriciliyinin xəyali hissəsinə nisbətən daha çox dəyişməsi məlum olmuşdur. Keçiriciliyin ionik və ya dipolyar ion tip olması, elektrik keçiriciliyinin həqiqi və xəyali hissələrinin qarşılıqlı asılılıqlarından tapılmışdır.

Neytron seli ilə şüalanma zamanı 3C-SiC nanomaterialında elektrik keçiriciliyinin ümumi tendensiyada artması müşahidə olunmuşdur. Elektrik keçiriciliyinin artmasına əsas səbəb kimi, neytron selinin təsiri ilə nano SiC daxilində yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının artması göstərilmişdir. Arenius yanaşması ilə hesablanmış elektrik aktivləşmə enerjilərinin ədədi qiymətləri müqayisə edilmişdir. Məlum olmuşdur ki, neytron selinin təsir müddətinin və tezliyin artması ilə aktivləşmə enerjisi azalır. Nəzəri yanaşma ilə, 3C-SiC nanomaterialında elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılığının eksponensial xarakterli olması tapılmışdır.

Fərqli temperaturlarda nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedans spektrlərində rezonans hallar müşahidə olunmuşdur. Eyni zamanda, neytronlarla şüalanmadan sonra impedans spektrlərində mövcud rezonans hallar tezliyin artması istiqamətində sürüşmüşdür (təqribən bir tərtib, 10 dəfə). Bu sürüşmələrin səbəbi şüalanma nəticəsində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaranan aşqar elementlər və ya əlavə yükdaşıyıcılar ilə izah edilmişdir. Bütün temperatur oblastında şüalanma müddətinin artması ilə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin relaksasiya müddətlərinin azalması aşkarlanmışdır. Relaksasiya müddətinin neytronlarla şüalanmaya mütənasib olaraq azalmasına yaranmış yeni ^{31}P izotopları səbəb olur. Əlavə olaraq, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin amorflaşması və ya aqlomerasiyası birbaşa nümunənin polyarlaşma dərəcəsinə və relaksasiya müddətinə təsir edən faktordur.

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin komplek impedans spektroskopiyasından keçiriciliyin əsasən yarımkəçiricilik davranışı müəyyən edilmişdir. Eyni zamanda, tezliyin 0.1MHz, 1MHz və 2.5MHz qiymətlərinə uyğun olaraq $T_{MS} = 250\text{K}$, 325K və 370K temperaturlarda 3C-SiC nanokristallarında metal-yarımkəçirici keçidi müşahidə olunmuşdur. Ümumi yanaşmada, $f \geq 0.1\text{MHz}$ tezlik və $T < T_{MS}$ temperatur intervallarında 3C-SiC nanokristallarında metallik davranış müşahidə olunur. Neytron çevrilmələri, rabitə sürüşməsi (dangling bonds), defekt və ya əlavə yükdaşıyıcıların yaranması nəticəsində T_{MS} – in ədədi qiyməti şüalanma müddətinə mütənasib olaraq azalır. Əlavə olaraq, müəyyən olunmuşdur ki, neytron çevrilmələri ilə yaranan yeni ^{31}P izotoplarının konsentrasiyasının artması ümumi yanaşmada impedansın azalmasına səbəb olur.

Neytronlarla şüalanmadan sonra 3C-SiC nanokristallarının $V - A$ xarakteristikasında bucaq sürüşməsi (slope) müşahidə olunmuşdur. Şüalanmadan sonra ayrılərin gərginlik oxu ilə əmələ gətirdiyi bucağın artması nümunənin müqavimətinin azalmasının göstəricisidir. Bucaq sürüşməsindən (slope) məlum olmuşdur ki, 3C-SiC nanokristallarının müqaviməti neytronlarla şüalanmadan sonra təqribən 4 MΩ-dan 1 MΩ-a qədər azalmışdır. Bu azalmanın səbəbi, neytronlarla çevrilmələr, rabitə sürüşməsi (dangling bonds), defekt və ya əlavə yükdaşıyıcıların

mövcudluğu ilə əlaqələndirilir. Eyni zamanda, Fowler–Nordheim asılılıqlarından 3C-SiC nanokristallarında birbaşa tunel keçidinin olması məlum olmuşdur. Təcrübələr aparılan temperaturda 3C-SiC nanokristallarında sahə emmissiyası müşahidə olunmur və proses birbaşa tunel hadisəsinə əsaslanır. Əlavə olaraq, Fowler–Nordheim asılılıqlarından məlum olmuşdur ki, 3C-SiC nanokristallarında şüalanmadan öncə və sonra termal aktivlik bütün aralıqlarda dominantdır.

VI FƏSİL

NEYTRON SELİNİN NANOKRİSTALLİK 3C-SiC

HİSSƏCİKLƏRİNİN DIELEKTRİK VƏ PARAMAQNİT XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ

Bu fəsildə, 3C-SiC nanokristallarının dielektrik xassələri tezliyin 0.1Hz – 2.5MHz və temperaturun 100-400K aralıqlarında nəzərdən keçirilmişdir. Neytron seli ilə modifikasiya olunmuş nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələri şüalanmamış nümunələrlə müqayisəli öyrənilmişdir. Əlavə olaraq, nümunələrin dielektrik nüfuzluğu tezlik və temperaturun funksiyası kimi araşdırılmışdır. Eyni zamanda göstərilən temperatur və tezlik aralıqlarında 3C-SiC nanokristallarının $f(\tan\delta) \sim f(f)$ və $f(\tan\delta) \sim f(T)$ asılılıqları neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli öyrənilmişdir. Aparılan təcrübələrdən alınmış bütün effektlərin mexanizmi müxtəlif yanaşmalarla ilə izah edilmişdir. Həmçinin, 3C-SiC nanokristallarının EPR spektral analizləri maqnit sahəsinin 0.05 - 0.55 T (500 - 5500 Gauss) qiymətlərində tədqiq edilmişdir. ν_a^- və ν_c^+ vakansiyalarının konsentrasiyası, digər paramaqnit mərkəzlər və ^{31}P isotopunun yaranması neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli analizlərlə təhlil edilmişdir. **Bu fəsildə** neytron selinin nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin dielektrik və paramaqnit xassələrinə təsiri ətraflı şərh edilmişdir. 3C-SiC nanokristallarının dielektrik xüsusiyyətləri tezliyin 0.1Hz – 2.5MHz və temperaturun 100-400K aralıqlarında nəzərdən keçirilmişdir. İlkin halda və neytron selinin təsirinə məruz qalmış nanomaterialın dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin tezlik asılılıqları müqayisəli analiz edilmişdir. Analizlər nəticəsində məlum olmuşdur ki, neytron selinin təsiri ilə nano SiC-in dielektrik nüfuzluğu ümumi tendensiyada artır. Neytron selinin təsiri nəticəsində nanokristallik 3C-SiC – də əlavə aşqar elementlərin yaranması məlum olmuşdur. 3C-SiC nanomaterialında yaranmış yeni aşqar

elementlərin konsentrasiyasının artması dielektrik polyarlaşmaya birbaşa təsir edir. Əlavə olaraq, 3C-SiC nanohissəciklərinin aralıq səthdə (nanoparticles interfaces) polyarlaşması dispersiya hallarının yaranmasına səbəb olur. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində ionik polyarlaşmanın dominant olması tapılmışdır. Təcrübələrdən alınmış nəticələrdə müşahidə olunan piklərin və digər effektlərin mexanizmi verilməmişdir. Əlavə olaraq, ilkin halda və müxtəlif müddətlərdə kəsilməz olaraq neytron selinin təsirinə məruz qalmış kubik modifikasiyalı nano silisium karbidin (3C-SiC) dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin temperatur asılılıqları bu fəsildə ətraflı şərh edilmişdir. Nümunələrin dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin temperatur asılılıqları şüalanmadan öncə və sonra tədqiq edilmişdir. Radiasiya effektləri şüalanmamış nümunələrin müqayisəli analizləri ilə öyrənilmişdir. Neytron selinin təsir müddətinin artması ilə polyarlaşmanın artması müşahidə olunmuşdur. Eyni zamanda, bu fəsildə, 3C-SiC nanokristallarının dielektrik itkiləri neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli öyrənilmişdir. Təcrübələr tezliyin 0,1Hz – 2.5MHz aralığında və temperaturun 100K-400K aralığında (25K addım ilə) aparılmışdır. Ümumi yanaşmada, istər $f(\tan\delta) \sim f(f)$ və istərsə də $f(\tan\delta) \sim f(T)$ asılılıqlarında neytronlarla şüalanmadan sonra dielektrik itkilərində artma açıq aydın müşahidə olunmuşdur. Bu artım adətən, neytron çevrilmələri, rabitə sürüşməsi (dangling bonds), defekt və ya əlavə yükdaşıyıcıların yaranması ilə izah edilir. 3C-SiC nanokristallarında $f(\tan\delta) \sim f(f)$ asılılığında tezliyin artması ilə, dielektrik itkiləri azalır və tezliyin müəyyən qiymətlərində “əyilmə” halları mövcuddur ki, bu da fəsildə ətraflı izah edilmişdir. Defektlər, orientasiya və ya dipol polyarizasiyası səbəbindən $f(\tan\delta) \sim f(T)$ asılılıqlarında temperaturun artması ilə dielektrik itkilərinin artması müşahidə olunmuşdur.

Digər tərəfdən, bu fəsildə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində paramaqnit mərkəzlər və onların təbiəti neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli öyrənilmişdir. Elektron Paramaqnit Rezonans (EPR) spektrik analizlər maqnit sahəsinin 0.05 - 0.55 T (500 - 5500 Gauss) qiymətlərində aparılmışdır. Daha çox paramaqnit mərkəzlər müşahidə olunan 0.3270 - 0.3370 T oblastı əlavə olaraq nəzərdən keçirilmişdir. Neytronlarla şüalanmanın yaranan yeni izotopların, v_a^- və v_c^-

vakansiyalarının konsentrasiyasına təsiri öyrənilmişdir. Sərbəst elektron regionunda mövcud siqnalların dayanıqlılıq dərəcəsini yoxlamaq və həmçinin sərbəst radikallarla sürətli relaksasiya hallarını ayırmaq məqsədi ilə təqdim olunan işdə iki fərqli gücdə EPR spektrləri nəzərdən keçirilmişdir. Belə ki, doyma həddində aparılan EPR analizlərindən mövcud siqnalların kifayət qədər dayanıqlı olması müəyyən edilmişdir. Eyni zamanda məlum olmuşdur ki, g faktorun 2.006 qiymətində müşahidə olunan siqnal iki komponentdən ibarətdir. Birinci komponent çox güclü siqnaldır ki, bu da 20mVt gücdə 3300G – da, 2mVt gücdə isə 3030G – da müşahidə olunur. Digər komponent isə çox genişdir və dissertasiyada təqdim olunan spektrlərdən aydın müşahidə olunmur. Digər tərəfdən şüalanma müddətinin artması ilə ümumi yanaşmada sərbəst radikalların sayının artması müqayisəli EPR analizlərindən tapılmışdır. Xarici sahənin 3300G ətrafında mövcud lokal hallara uyğun g – faktorun fərqli qiymətlərində paramaqnit mərkəzlərin sayı hesablanmışdır. 3300G ətrafında aparılan hesablamalardan şüalanma müddətinin artması ilə sərbəst elektronlara uyğun mərkəzlərin (g – faktorun 2.006 qiymətində) sayının da təqribən iki dəfəyə qədər artması müşahidə olunmuşdur. Ümumi yanaşmada, şüalanmadan öncə sərbəst elektronlara uyğun mərkəzlərin sayı 3.1×10^{16} mərkəz/sm³ (ümumi mərkəzlərin sayı 4.5×10^{18} mərkəz/sm³) olduğu halda, 20 saata qədər şüalanmadan sonra bu sayı 5.7×10^{16} mərkəz/sm³ qədər (ümumi mərkəzlərin sayı 8.0×10^{18} mərkəz/sm³) artmışdır. Neytron şüalanmadan sonra paramaqnit mərkəzlərin sayında mövcud artıma səbəb olan bilən mexanizimlər irəli sürülmüşdür.

6.1 Neytron selinin nanokristallik 3C-SiC-in dielektrik nüfuzluğuna

təsirinin tədqiqi

Nanokristallik 3C-SiC-in dielektrik nüfuzluğuna neytron selinin təsiri şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli tədqiq edilmişdir. 3C-SiC nanohissəciklərinin aralıq səthdə (nanoparticles interfaces) polyarlaşması dispersiya hallarının yaranması kimi izah edilmişdir. Neytron seli ilə modifikasiya olunmuş nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yeni yaranmış ³¹P isotoplarının konsentrasiyasının dielektrik

nüfuzluğunda yaratdığı dəyişikliklər tezlik və temperaturun funksiyası kimi ayrı – ayrılıqda analiz edilmişdir.

6.1.1 Dielektrik nüfuzluğunun tezlik asılılığında neytron şüalanma

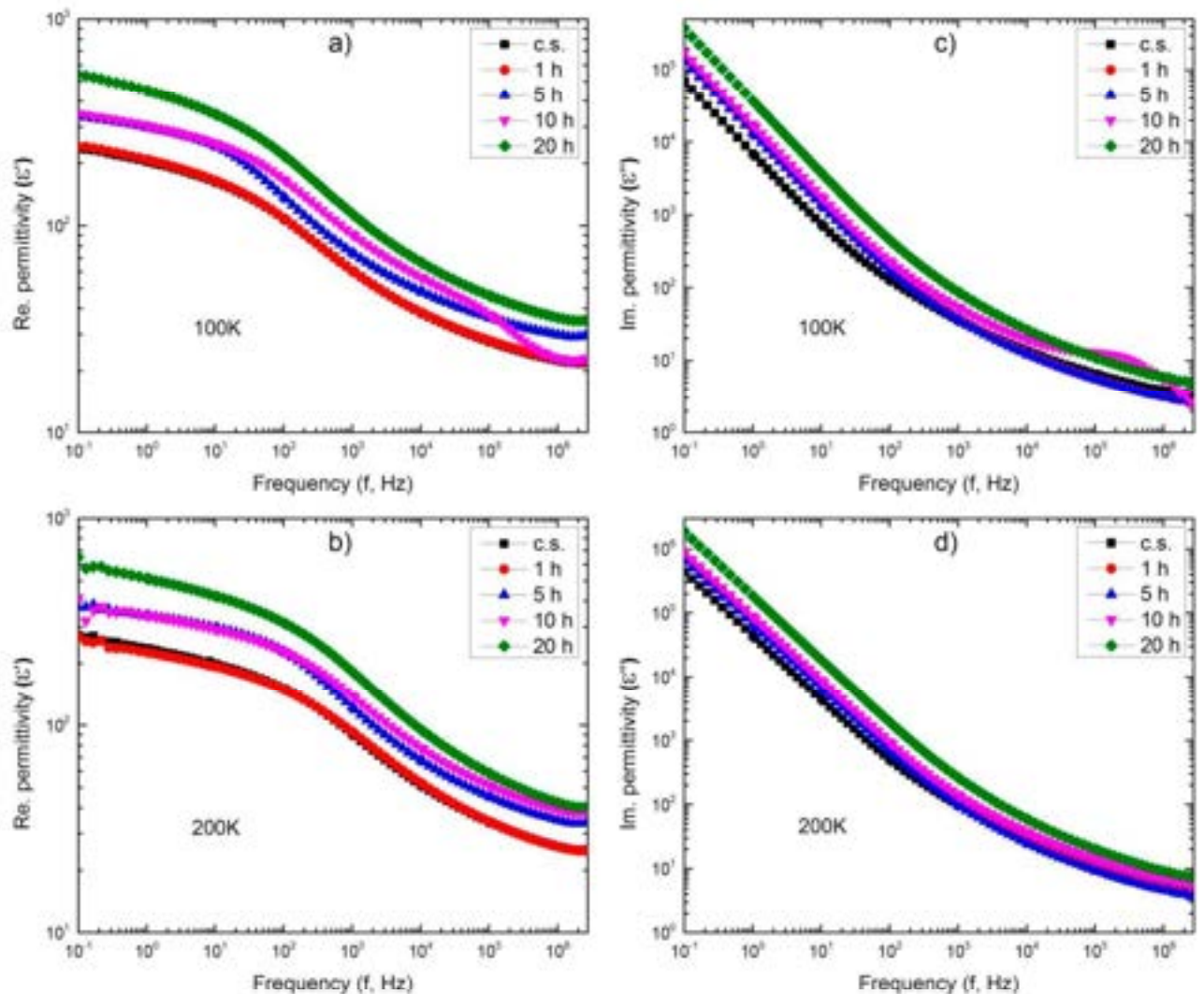
efektləri

Ölçmələr zamanı nümunələrin dielektrik xassələrinin tezlik asılılıqları temperaturun müxtəlif sabit qiymətlərində nəzərdən keçirilmişdir. Təcrübələr tezliyin 0.1Hz – 2.5MHs aralığında 88 müxtəlif sabit qiymətlərində aparılmışdır. Ölçmələr zamanı məlum olmuşdur ki, temperaturun müxtəlif qiymətlərində dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin tezlik asılılığı fərqlidir. Şəkil 6.1.1 – də temperaturun 100K və 200K oblastlarında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin tezlik asılılıqları verilib. Temperaturun 100K qiymətində $f(\lg \epsilon') = f(\lg \nu)$ asılılığından görüldüyü kimi neytron selinin təsir müddətinin artması ilə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsinin artması aşkar müşahidə olunur (Şəkil 6.1.1a). İlk nümunənin dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsinin qiymətinin aşağı olması bu halda polyarlaşmanın az olmasını deməyə əsas verir. Neytron selinin təsiri nəticəsində nümunələrdə əlavə yükdaşıyıcılar yaranır ki, bunlar da nümunələrdə əlavə ümumi polyarlaşmanın artmasına səbəb olur.

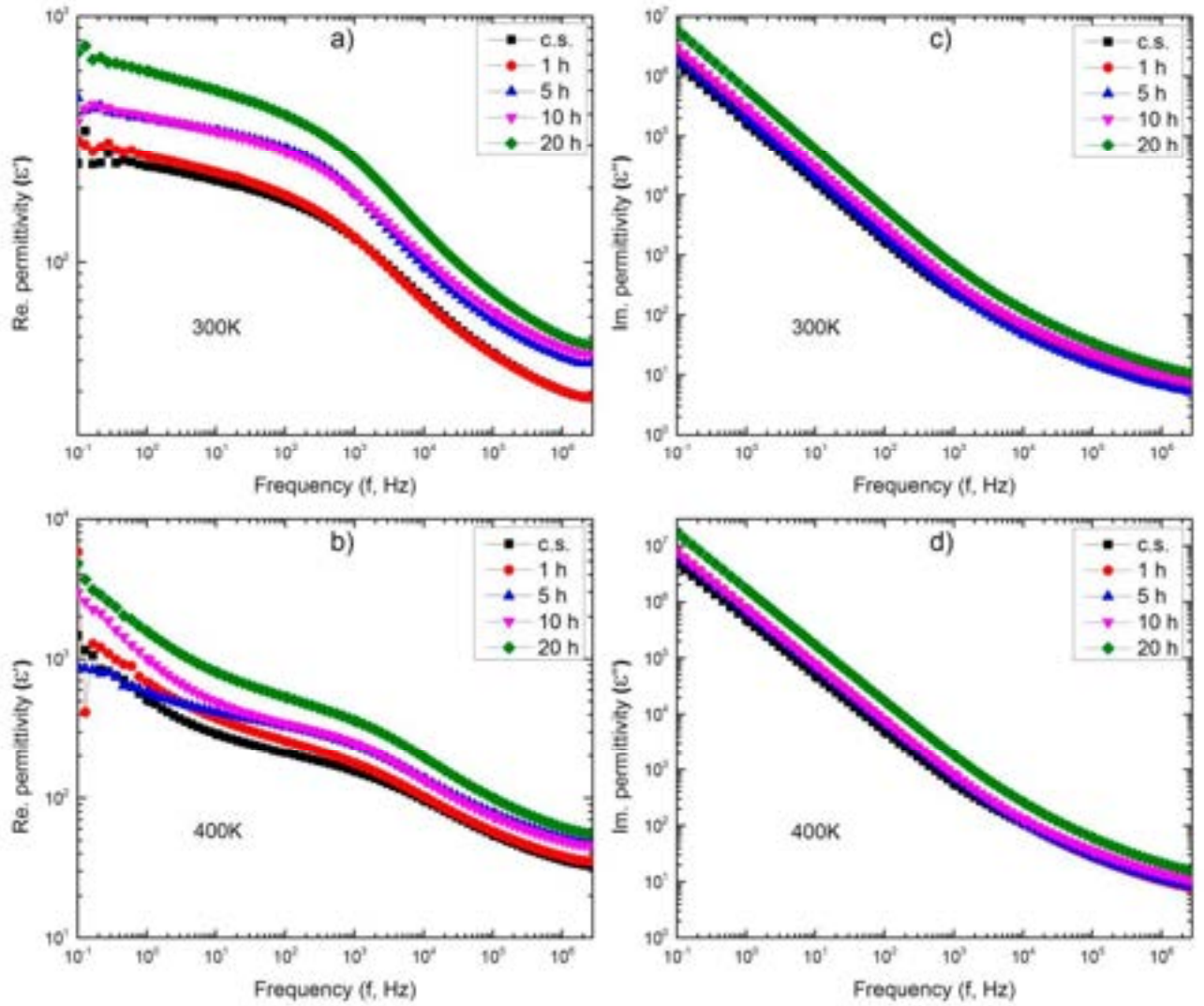
Məhz bu yükdaşıyıcıların təsiri nəticəsində dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsi artır. Temperaturun 200K qiymətində anoloji proses baş verir (Şəkil 6.1.1b). Hər iki temperaturda tezliyin müəyyən qiymətindən sonra dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsində kəskin azalma müşahidə olunur (Şəkil 6.1.1 a və b). Dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsində hər iki temperaturda tezlikdən asılı olaraq azalma müşahidə olunur. Tezliyin artması ilə elektrik itkilərinin azalmasının əsas səbəbi yükdaşıyıcıların elektrik sahəsinin təsiri ilə fəallaşmasıdır. Temperaturun nisbətən böyük qiymətlərində dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələri aşağı temperaturlara oxşardır (Şəkil 6.1.2).

Lakin, temperaturun artması ilə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin ədədi qiymətlərində artmalar müşahidə olunur. Həmçinin temperaturun

400K qiymətində dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsində nisbətən fərqli asılılıq müşahidə olunur (Şəkil 6.1.2b). Neytronlarla şüalınmadan əvvəl və sonra 3C-SiC nanohissəciklərinin dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin tezlik asılılıqları şəkil 6.1.3 – də təsvir edilmişdir. Aşağı və yuxarı temperaturlarda iki dispersiya rejimi (dispersion regimes) müşahidə olunur. Aşağı tezliklərdə müşahidə olunan dispersiya hallarını polyarlaşma yanaşmasına (polarization phenomena) əsasən səth yükləri və ya nanohissəciklərin aralıq səthində (nanoparticles interfaces) polyarlaşması ilə izah etmək olar. Yuxarı tezlikləri isə, yükdaşıyıcıların yürüklüyündən asılı relaksasiya müddəti (relaxation process associated with the charge carriers' mobility) izah edir [316, s.1145].



Şəkil 6.1.1 Nano 3C-SiC hissəciklərinin dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin 100K və 200K temperaturlarda tezlik asılılıqları.



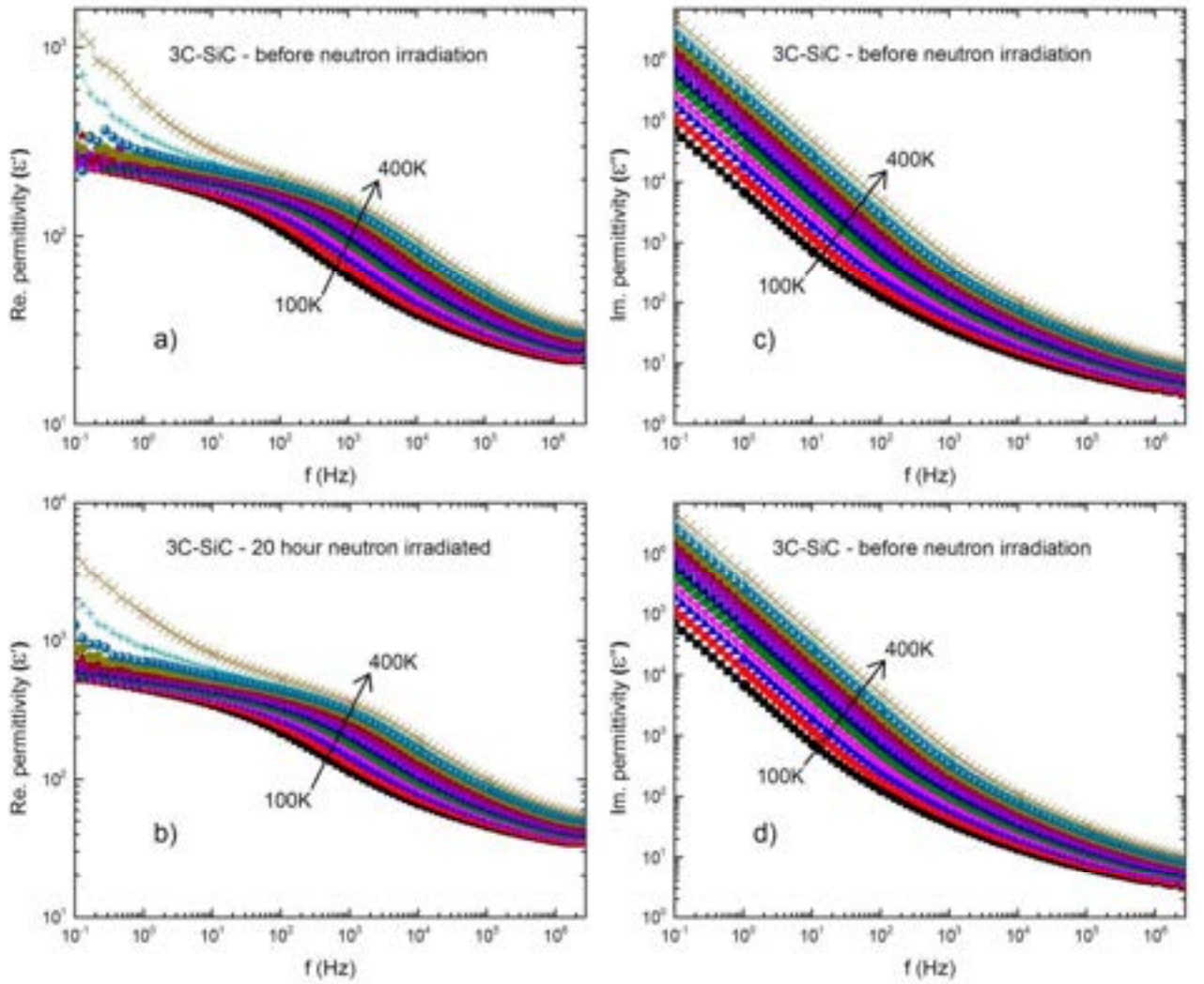
Şəkil 6.1.2 Nano 3C-SiC hissəciklərinin dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin 300K və 400K temperaturlarda tezlik asılılıqları.

Temperaturun artması ilə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrində artma aşkar müşahidə olunur. Ümumi yanaşmada, neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra bütün temperatur oblastlarında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsində müşahidə olunan əyrilər oxşardır.

Ümumi yanaşmada kompleks dielektrik nüfuzluğunun tezlik asılılıqları Debye tənliyi ilə ifadə olunur [102, s.57; 152, s.1490; 353, s.195; 354, s.52102].

$$\varepsilon = \varepsilon_{\infty} + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty}}{1 + i\omega\tau} \quad (6.1)$$

burada, ϵ_s – aşağı tezlikdə statistik dielektrik nüfuzluğu, ϵ_∞ - yuxarı tezlikdə dielektrik nüfuzluğunun limiti, τ - relaksasiya müddəti və ω - bucaq tezliyidir.



Şəkil 6.1.3 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra tezlik asılılıqları.

Dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələri aşağıdakı tənliklərlə ifadə oluna bilər [102, s.57; 152, s.1491; 353, s.196; 354, s.52102].

$$\epsilon' = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{1 + (\omega\tau)^2}$$

$$\epsilon'' = \frac{\omega\tau(\epsilon_s - \epsilon_\infty)}{1 + (\omega\tau)^2}$$

(6.2)

Əgər elektrik keçiriciliyi itkilərin anonimdirsə ϵ'' aşağıdakı kimi təyin oluna bilər:

$$\epsilon'' = \frac{\omega \tau (\epsilon_s - \epsilon_\infty)}{1 + (\omega \tau)^2} + \epsilon''_\sigma \quad (6.3)$$

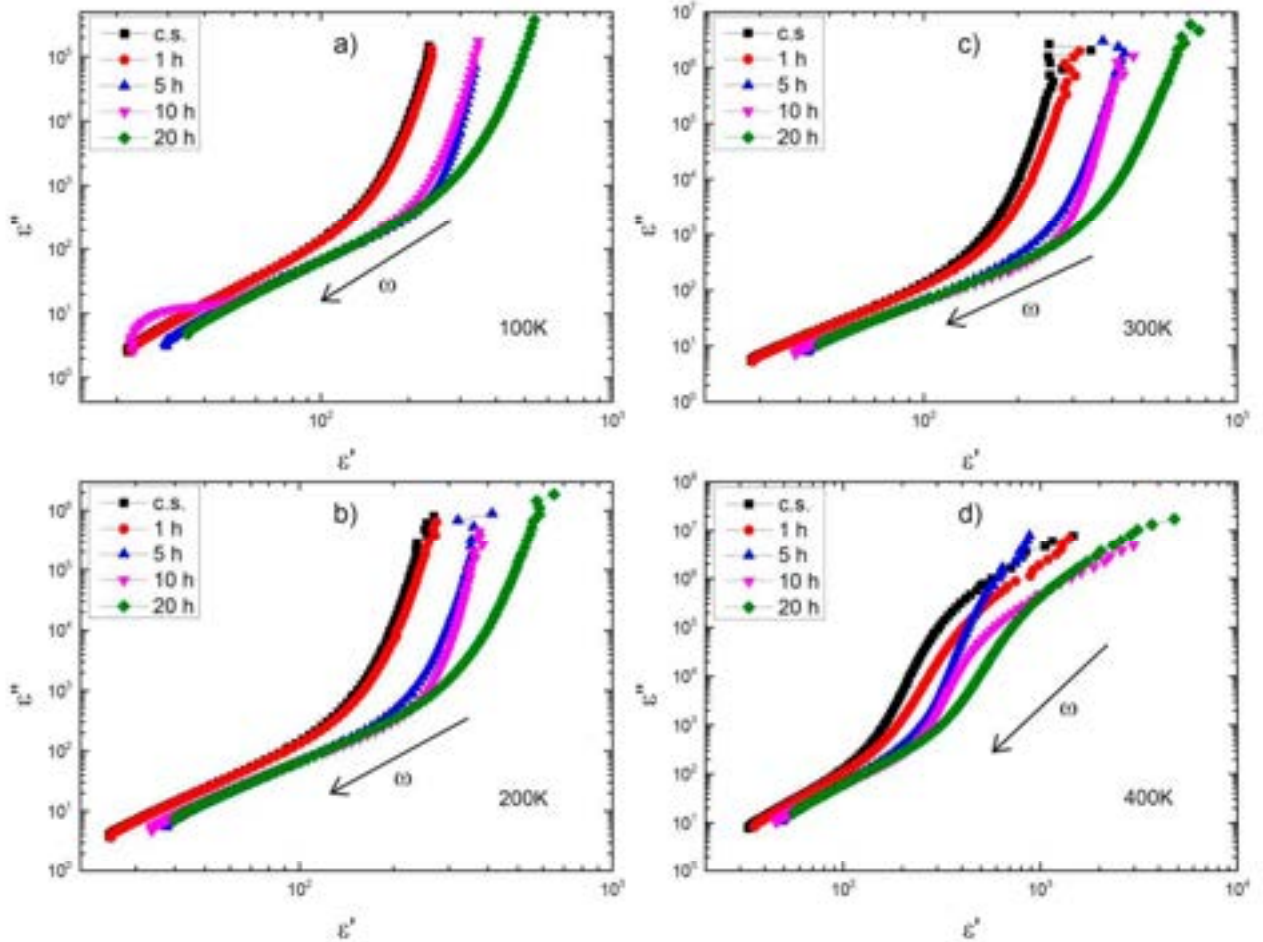
burada, $\epsilon''_\sigma = \sigma / \epsilon_0 \omega$, ϵ''_σ - elektrik keçiriciliyi itkiləri, ϵ_0 - vakuumda dielektrik sabiti, σ - elektrik keçiriciliyidir. Debye tənliyinin Cole–Cole, Davidson–Cole və Havriliak–Negami kimi bir neçə variyasiyaları mövcuddur [102, s.58; 152, s.1492; 353, s.197; 354, s.52102]. Bu işdə, eksperimentlər nəticəsində müşahidə olunan bütün ayrılər Havriliak–Negami (HN) fenomenoloji tənliklərinə uyğundur (according to the Havriliak–Negami (HN) phenomenological equation) (Şəkil 6.1.1 və 6.1.2) [102, s.58; 152, s.1492; 158, s.391; 316, s.1145; 353, s.197; 354]. Bu yanaşma eksperimental nəticələrdə model kimi istifadə olunur.

$$\epsilon^* = \epsilon'(\omega) - i\epsilon''(\omega) = \frac{\sigma_{dc}}{i\omega\epsilon_0} + \epsilon_\infty + \frac{\Delta\epsilon}{[1 + (i\omega\tau)^\alpha]^\beta} \quad (6.4)$$

burada, τ – relaksasiya müddəti, α və β uyğun olaraq simmetrik və asimmetrik bağlı dağıtım parametrləridir (associated distribution parameters). Tənliyin ilk həddi, dc keçiricilikdən asılı kəmiyyətdir (ϵ_0 vakuumda dielektrik nüfuzluğudur, ϵ_0 is the vacuum permittivity). $\Delta\epsilon = \epsilon_s - \epsilon_\infty$ dielektrik davamlılığı (dielectric strength) olub, aşağı (relaxed ϵ_s) və yuxarı (unrelaxed ϵ_∞) tezliklərdə dielektrik nüfuzluğundan təyin edilir.

Neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin qarşılıqlı asılılıqları temperaturun dörd fərqli sabit qiymətində nəzərdən keçirilmişdir (Şəkil 6.1.4). Dielektrik nüfuzluğunun qarşılıqlı asılılıqlarından nisbətən yüksək tezliklərdə az miqdarda relaksor hallar müşahidə olunur. 400K temperaturda Cole-Cole diaqramının bir hissəsinə bənzər hallar müşahidə olunur. Pikə uyğun tezliyin ($10^3 \sim 10^4$ Hz) qiymətlərindən 3C-SiC

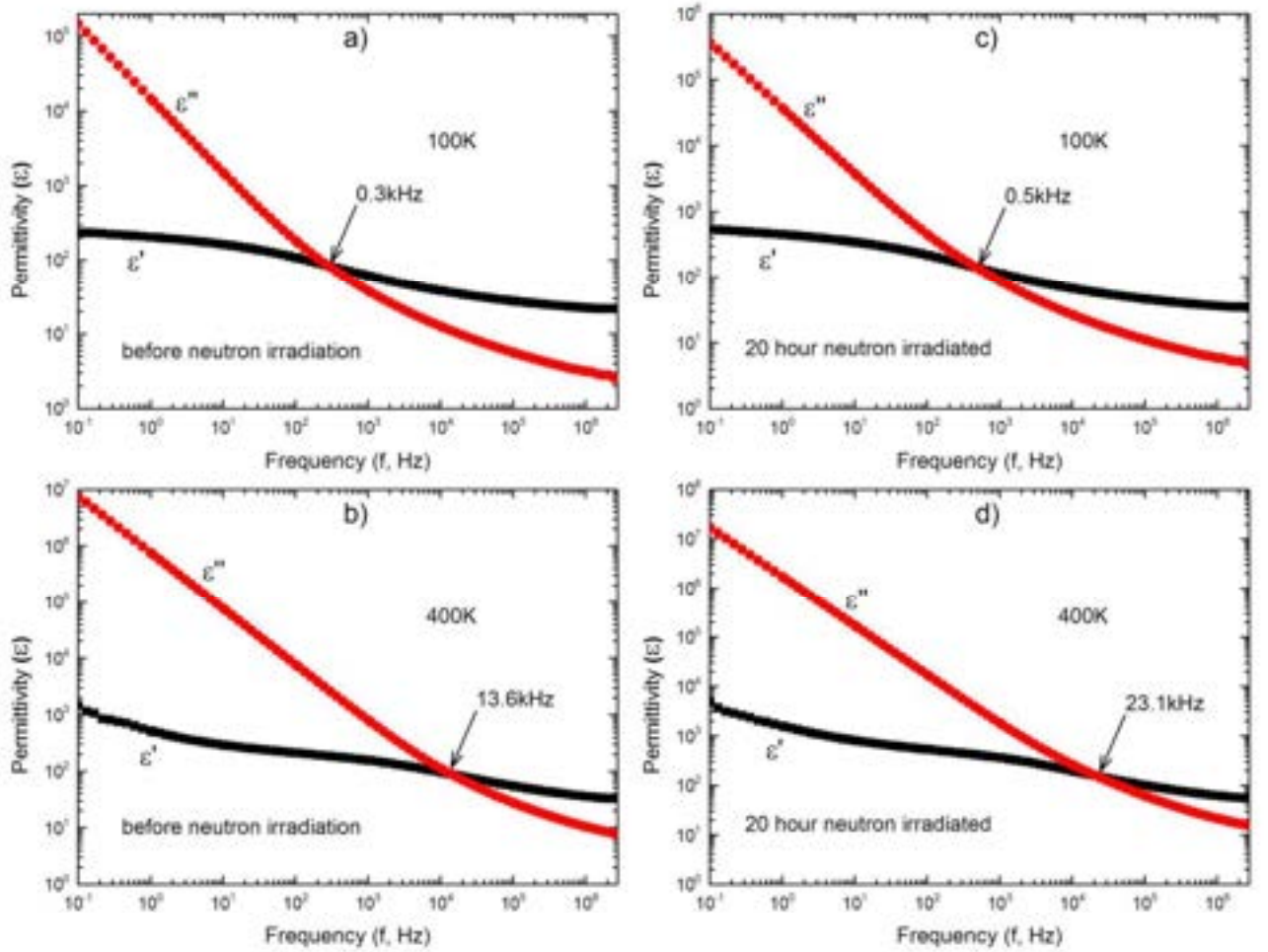
nanomaterialının relaksasiya müddətləri alınır. Müşahidə olunan halların relaksasiya müddətinə əsasən 3C-SiC nanomaterialında əsasən ionik polyarlaşmanın mövcud olduğu demək olar.



Şəkil 6.1.4 Nano 3C-SiC hissəciklərinin dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin qarşılıqlı asılılıqları.

Dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin bir koordinat sistemində nəzərdən keçirilmişdir (Şəkil 6.1.5). Aşağı tezliklər oblastında dielektrik itki faktoru dominantlıq (the dielectric loss factor (ϵ'') is dominated) təşkil edir. Nisbətən yuxarı tezliklər oblastında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsi dominant olur. Ümumi yanaşmada, ionik yükdaşıyıcılar mövcud olan materiallarda bu tip asılılıq tipikdir [129, s.1830002]. Sıçrayışlı keçiricilik və ya yükdaşıyıcıların tələlərdə toplanması halları bu tip asılılıqlarda qəbul olunandır [61, s.62404]. Təcrübələr aparılan tezliklər oblastında bütün hallarda dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin

ayrıləri kəşişir. Əyrilərin kəşişmə nöqtələri temperatur və şüalanmanın təsirindən tezliyin artması istiqamətində sürüşür. Bu isə onu deməyə əsas verir ki, tempertur və şüalanma nəticəsində ionik polyarlaşma dərəcəsi artır. Digər tərəfdən şüalanma nəticəsində nümunə daxilində yaranan əlavə aşqar elementlər də mövcud sürüşməyə səbəb ola bilər. Kəşişmə nöqtəsindən yuxarı tezliklər oblastında Jonscherin “universal dielektrik izahı” (Jonscher’s “universal dielectric response”) izlənir [43, s.5618; 61, s.062404; 72, s.190; 73, s.681; 146, s.674].



Şəkil 6.1.5 Nano 3C-SiC hissəciklərinin dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin tezlik asılılıqları

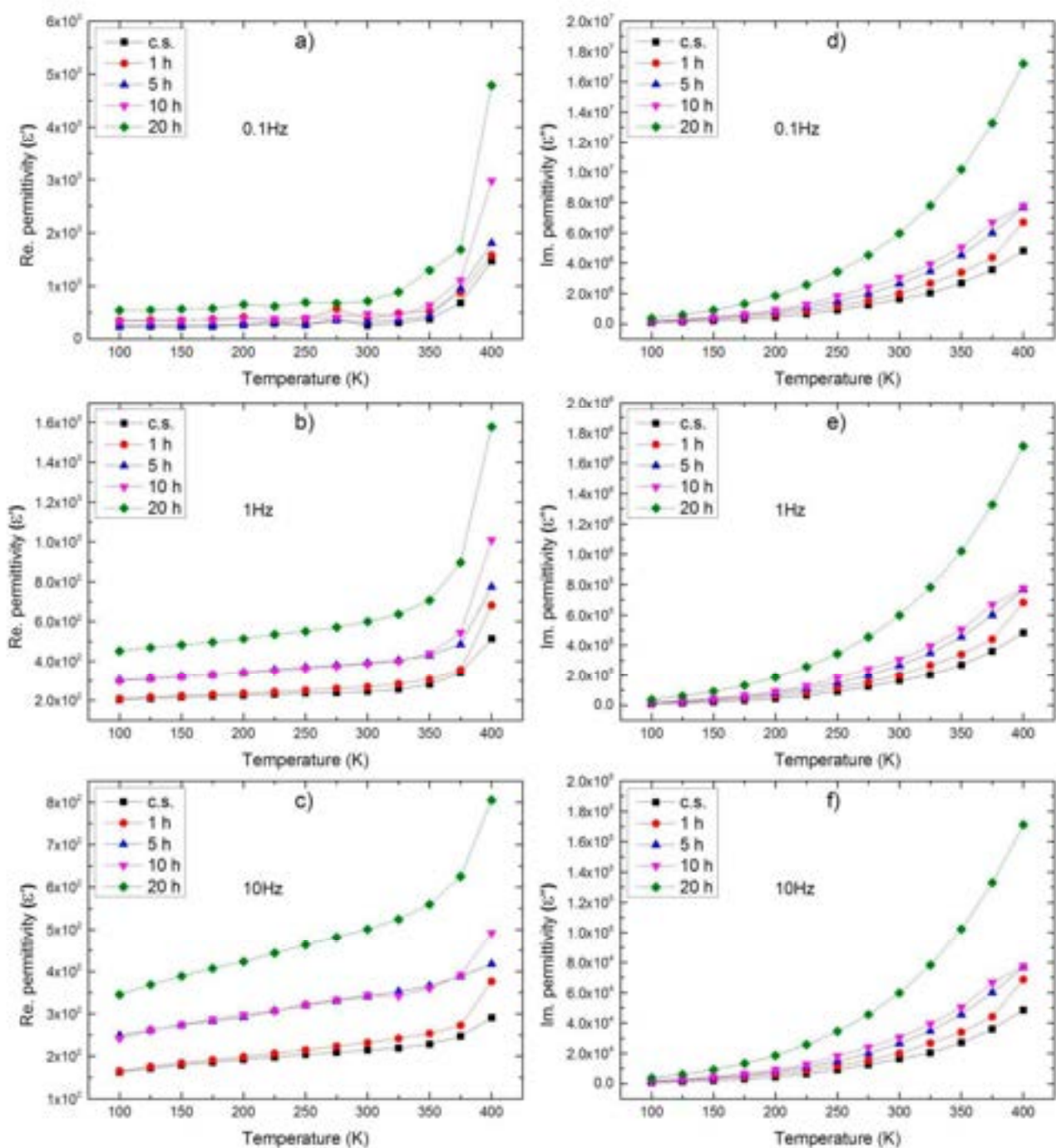
Ümumiyyətlə neytron seli ilə şüalanma nəticəsində 3C-SiC nanomateriali daxilində əlavə aşqar elementlər yaranır. Yaranmış yeni aşqar elementlərin tipindən asılı olaraq dielektrik nüfuzluğu arta və ya azala bilər. Nanokristallik 3C-SiC

daxilində yaranma ehtimalı çox olan aşqar element Si31 izotopudur. Si31 izotopu isə β aktiv izotop olub tez bir zamanda P31 izotopuna çevrilir. P31 stabil izotopunun 3C-SiC nanomaterialı daxilində konsentrasiyasının artması birbaşa elektrik və dielektrik xassələrinə təsir edir. Aparılan təcrübələrdə dielektrik nüfuzluğunun şüalanma müddətinə mütənasib olaraq artmasının səbəblərindən biri də məhz P31 izotopunun konsentrasiyasının artmasıdır.

6.1.2 Dielektrik nüfuzluğunun temperatur asılılığında neytron şüalanma effektləri

Ölçmələr zamanı nümunələrin dielektrik xassələrinin temperatur asılılıqları tezliyin müxtəlif sabit qiymətlərində nəzərdən keçirilmişdir. Təcrübələr tezliyin 0.1Hz – 2.5MHz aralığında 88 müxtəlif sabit qiymətlərində aparılmışdır və ölçmələr zamanı məlum olmuşdur ki, tezliyin müxtəlif qiymətlərində dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin temperatur asılılığı fərqlidir. Tezlik aralığının geniş olduğunu və sabit qiymətlərin çoxluğunu nəzərə alaraq bu tezlik aralıqları şərti olaraq üç qrupa ayrılmışdır. Hər qrupda 3 tezlik olmaqla ümumilikdə 9 sabit tezlik oblastında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin temperatur asılılığı nəzərdən keçirilmişdir. Birinci qrupu şərti olaraq aşağı tezliklər (0.1Hz və 10Hz) oblastı, ikinci qrupu orta tezliklər (1kHz və 0.1MHz) oblastı və üçüncü qrupu yüksək tezliklər (0,5MHz və 2.5MHz) oblastına ayırmaq olar. İlk olaraq aşağı tezlik oblastında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin temperatur asılılıqları nəzərdən keçirilmişdir (**Şəkil 6.1.6**).

Şəkildən şüalanmadan öncəki nümunələrin dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin şüalanmadan sonrakı nümunələrə nisbətən kəskin fərqləndiyi aşkar müşahidə olunur. Kiçik tezlikdə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsi temperaturun 350K qiymətinə qədər demək olar ki, temperaturdan asılı deyil (**Şəkil 6.1.6a**). Lakin 350K – də yuxarı temperaturda dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsində kəskin artma müşahidə olunur.



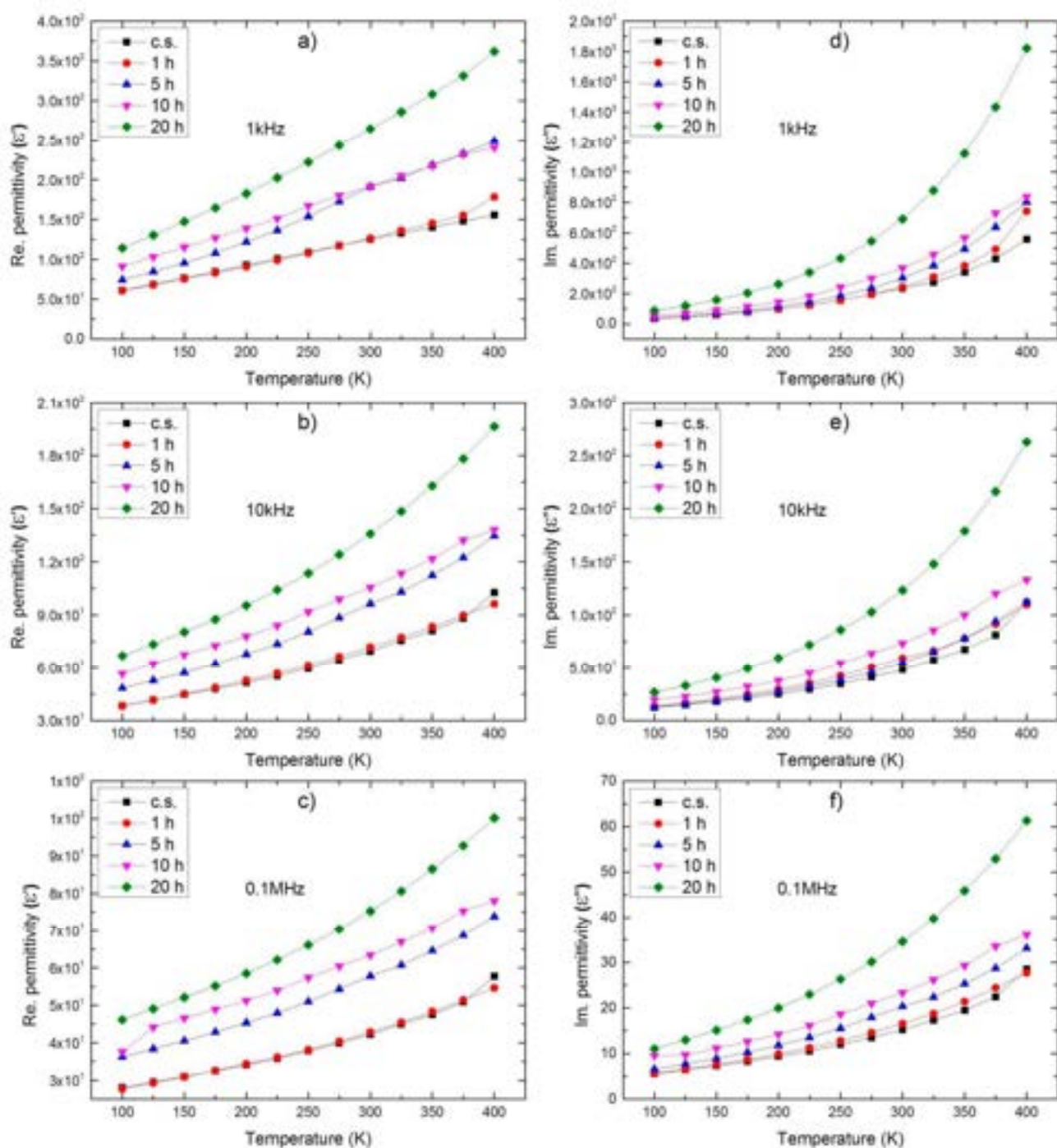
Şəkil 6.1.6 İlkin halda (c.s.) və müxtəlif müddətlərdə (1,5,10,20 saat) neytron selinin təsirinə məruz qalmış nano 3C-SiC – in aşağı tezlik oblastında müxtəlif tezliklərdə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi (a, b, c) və xəyali (d, e, f) hissələrinin temperatur asılılıqları

0.1Hz tezlikdə $T < 350\text{K}$ intervalında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsinə neytron selinin təsiri çox az müşahidə olunur (Şəkil 6.1.6a). Tezliyin 1Hz və 10Hz qiymətlərində $T < 350\text{K}$ intervalında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi

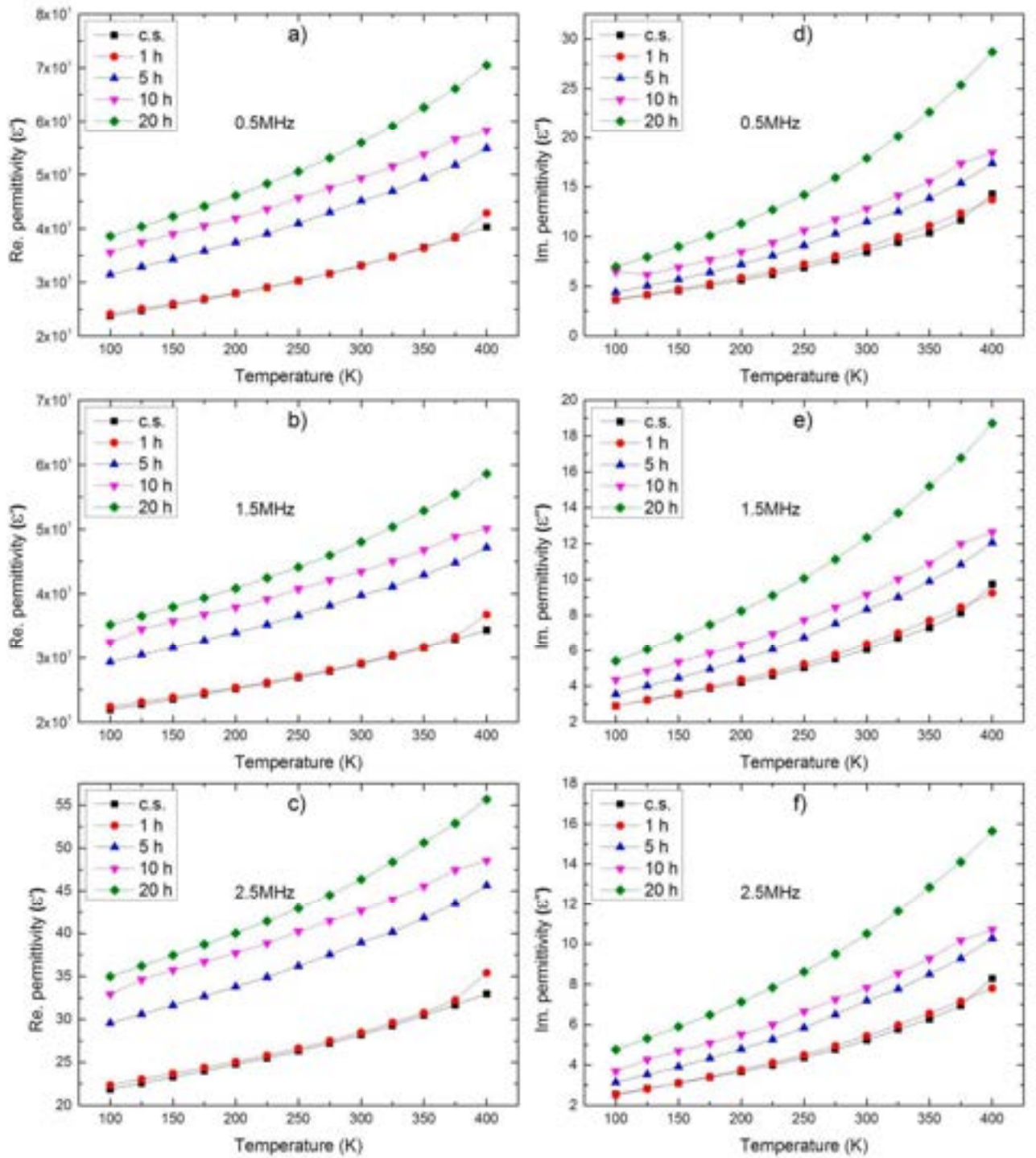
hissəsinin temperaturdan asılılığı çox azdır (**Şəkil 6.1.6 b və c**). Lakin 1Hz və 10Hz tezliklərdə neytron selinin təsiri nəticəsində dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsində artma aşkar müşahidə olunur. Digər hala anoloji olaraq 1Hz və 10Hz tezliklərdə $T > 350K$ intervalında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsində kəskin artma mövcuddur. Eksperimental nəticələrə əsasən demək olar ki, aşağı tezliklərdə temperaturun nisbətən böyük qiymətlərində polyarlaşma kəskin artır. Dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsinin temperatur asılılığı demək olar ki, bütün hallarda oxşardır (**Şəkil 6.1.6 d, e, f**). Neytron selinin təsir effekti isə nisbətən yuxarı temperaturlarda daha aşkar müşahidə olunur.

Orta tezliklər oblastında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsi temperaturdan demək olar ki, xətti asılı olaraq artır (**Şəkil 6.1.7 a, b, c**). Həmçinin, neytron selinin təsir effekti tezliyin artması ilə daha aşkar müşahidə olunur. Digər tərəfdən dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsi aşağı tezliklərdə olduğu kimidir (**Şəkil 6.1.7 d, e, f**). $f(\epsilon'')=f(T)$ asılılıqlarında 0.1MHz tezlikdə kiçik temperturda da neytron selinin təsiri müşahidə olunur (**Şəkil 6.1.7 f**).

Yüksək tezliklərdə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin ədədi qiymətlərində kəskin dəyişikliklər müşahidə olunmuşdur (**Şəkil 6.1.8**). Bu tezliklərdə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissələri demək olar ki, xətti xarakter daşıyır (**Şəkil 6.1.8 a, b, c**). Yüksək tezliklərdə dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissələri də demək olar ki xətti xarakter daşıyır (**Şəkil 6.1.8 d, e, f**). 0.5MHz – 2.5MHz telik aralıqlarında dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissələrində neytronla şüalanmanın təsir effektləri açıq aşkar müşahidə olunur. Digər tərəfdən yüksək tezliklər oblastında dielektrik nüfuzluğunun ədədi qiyməti kəskin azalır. Tezliyin artmasına mütənasib olaraq dielektrik nüfuzluğunun ədədi qiymətinin azalmasının səbəb yükdaşıyıcıların elektrik sahəsinin təsiri ilə fəallaşması ola bilər. Ümumilikdə, dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrində şüalanmadan sonra artma müşahidə olunur. Bu artmanı neytron selinin təsiri nəticəsində nümunə daxilində yaranmış əlavə yükdaşıyıcıların ekstra polyarlaşması kimi qiymətləndirmək olar.



Şəkil 6.1.7 İlk halda (c.s.) və müxtəlif müddətlərdə (1,5,10,20 saat) neytron selinin təsirinə məruz qalmış nano 3C-SiC – in orta tezlik oblastında müxtəlif tezliklərdə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi (a, b, c) və xəyali (d, e, f) hissələrinin temperatur asılıqları

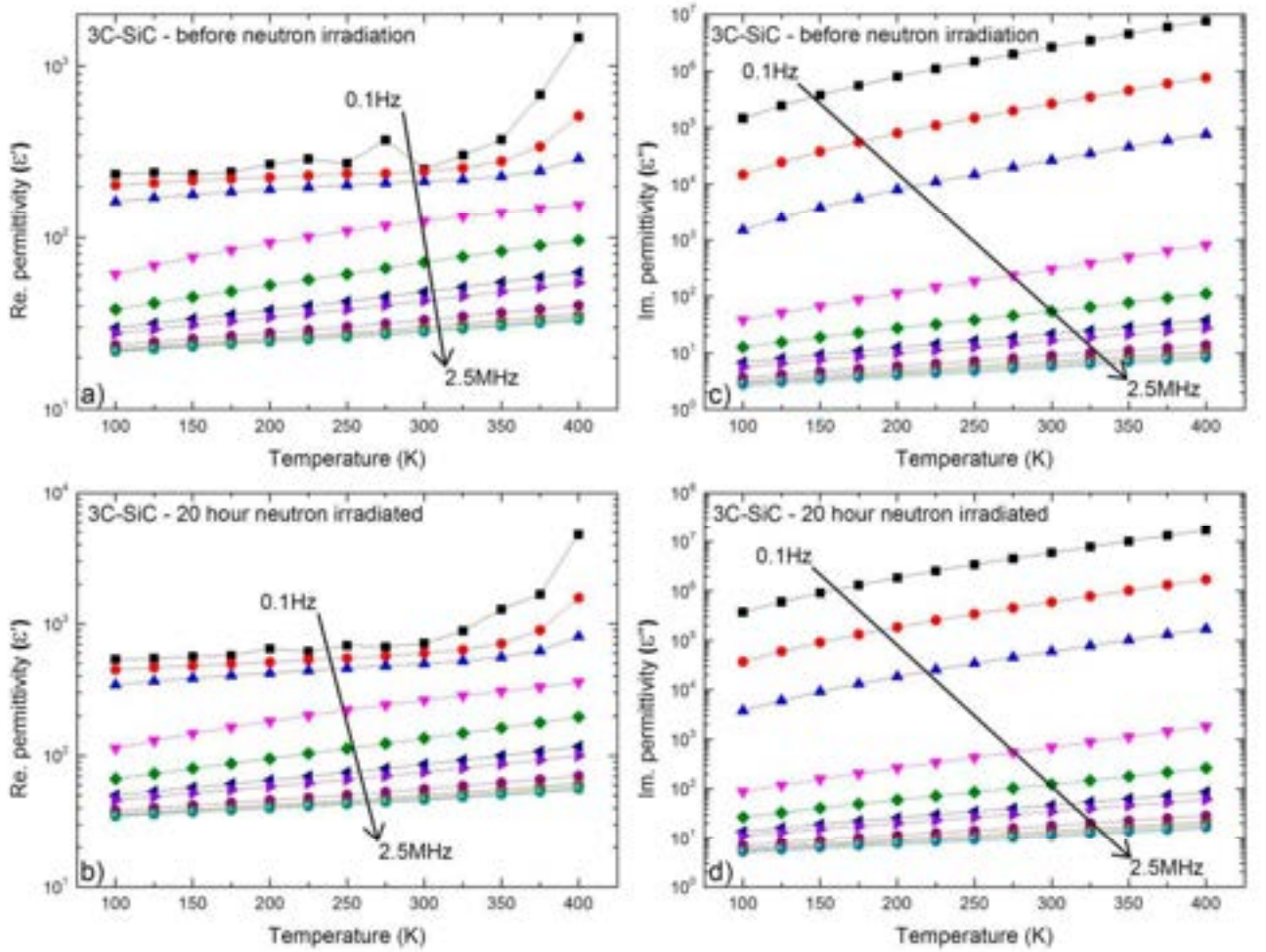


Şəkil 6.1.8 İlkin halda (c.s.) və müxtəlif müddətlərdə (1,5,10,20 saat) neytron selinin təsirinə məruz qalmış nano 3C-SiC – in yüksək tezlik oblastında müxtəlif tezliklərdə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi (a, b, c) və xəyali (d, e, f) hissələrinin temperatur asılılıqları

Digər tərəfdən, nümunələrdə polyarlaşmanın çox və ya az olması sistemdə uyğun itginin olmasına səbəb olur. Dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali

hissələinin şüalanmadan öncə və sonra fərqli tezliklərdə temperatur asılılıqları bir koordinat sistemində nəzərdən keçirilmişdir (Şəkil 6.1.9).

Neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsində asılılıqlar oxşardır (Şəkil 6.1.9 a, b). Lakin şüalanmadan sonra dielektrik nüfuzluğunun ədədi qiyməti artmışdır. Digər tərəfdən hər iki halda, tezliyin artması ilə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsinin temperaturdan asılılığı azalır. Dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsində də anoloji hallar müşahidə olunur (Şəkil 6.1.9 c, d). Bunun isə əsas səbəbi tezliyin artması ilə yükdaşıyıcıların aktivləşməsidir.



Şəkil 6.1.9 Dielektrik nüfuzluğunun həqiqi (a və b) və xəyali (c və d) hissələinin şüalanmadan öncə və sonra fərqli tezliklərdə temperatur asılılıqları

Origin Pro 9 proqramından istifadə edərək, dielektrik nüfuzluğunun temperatur asılılığının nəzəri qanunauyğunluğu tapılmışdır. Bu məqsədlə dielektrik

nüfuzluğunun təcrübələrdən alınmış əyriləri nəzəri qrafiklə uyğunlaşdırılmışdır. Məlum olmuşdur ki, dielektrik nüfuzluğunun temperatur asılılığı ümumi tendensiyada aşağıdakı düstur ilə xarakterizə oluna bilər:

$$\varepsilon(T) = \varepsilon_0 + A_1 \left[1 - \exp \left(- \frac{T}{k_1} \right) \right] + A_2 \left[1 - \exp \left(- \frac{T}{k_2} \right) \right] \quad (6.5)$$

burada, ε_0 , A_1 , A_2 , k_1 və k_2 neytron selinin təsir müddətindən və tezlikdən asılı olan sabit kəmiyyətlərdir.

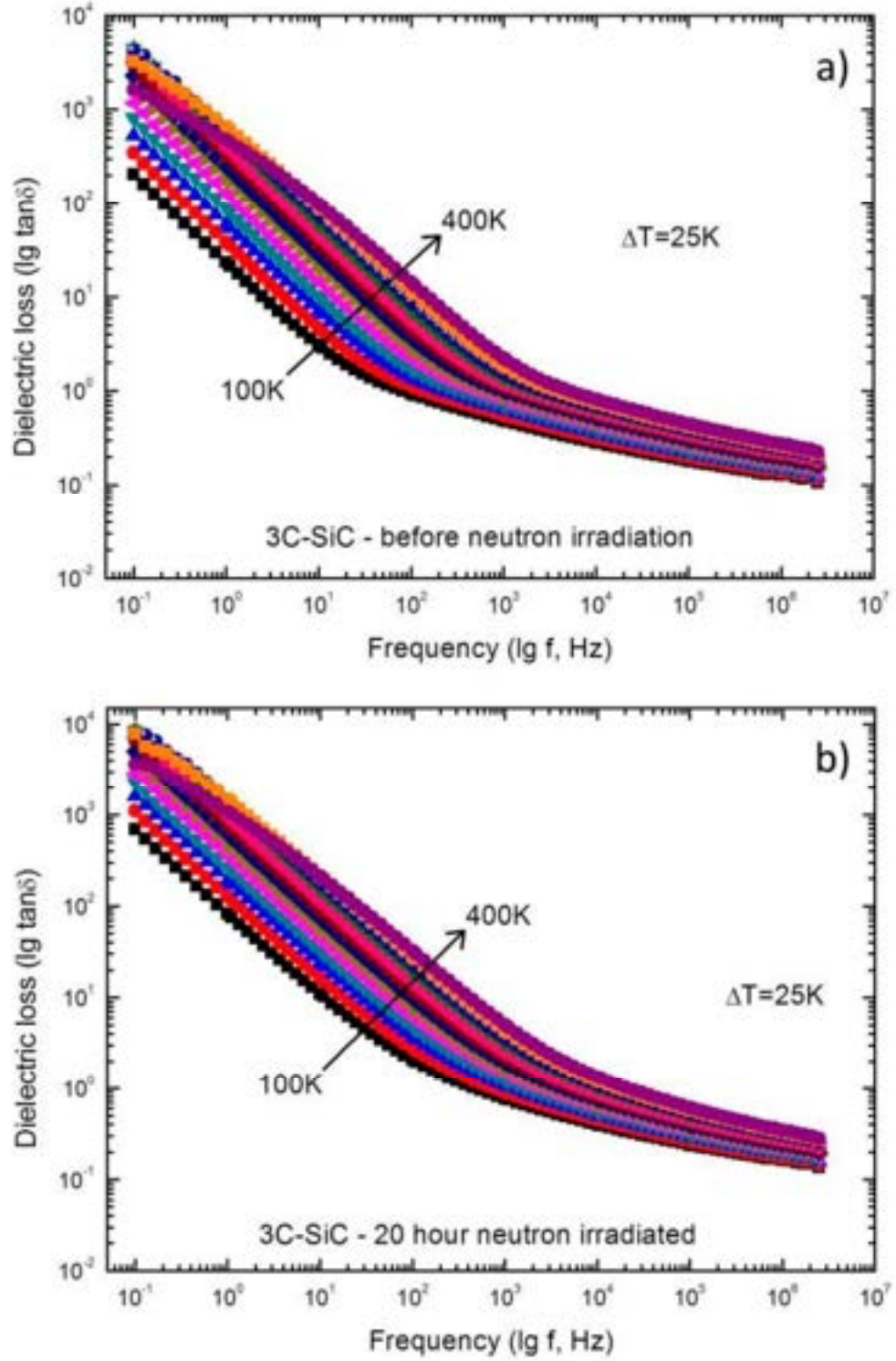
Ümumi yanaşmada, neytron selinin təsiri ilə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissəsələrinin artmasına bir neçə faktor təsir edə bilər. İlk olaraq neytron selinin təsiri nəticəsində nanomaterial daxilində əlavə radiasion defektlər yarana bilər. Bu defektlər tipindən asılı olaraq polyarlaşmanı artırma və ya azalda bilər. Digər tərəfdən, neytronlarla şüalanma zamanı yaranan əlavə yükdaşıyıcılar polyarlaşmaya təsir edə bilər. Həmçinin neytron seli ilə şüalanma zamanı 3C-SiC nanomaterialında radioaktiv çevrilmələr baş verir. Bu isə 3C-SiC nanohissəciklərinin səth yüklərinin polyarlaşmasına təsir edir. Neytronlarla şüalanma zamanı nanomaterial daxilində yaranan aşqar elementlər tipindən (n və ya p tip) asılı olaraq polyarlaşmanı artırma və ya azalda bilər. Bu isə, dielektrik nüfuzluğunun ədədi qiymətinə birbaşa təsir edən faktordur.

6.2 Neytronlarla şüalanmanın nanokristallik 3C-SiC-in dielektrik

itkilərinə təsiri

3C-SiC nanokristallarının dielektrik itkilərinin tezlik və temperatur asılılıqları müqayisəli şəkildə nəzərdən keçirilmişdir. Təcrübələr tezliyin 0,1Hz – 2.5MHz aralığında 88 müxtəlif sabit qiymətlərində və temperaturun 100K-400K aralığında (25K addım ilə) aparılmışdır. Ölçmələr zamanı məlum olmuşdur ki, temperaturun müxtəlif qiymətlərində dielektrik itkilərinin tezlik asılılığı fərqlidir. Eyni zamanda, tezliyin müxtəlif sabit qiymətlərində dielektrik itkilərinin temperatur asılılığı da

fərqlidir. İlkin yavaşmada, neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra, 3C-SiC nanokristallarının dielektrik itkilərinin tezlik asılılıqlarını temperaturun müxtəlif sabit qiymətlərində 25K addım ilə nəzərdən keçirilmişdir (Şəkil 6.2.1).



Şəkil 6.2.1 Neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra 3C-SiC nanokristallarının dielektrik itkilərinin tezlik asılılıqları

Tezliyin artması ilə, dielektrik itkiləri ümumi yanaşmada azalır. Aşağı tezliklərdə dielektrik itkilərinin ədədi qiymətinin çox olması tələlərdə mövcud yükdaşıyıcıların polyarizasiyası (polarization of the trapped charge carriers) ilə əlaqələndirilə bilər [252, s.23709; 259, s.6534; 331, s.1285]. Ümumi yanaşmada dielektrik itkilərinin tezlik asılılıqları aşağıdakı bərabərliklə xarakterizə oluna bilər [331, s.1285]:

$$C = C_g + \frac{S\tau}{1 + \tau^2\omega^2} \quad (6.6)$$

burada, C_g həndəsi tutum (geometrical capacitance), S – adsorbsiya cərəyanına uyğun keçiricilik, τ – qipol relaksasiya müddəti və ω - bucaq tezliyidir. (6.6) bərabərliyindən görüldüyü kimi, tezliyin artması ilə C – nin ədədi qiyməti azalır. Başqa sözlə, tezliyin artması ilə dielektrik polyarizasiyası azalır və yüksək tezliklərdə çox kiçik qiymətlər alır. Bu halda dielektrik itkiləri aşağıdakı bərabərliklə ifadə oluna bilər [252, s.23709; 259, s.6534; 331, s.1285]:

$$\tan \delta = \frac{\omega^2 \tau^2 (G_m + S) + G_m}{\omega [S\tau + C_g (\omega^2 \tau^2 + 1)]} \quad (6.7)$$

burada, G_m – qalıq cərəyan keçiriciliyidir (conductance for the residual current). Son bərabərlikdən limit halda aşağıdakı ifadəni yazıla bilər:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \tan \delta = \infty$$

Bərabərliyin diferensial şəklindən maksimum itkiyə uyğun ω – nin qiymətini ala bilərik. Şəkil 6.2.1-dən aydın görünür ki, tezliyin müəyyən qiymətində dielektrik itkilərinin-tezlik asılılıqlarında “əyilmə” mövcuddur. Başqa sözlə tezliyin müəyyən qiymətindən sonra itkilərin tezlik asılılıqları sanki azalır. Bunu isə polyarlaşmanın bu

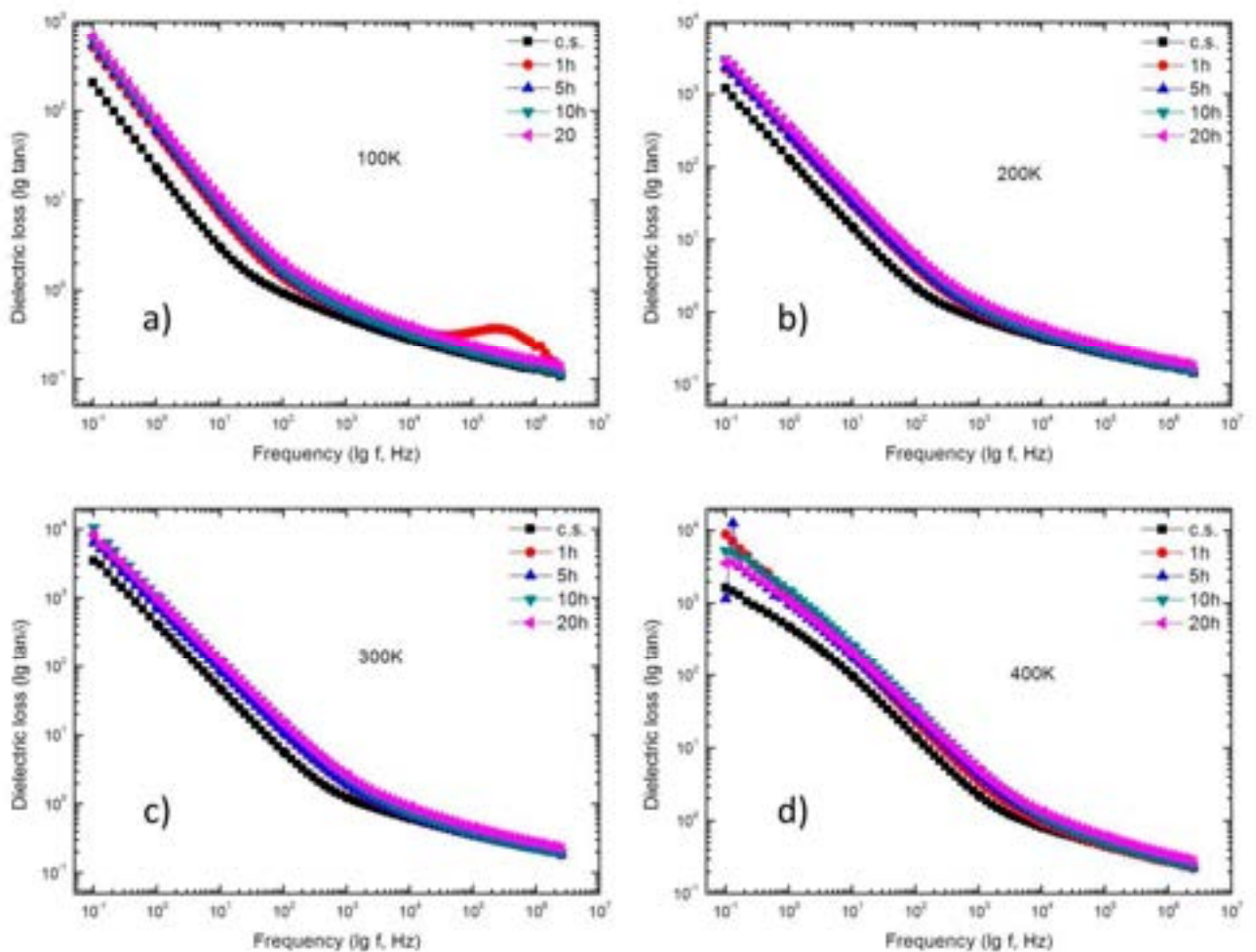
uyğun tezliklərdən sonra kəskin azalması ilə əlaqələndirmək olar. Eyni zamanda, neytronlarla şüalanmadan sonra mövcud asılılıqda “əyilmə halı” tezliyin artması istiqamətində sürüşür. Ola bilsin ki, bunun səbəbi, neytronlarla şüalanma nəticəsində əlavə yükdaşıyıcıların daha çox polyarlaşmasıdır. Digər tərəfdən, neytronlarla şüalanmadan sonra dielektrik itkilərinin ədədi qiymətində müəyyən qədər artma müşahidə olunur. Bunu isə neytronlarla şüalanma zamanı nümunə daxilində yaranan defektlərlə izah etmək olar. Yaranmış defektlər yükdaşıyıcıların hərəkətinə müəyyən qədər təsir edərək onları ləngidir və bunun nəticəsində dielektrik itkilərinin ədədi qiyməti müəyyən qədər artır. Əlavə olaraq, neytronlarla şüalanmadan sonra yeni yükdaşıyıcıların polyarizasiyası da itkilərin qismən armasına təsir göstərə bilər. Digər tərəfdən, fərqli müddətlərdə neytronlarla şüalanma zamanı baş verən dəyişiklikləri müşahidə etmək üçün, temperaturun 100K, 200K, 300K və 400K sabit qiymətlərində dielektrik itkilərinin tezlik asılılıqları nəzərdən keçirilmişdir (**Şəkil 6.2.2**).

Bütün sabit temperaturlarda $f(\tan\delta) \sim f(f)$ asılılığında neytronlara şüalanmadan sonra dielektrik itkilərində artma açıq aydın müşahidə olunur. Digər tərəfdən, $f(\tan\delta) \sim f(f)$ asılılığında tezliyin müəyyən qiymətlərində “əyilmə” halları mövcuddur. Eyni zamanda, bu “əyilmə” halları temperaturun artması ilə tezliyin artması istiqamətində sürüşür. Bunu isə, temperaturun təsiri ilə daha çox polyarlaşma ilə izah etmək olar.

3C-SiC nanokristallarının dielektrik itkilərinin temperatur asılılıqları (dielectric losses versus temperature curves) tezliyin müxtəlif sabit qiymətlərində nəzərdən keçirilmişdir (**Şəkil 6.2.3**). $f(\tan\delta) \sim f(T)$ asılılıqlarında ümumi yanaşmada temperaturun artması ilə dielektrik itkilərinin artması müşahidə olunur. Lakin, aşağı tezliklərdə temperaturun təqribən 350K qiymətindən temperaturun artması ilə dielektrik itkilərinin azalır.

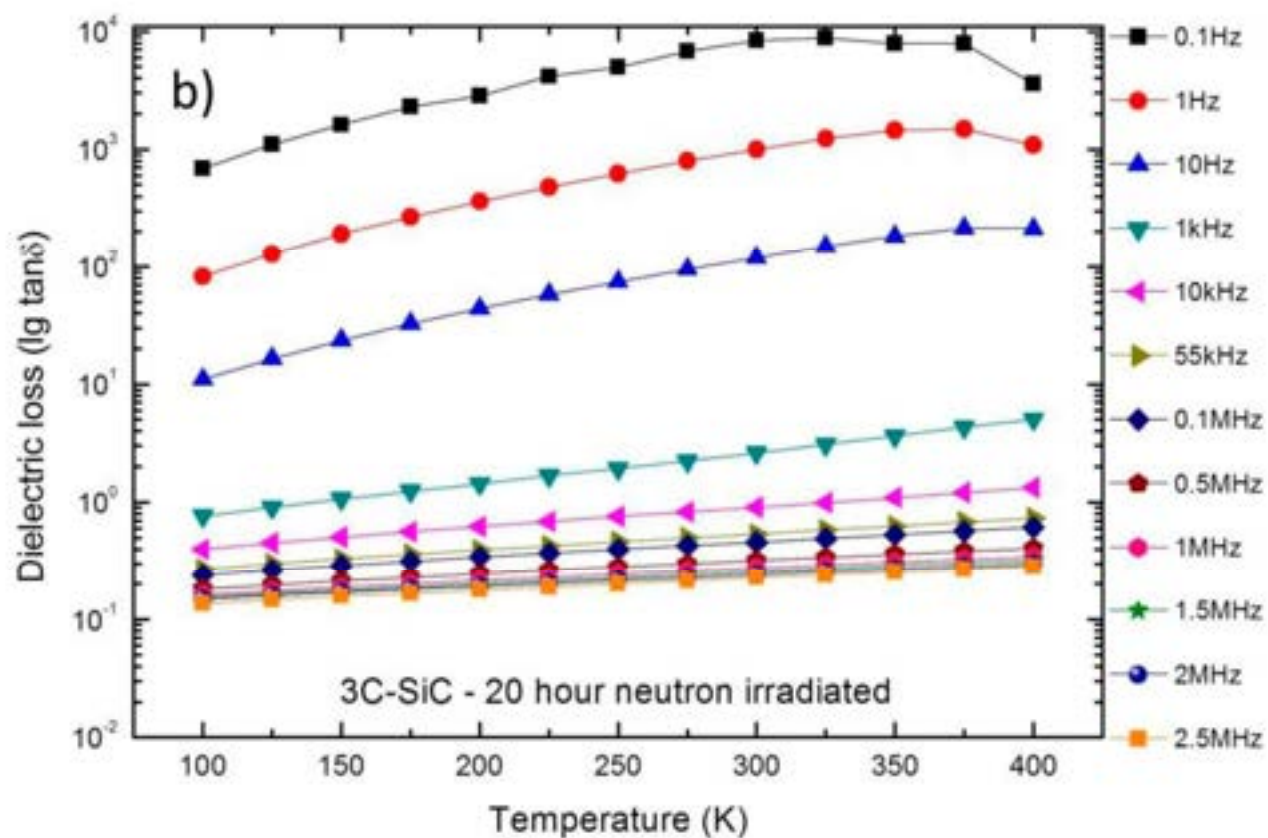
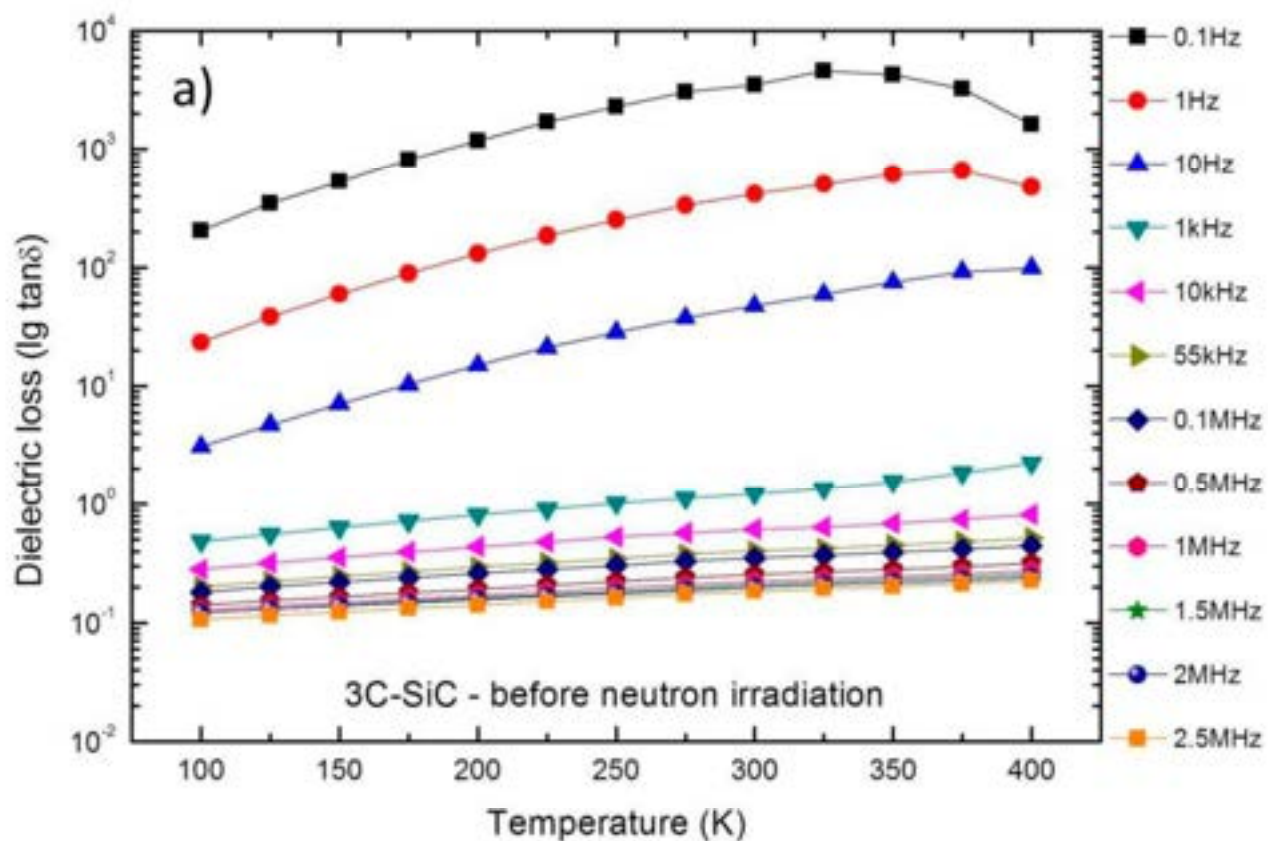
Dielektrik itkilərinin temperatur ilə mütənasib olaraq artmasını defektlər, orientasiya və ya dipol polyarizasiya ilə əlaqəli ola bilər. Temperaturun təqribən 350K qiymətindən dielektrik itkilərinin azalması aşağı tezliklərdə aşkar müşahidə olunur. 3C-SiC nanokristallarında bu azalma metal-yarımkeçirici keçidi ilə bağlı ola bilər. Əlavə olaraq, neytronlarla şüalanma nəticəsində dielektrik itkilərində artma temperatur asılılıqlarında da müşahidə olunur (**Şəkil 6.2.3b**). Eyni zamanda

neytronlarla şüalanmadan sonra metal-yarımkəçirici keçidi çox az miqdarda temperaturun azalması istiqamətində sürüşür (Şəkil 6.2.3a, 6.2.3b). Ümumiyyətlə, bu materiallarda metal-yarımkəçirici keçidini neytron çevrilmələri, rabitə sürüşməsi (dangling bonds), defekt və ya əlavə yükdaşıyıcıların yaranması ilə izah etmək olar [26, s.279]. Digər tərəfdən müxtəlif sabit tezliklərdə $f(\tan\delta) \sim f(T)$ asılılıqlarından neytron selinin təsiri aşkar müşahidə olunur (Şəkil 6.2.4).

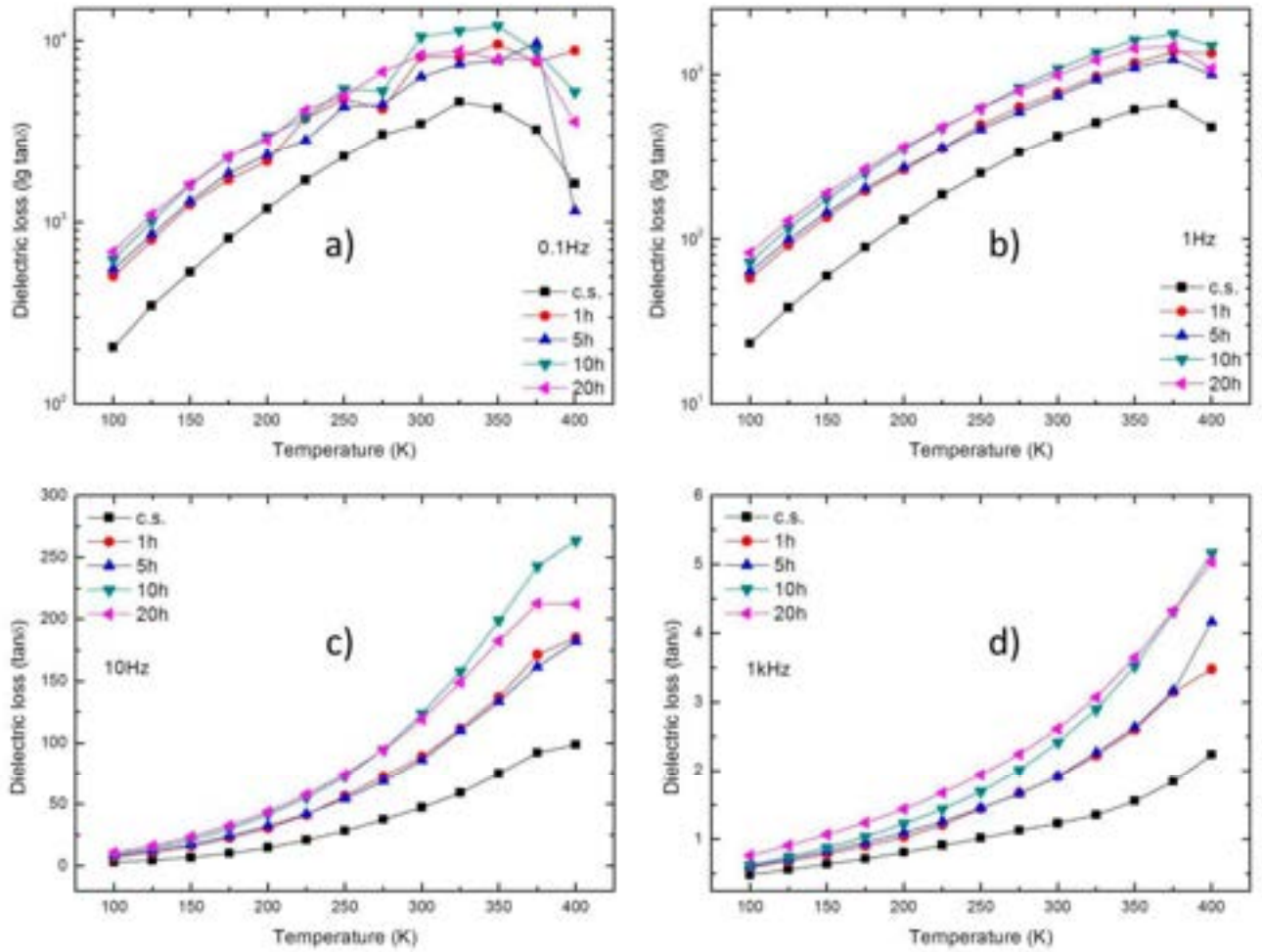


Şəkil 6.2.2 Temperaturun 100K, 200K, 300K və 400K sabit qiymətlərində 3C-SiC nanokristallarının dielektrik itkilərinin tezlik asılılıqları.

Ümumi yanaşmada, temperaturun artması ilə dielektrik itkilərinin ədədi qiyməti artır. Lakin, nisbətən aşağı tezliklərdə temperaturun müəyyən qiymətinə qədər artma müşahidə olunsa da, yüksək temperaturlarda “əks əlaqə” mövcuddur (Şəkil 6.2.4a, 6.2.4b).



Şəkil 6.2.3 Neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra 3C-SiC nanokristallarının dielektrik itkilərinin temperatur asılılıqları

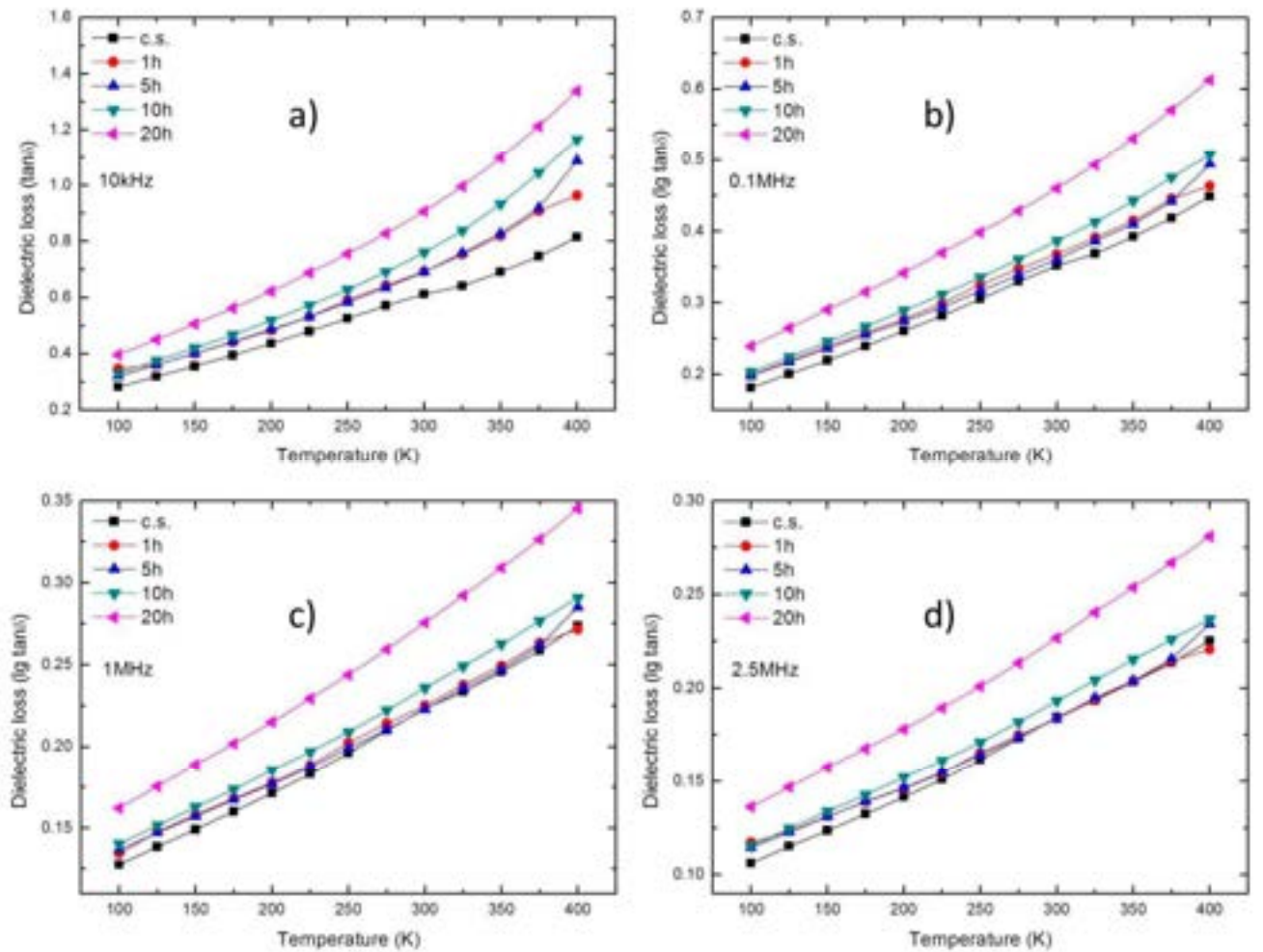


Şəkil 6.2.4 Tezliyin müxtəlif sabit qiymətlərində 3C-SiC nanokristallarının dielektrik itkilərinin temperatur asılılıqları (a-0.1Hz, b-1Hz, c-10Hz, d-1kHz).

Tezliyin kiçik qiymətində $f(\tan\delta) \sim f(T)$ asılılıqlarında alınmış pik, öncə qeyd etdiyimiz kimi, metal-yarımkəçirici keçidi ilə əlaqələndirilir (Şəkil 6.2.3, 6.2.4a, 6.2.4b). Tezliyin müxtəlif sabit qiymətlərində $f(\tan\delta) \sim f(T)$ asılılıqlarından görünür ki, metal-yarımkəçirici keçidi tezliyin artması ilə temperaturun böyük qiymətinə doğru sürüşür (Şəkil 6.2.4a, 6.2.4b, 6.2.4c). Tezliyin $f > 1\text{kHz}$ qiymətlərində eksperimentlər aparılan temperatur intervalında metal-yarımkəçirici keçidi müşahidə edilmir (Şəkil 6.2.4c, 6.2.5a, 6.2.5b).

Tezliyin böyük qiymətlərində $f(\tan\delta) \sim f(T)$ asılılıqları tezliyin artması ilə xətti xarakter daşıyır (Şəkil 6.2.5c, 6.2.5d). Eyni zamanda, nisbətən yüksək tezliklərdə neytron şüalanmanın təsiri ilə dielektrik itkilərdə mütənasib artma daha aydın müşahidə olunur (Şəkil 6.2.5). Dielektrik itkilərinin neytron selinin təsirinə

mütənasib artımını, neytron transmutasiyası nəticəsində yeni yaranmış aşqar elementlərin konsentrasiyasının artması ilə izah etmək olar. Təbii olaraq, 20 saat neytronlarla şüalanmış nümunələrdə ^{31}P izotopunun konsentrasiyası maksimum olacaq. Və bunun nəticəsində, 20 saat şüalanmış nümunədə dielektrik itkiləri digərləri ilə müqayisədə maksimumdur. Bunu qeyd etmək önəmlidir ki, dielektrik itkilərində neytronlarla şüalanma müddətinə mütənasib olaraq artmanı sadəcə olaraq ^{31}P izotopları ilə əlaqələndirmək olmaz. Neytronlarla şüalanma zamanı digər növ neytron çevrilmələri, rabitə sürüşməsi (dangling bonds), defekt və ya əlavə yükdaşıyıcılar da dielektrik itkilərinə birbaşa dəsir edə bilər.

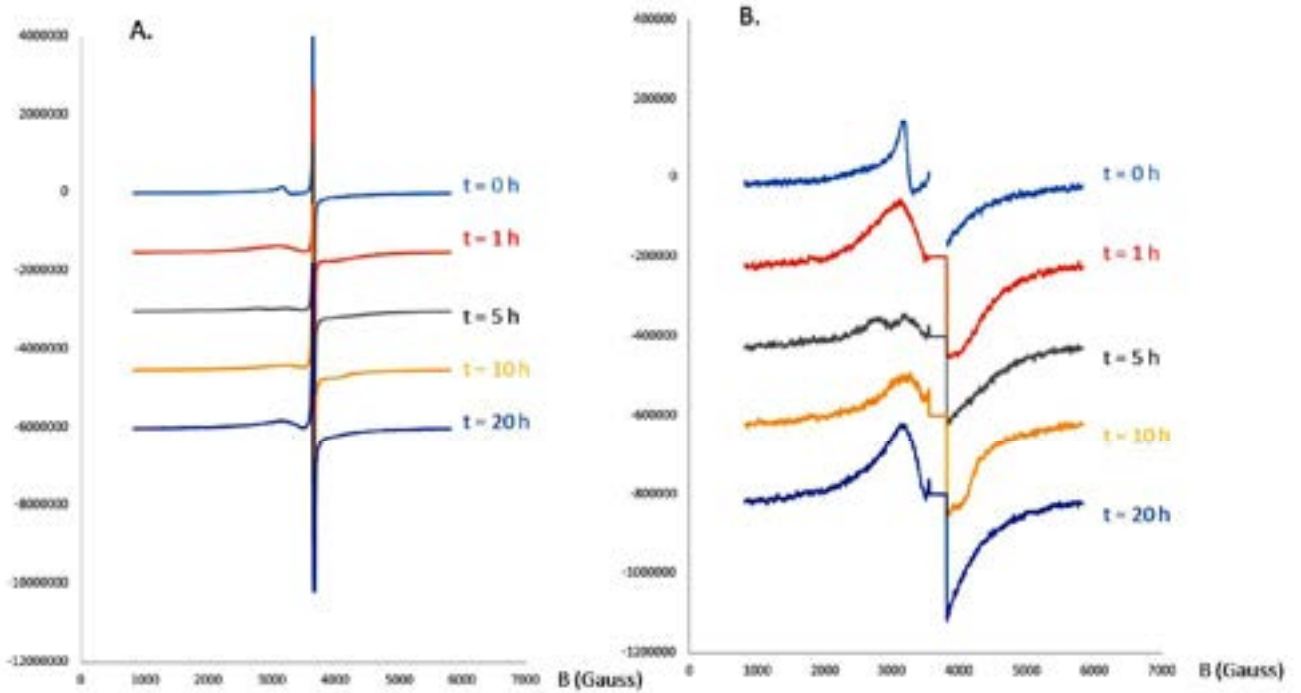


Şəkil 6.2.5 Tezliyin müxtəlif sabit qiymətlərində 3C-SiC nanokristallarının dielektrik itkilərinin temperatur asılılıqları (a-10kHz, b-0.1MHz, c-1MHz, d-2.5MHz).

6.3 Neytron selinin təsirinə məruz qalmış nanokristallik 3C-SiC

hissəciklərinin EPR tədqiqi

İlkin və neytron şüalanmaya məruz qalmış nanokristallik SiC hissəciklərinin EPR spektrləri “geniş aralıqda”, “seçilmiş aralıqda” və “seçilmiş aralıqda doyma həddi” kimi üç halda müqayisəli çəkilmişdir. İlk olaraq geniş diapozonda çəkilmiş spektrləri nəzərdən keçirək (**Şəkil 6.3.1**). Qeyd edək ki, bu diapozonda nümunələr 5000G genişlikdə, mərkəzi maqnit sahəsinin 3300G və gücün 20mVt qiymətində çəkilmişdir.

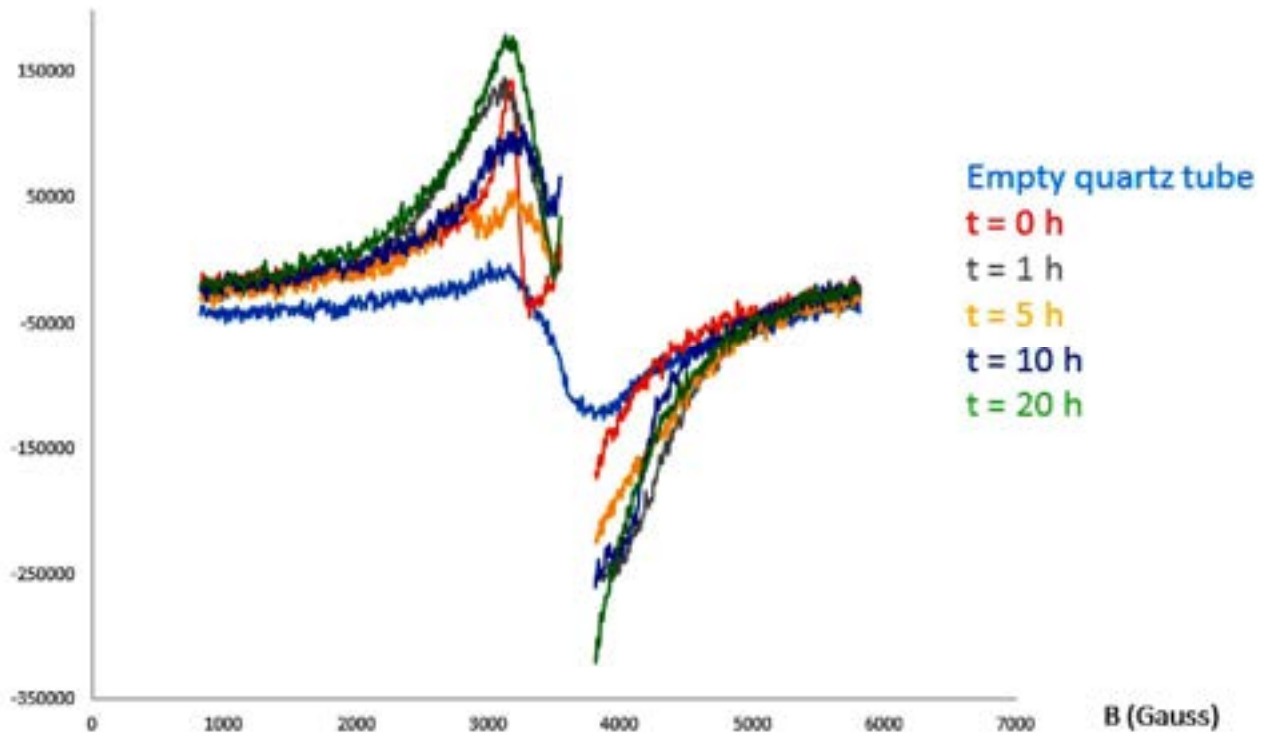


Şəkil 6.3.1 Geniş aralıqda ilkin və neytron şüalanmaya məruz qalmış nanokristallik SiC hissəciklərinin EPR spektrləri (a – tam spektrlər, b – böyüdülmüş (zoom) spektrlər)

Şəkil 6.3.1a-dan g faktorun 2.006 qiymətində (3730 Gauss) güclü siqnal müşahidə olunur. Bu oblastda müşahidə olunan siqnal sərbəst elektron üçün tipikdir. İlkin yanışmada (**Şəkil 6.3.1a**) güclü siqnal digər paramaqnit defektləri müşahidə etməyə imkan vermir. Bu səbəbdən, digər paramaqnit defektləri müşahidə etmək

məqsədlə böyüdülmüş spektrlər nəzərdən keçirilmişdir (Şəkil 6.3.1b). Bu halda digər spektrləri müşahidə etmək mümkün olmuşdur. Paramaqnit fəzanın neytron şüalanmaya mütənasib olaraq dəyişməsi aşkarlanmışdır. Belə ki, şüalanmadan öncə $g=2.28$ (cca 3270 Gauss) müşahidə olunan siqnal şüalanma nəticəsində yox olmuşdur. Neytronlarla şüalanmadan sonra g faktorunun 2.09 – 2.36 aralıqlarında (2800 – 3500 Gauss aralıqlarında) siqnallar müşahidə edilmişdir. Şüalanma müddətinə mütənasib olaraq spektrlərin intensivliyi və forması dəyişir. Böyük spektral genişlik çox sürətli realksasiyaya malikdir və ehtimal olunur ki bu hər hansı keçid elementin d orbitalı ilə əlaqəlidir.

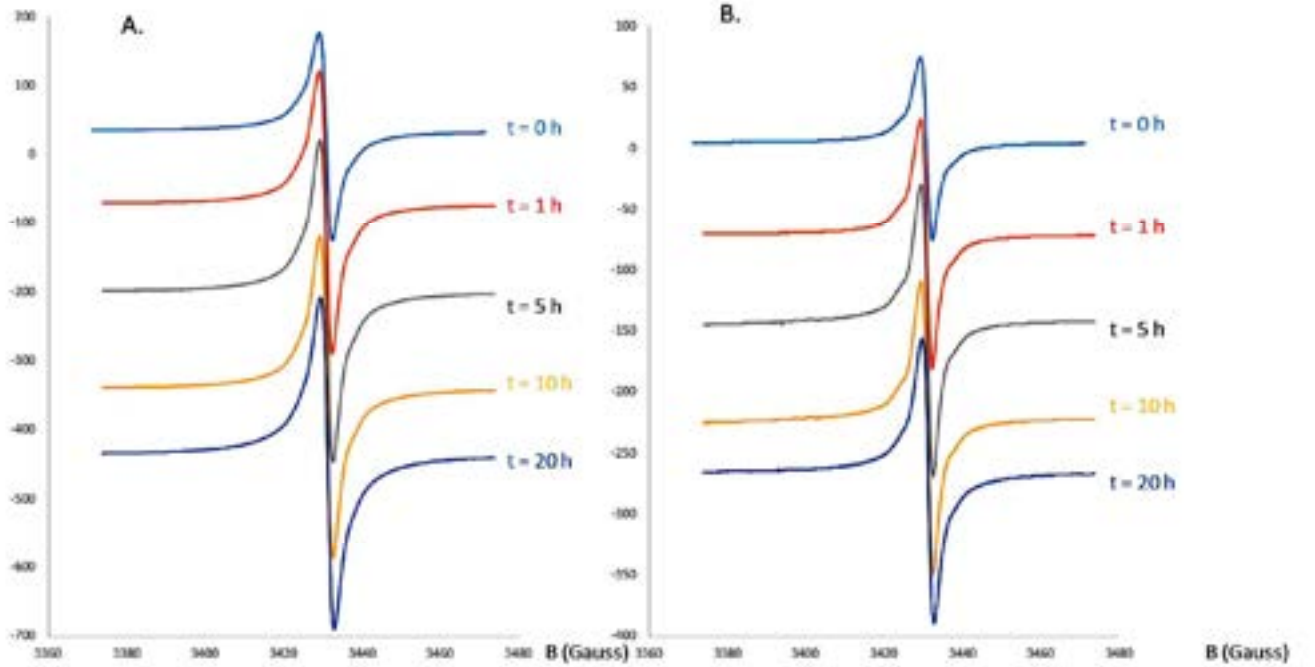
Boş şüşə ilə birlikdə nanokristallik SiC hissəciklərinin EPR spektrləri **şəkil 6.3.2** – da təsvir edilmişdir.



Şəkil 6.3.2 Nanokristallik SiC hissəciklərinin boş şüşə ilə birlikdə müqayisəli EPR spektrləri (EPR parametrləri: Mərkəzi sahə 3000 G = 0.33 T, sweep = 5000 G = 0.5 T, modulasiya amplitudu 0.1 mT, microdalğa gücü 20 mW, qəbuledici artımı 60).

Şəkildən görüldüyü kimi, boş şüşədə digərləri ilə müqayisədə çox aşağı intensivlikli spektr müşahidə olunur. Belə olan halda boş şüşənin yaratdığı əlavə

effektləri nəzərə almamaq olar. Lokallaşmış halları daha dəqiq müşahidə etmək məqsədilə seçilmiş aralıqda spektrlər nəzərdən keçirilmişdir. Şəkil 6.3.3-də sərbəst elektron regionunda seçilmiş aralıqlarda EPR spektrləri təsvir edilmişdir.

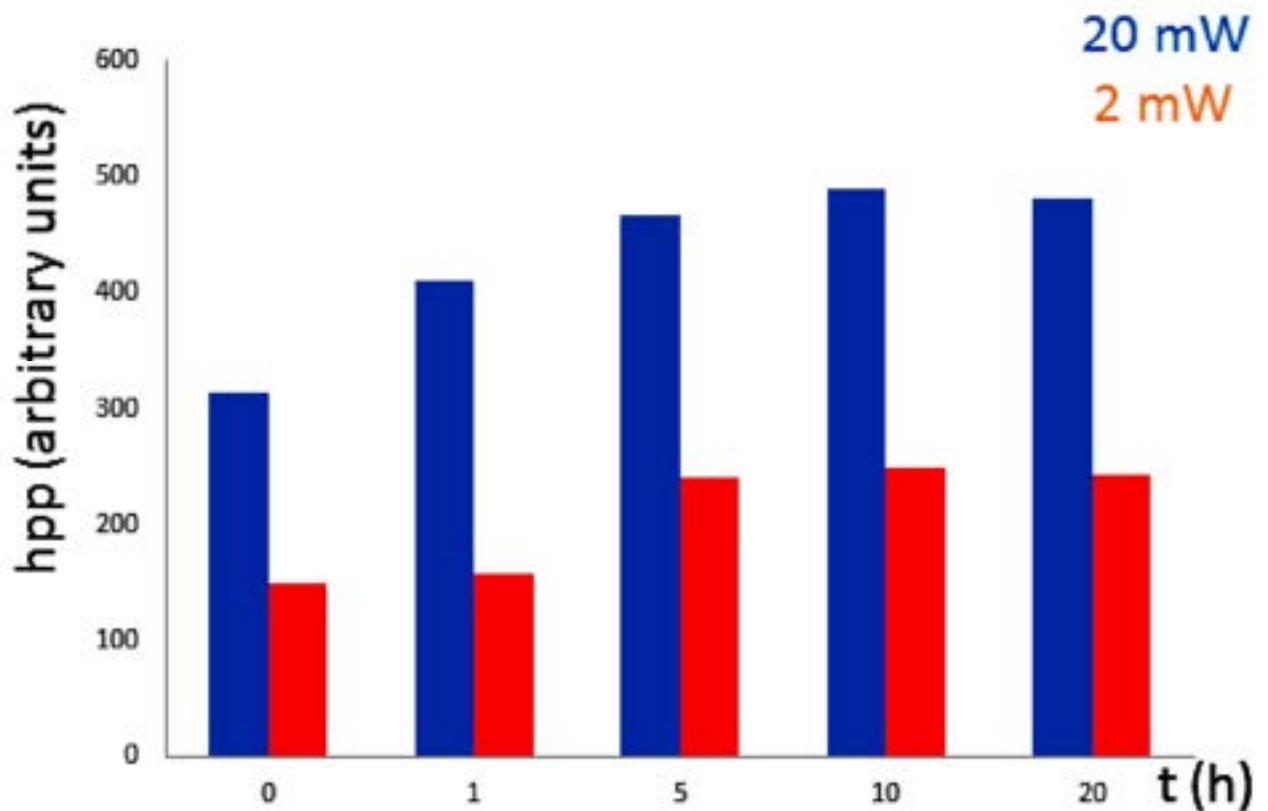


Şəkil 6.3.3 Sərbəst elektron regionunda fərqli güclərdə seçilmiş diapazonlarda EPR spektrləri (EPR parametrləri: mərkəzi sahə $3320 \text{ G} = 3.320 \text{ mT}$, sweep = $100 \text{ G} = 10 \text{ mT}$, moduliasiya amplitudu 0.1 mT , qəbuledici artımı 10, mikrodalğa gücü A. 20 mW , B. 2 mW).

Sərbəst elektron regionunda mövcud siqnalların dayanıqlılıq dərəcəsini yoxlamaq və həmçinin sərbəst radikallarla sürətli relaksasiya hallarını ayırmaq məqsədi ilə iki fərqli gücdə EPR spektrləri nəzərdən keçirilmişdir (Şəkil 6.3.3a və b). Doyma həddində aparılan EPR analizlərindən məlum olmuşdur ki, mövcud siqnallar kifayət qədər dayanıqlıdır. g faktorun 2.006 qiymətində fərqli şüalanma müddətlərində və mikrodalğa güclərində amplitutun dəyişməsi nəzərdən keçirilmişdir (Şəkil 6.3.4).

g faktorun 2.006 qiymətində müşahidə olunan siqnal iki komponentdən ibarətdir. Biri çox güclü siqnaldır ki, bu da 20 mW gücdə 3300 G – da, 2 mW gücdə isə 3030 G – da müşahidə olunur. Digəri isə çox genişdir və spektrlərdən aydın

müşahidə olunmur. Bu daha aşağı mikrodalğa gücündə nisbətən aydın müşahidə olunur (Şəkil 6.17b). Müşahidə olunan siqnalların intensivliyinin neytronla şüalanma müddətinə mütənasib olaraq artması şəkil 6.18 – dən müşahidə olunur. g faktorun nisbətən böyük qiymətləri adətən keçid metalının d orbitindəki elektronlar kimi nəzərə alınır. Lakin qeyd etmək lazımdır ki, ola bilsin ki, bu hal nanokristallik SiC hissəciklərində hər hansı əlavə radikalların mövcudluğunun göstəricisidir.



Şəkil 6.3.4 Fərqli şüalanma müddətlərində və mikrodalğa güclərində amplitutun dəyişməsi

Ümumi yanışmada xarici sahənin 3300G ətrafında iki lokal hal müşahidə edilmişdir. Lokal hallara uyğun g – faktorun iki fərqli qiymətlərində paramaqlıt mərkəzlərin sayı hesablanmışdır (Cədvəl 6.3.1). Hesablamalar təcrübələrdən alınmış uyğun spektrləri cihazın proqram təminatının köməyi ilə ikiqat inteqrallama ilə aparılmışdır [92, c.1, s.79].

$$\frac{DI}{\text{Double Integral}} = \overbrace{N}^{\text{Density of center}} \cdot \underbrace{[G_R \cdot C_t \cdot n]}_{\text{Normalized spectromet or settings}} \cdot \left[\frac{\overbrace{\sqrt{P \cdot B_m \cdot Q \cdot n_B \cdot S \cdot (S+1) \cdot n_s}}^{\text{Measurable parameters}}}{\underbrace{f(B_1, B_m)}_{\text{Determined from EPR imaging}}} \right] \quad (6.8)$$

burada N standart nümunə üçün bir dəfə ölçülür. Alınmış qiymət EPR proqramında qeyd edilir və bütün hesablamalar ona uyğun aparılır. Beləliklə, (6.8) tənliyində N - məlum spinlərin standart sayı, G_R - qəbuledici artımı, C_t - konversiya vaxtı, n - çəkilişlərin sayı, P - mikrodalğa gücü (W), B_m - modulyasiya ampplitutu (Qauss), Q - rezanatoru keyfiyyət faktoru, n_B - temperaturdan asılı Bolsman faktoru, S - ümumi elektron spini, n_s - spinlərin sayı, $f(B_1, B_m)$ paylanma funksiyasıdır. Qeyd olunan bütün parametrlər kompüter və proqram təminatının köməyi ilə tapılır. Eyni zamanda, neytronlarla şüalanmış və ilkin nümunələrdə mövcud mərkəzlərin sayı kompüter və proqram təminatında ikiqat inteqrallama ilə müqayisəli hesablanmışdır. Həmçinin, vahid həcmdə olan spinlərin sayını da hesablamaq mümkündür.

$$M_0 = H_0 \chi_0 = \frac{B_0}{\mu_0} \chi_0$$

$$M_0 = N \frac{\gamma^2 \hbar^2 B_0 S(S+1)}{3k_B T} J T^{-1} m^{-3} (= Am^{-1}) \quad (6.9)$$

$S = 1/2$ halında mərkəzlərin sayını aşağıdakı bərabərliklə hesablaya bilərik.

$$N = \frac{4k_B T_{sample} M_0}{g^2 \beta^2 B_0} \quad (6.10)$$

burada

$$g\beta = \gamma\hbar \quad (6.11)$$

$\gamma = 1.7608 \times 10^{11} \text{ s}^{-1} \text{ T}^{-1}$ sabit, \hbar - götürülmüş Plank və ya Dirak sabiti, B_0 - statik maqnit

sahəsi, k_B – Bolsman sabiti, T – nümunənin temperaturu (K), M_0 – spin maqnitonudur.

Cədvəl 6.3.1 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra paramaqnit mərkəzlərin sayı ($N_{\text{ş.m.}}$ uyğun şüalanma müddətində, N_0 şüalanmadan öncə olan mərkəz sayıdır)

Neytron seli ilə şüalanma zamanı (saat)	g – faktorun ədədi qiyməti	Ümumi mərkəzlər ($N_{\text{ş.m.}}-N_0$, m./sm ³)	$g = 2.006$ uyğun mərkəzlər ($N_{\text{ş.m.}}-N_0$, m./sm ³)
0	2.29 2.006	0	0
1	2.13 2.006	1.5×10^{18}	0.7×10^{16}
5	2.58 2.13 2.006	1.6×10^{18}	1.5×10^{16}
10	2.34 2.006	3.3×10^{18}	2×10^{16}
20	2.13 2.006	3.5×10^{18}	2.7×10^{16}

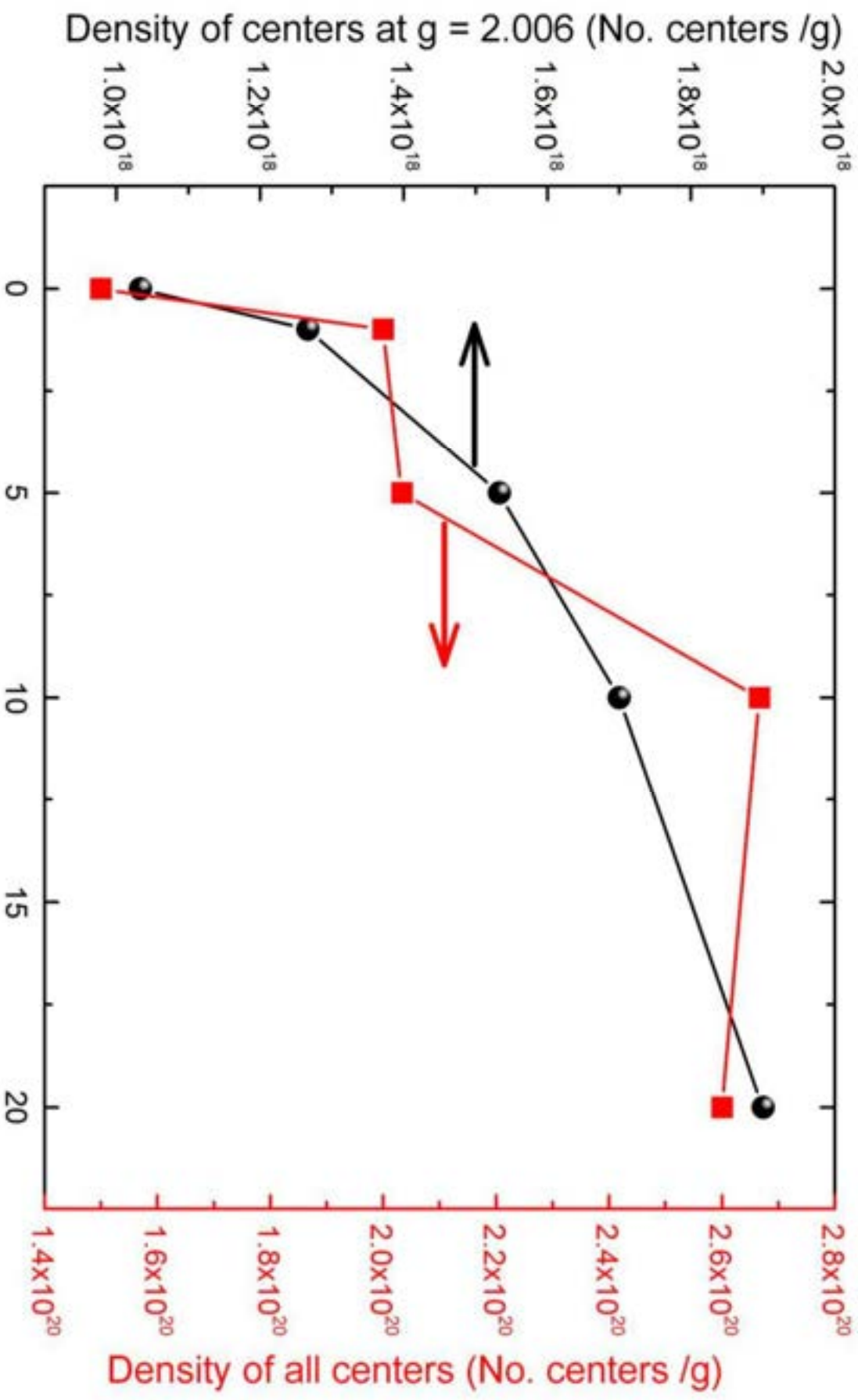
Cədvəldən şüalanma müddətinin artması ilə ümumi yanaşmada sərbəst radikalların sayının artması asanlıqla görünür. Həmçinin, şüalanma müddətinin artması ilə sərbəst elektronlara uyğun mərkəzlərin (g – faktorun 2.006 qiymətində) sayının da təqribən iki dəfəyə qədər artması müşahidə olunur. Belə ki, şüalanmadan öncə sərbəst elektronlara uyğun mərkəzlərin sayı 3.1×10^{16} mərkəz/sm³ (ümumi mərkəzlərin sayı 4.5×10^{18} mərkəz/sm³) olduğu halda, 20 saata qədər şüalanmadan sonra bu sayı 5.7×10^{16} mərkəz/sm³ qədər (ümumi mərkəzlərin sayı 8.0×10^{18} mərkəz/sm³) artmışdır. Nəzərə alsaq ki, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin sıxlığı 0.03q/sm^3 – dur, o zaman asanlıqla vahid kütlədə olan paramaqnit mərkəzlərin sayını

Irradiation time (hour)

Şəkil 6.3.5 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində mövcud paramaqnit mərkəzlərin neytronlarla şüalanma müddətindən asılılıqları.

Şəkildən görüldüyü kimi, neytron selin təsir müddətinin artması ilə paramaqnit mərkəzlərin sayı ümumi tendensiyada artır. Bu artıma bir neçə faktor təsir göstərə bilər. İlkin yanaşmada neytronlarla şüalanma zamanı nümunə daxilində yaranan əlavə yükləyicilər artıma səbəb ola bilər. digər tərəfdən neytronlarla şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC daxilində əlavə aşqar elementlər yaranır. Bu elementlərin konsentrasiyasının artması və paramaqnit təbiətli olması artmaya digər səbəb ola bilər. Neytronla şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində əlavə ^{29}Si və ya ^{13}C izotopları yaranır. Belə olan halda, tibbi ^{29}Si (4.67%) və ^{13}C (1.11%) izotoplarının konsentrasiyası artır. Bu izotopların konsentrasiyasının artması birbaşa paramaqnit mərkəzlərin artmasına səbəb olur [32, s.1470; 35, s.2226; 36,

hesablama bilerik. Bu zaman alda olunan qiymatlara uyğun asılılıq **şekil 6.3.5** – da gösterilmiştir.



s.165206; 45, s.015502; 55, s.4890; 56, s.255; 63, s.2953; 131, s.965; 132, s.1299; 236, 298, s.891]. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində mövcud ^{29}Si və ya ^{13}C izotoplarının nüvələri $\frac{1}{2}$ spininə malikdirlər. Bu izotoplar Zeeyman və ya hiper (hypertine interactions - HF) qarşılıqlı təsirdə olduqları zaman yaranan paramaqnit mərkəzlər aşağıdakı Hamilton bərabərliyi ilə xarakterizə oluna bilər:

$$H_s = \beta H \tilde{g} S + \tilde{S} A I \quad (6.12)$$

Tənlikdə ilkin hədd H_s – ^{29}Si və ya ^{13}C ($I = 1/2$) nüvələrində Zeeyman və ya HF qarşılıqlı təsirini xarakterizə edir. Spinin $S = \frac{1}{2}$ olması silisium və ya karbon atomlarında və ya SiC qəfəsində sürüşmüş rabitələrdə (dangling bonds) elektron defektlərin, cütləşməmiş elektron və ya deşiklərin, lokal halların yaranmasına səbəb olur [32, s.1473; 35, s.2219; 36, s.165206; 45, s.015502; 55, s.4887; 56, s.259; 63, s.2953; 131, s.965; 132, s.1299; 236, 298, s.892]. Eyni zamanda, neytronlarla şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində Si və ya C vakansiyaları da yeni paramaqnit mərkəzlərin yaranmasına səbəb ola bilər. Neytronlarla şüalanma zamanı nanomaterialda silisiumla əlaqəli Frenkel cütləri yaranır [63, s.2950; 236, s.125207]. Yaranmış Si vakansiyası (v_s^-) $S = 3/2$ spininə malik mənfi yüklə izolə olunur [236, s.125207]. Bu halda anizotropik HF strukturu dörd qonşu karbon atomu ilə (ilkin təbəqə) və bunlar da növbəti izotropik HF strukturlu 12 silisium atomları (ikinci təbəqə) ilə EPR spektrləri verir. Ddigər tərəfdə neytronlarla şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC nümunəsində müsbət yüklə izolə olunmuş karbon vakansiyası (v_c^+) da yaranır. Neytronlarla şüalanma zamanı C vakansiyası (v_c^+) Si vakansiyasına (v_s^-) nisbətən daha çox müşahidə olunur [236, s.125207]. EPR spektrlərində xarakteristik v_c mərkəzləri, ikinci təbəqədə (Si vakansiyasında (v_s^-) olduğu kimi) mövcud HF strukturlu 12 karbon atomları təstiqləyir.

6.4 Təcrübi nəticələrin müzakirəsi

Aparılan tədqiqatlar nəticəsində məlum olmuşdur ki, neytron selinin təsiri

nəticəsində nanokristallik 3C-SiC – də yaranan aşqar elementlərin konsentrasiyasının artması dielektrik nüfuzluğunu artırır. 3C-SiC nanohissəciklərinin aralıq səthdə (nanoparticles interfaces) polyarlaşması dispersiya hallarının yaranmasına səbəb olur. Eksperimentlər nəticəsində müşahidə olunan bütün əyriilər Havriliak–Negami (HN) fenomenoloji tənliklərinə uyğun (according to the Havriliak–Negami (HN) phenomenological equation) izah edilmişdir. Müşahidə olunan relaksasiya müddətinə əsasən 3C-SiC nanomaterialında ionik polyarlaşmanın dominant olması tapılmışdır.

Nüvə çevirmələri zamanı yaranmış aşqar elementlərin kombinasiyası, nanokristallik 3C-SiC – in dielektrik nüfuzluğunun dəyişməsinə səbəb olur. Bundan əlavə, neytron selinin təsiri ilə nanomaterial daxilində rabitə sürüşməsi (dangling bonds), defekt və ya əlavə yükdaşıyıcıların yaranması 3C-SiC – in dielektrik nüfuzluğunun ədədi qiymətini artırır. Bu artma yüksək tezliklər oblastlarında daha kəskin müşahidə olunur. Digər tərəfdən temperaturun təsiri ilə ümumi tendensiyada məxsusi və neytron selinin təsiri nəticəsində yaranmış yükdaşıyıcılar daha aktiv polyarlaşır. Bunun nəticəsində, temperaturun təsiri ilə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələri artır. Müxtəlif tezliklərdə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin temperatur asılılıqlarından məlum olmuşdur ki, tezliyin artması ilə dielektrik nüfuzluğunun temperaturdan asılılığı azalır. Aparılan tədqiqatlardan məlum olmuşdur ki, aşağı tezliklərdə temperaturun $T > 350K$ intervalında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsində kəskin artma mövcuddur.

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində g faktorun 2.006 qiymətində güclü siqnal müşahidə edilmişdir. Neytronlarla şüalanmadan sonra mövcud siqnal intensivliyində artma və yeni siqnallar müşahidə olunmuşdur. Neytronlarla şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC – də əlavə ^{29}Si və ya ^{13}C izotoplarının yaranması aşqar olunmuşdur. Eyni zamanda neytronlarla şüalanma anizotropik və izotropik HF strukturlu Si (ν_a^-) və C (ν_c^-) vakansiyalarının yaranmasına səbəb olur. Yaranmış yeni izotopların, ν_a^- və ν_c^- vakansiyaların konsentrasiyasının artması yeni paramaqnit mərkəzlərin yaranmasına səbəb olmuşdur. Belə ki, neytronlarla şüalanmadan sonra g – faktorun fərqli qiymətlərində paramaqnit mərkəzlərin ümumi sayı 1.5×10^{20} mərkəz/q – dan 2.7×10^{20} mərkəz/q qədər artır (təqribən iki dəfə). Başqa sözlə,

şüalanma nəticəsində ümumi 3.5×10^{18} mərkəz/sm³ qədər ümumi mərkəz yaranır. Həmçinin, neytronlarla şüalanma müddətinin artması sərbəst elektronlara uyğun mərkəzlərin (g – faktorun 2.006 qiymətində) sayının da təqribən iki dəfəyə qədər artmasına səbəb olur (1.03×10^{18} mərkəz/q – dan 1.9×10^{18} mərkəz/q qədər və ya 2.7 mərkəz/sm³ qədər yeni mərkəz yaranır).

Apaılan tədqiqatlardan məlum olmuşdur ki, 3C-SiC nanokristallarında tezliyin artması ilə, dielektrik itkiləri ümumi yanaşmada azalır. Aşağı tezliklərdə dielektrik itkilərinin ədədi qiymətinin çox olması tələlərdə mövcud yükdaşıyıcıların polyarizasiyası (polarization of the trapped charge carriers) ilə əlaqələndirilmişdir. Eyni zamanda, $f(\tan\delta) \sim f(f)$ asılılığında tezliyin müəyyən qiymətlərində “əyilmə” halları mövcuddur. Bu “əyilmə” halları temperaturun artması ilə tezliyin artması istiqamətində sürüşür ki, bunu da temperaturun təsiri ilə daha çox polyarlaşma ilə izah etmək olar. $f(\tan\delta) \sim f(T)$ asılılıqlarında ümumi yanaşmada temperaturun artması ilə dielektrik itkilərinin artması müşahidə olunur. Məlum olmuşdur ki, dielektrik itkilərinin temperatur ilə mütənəsib olaraq artması defektlər, orientasiya və ya dipol polyarizasiya ilə əlaqəlidir. Lakin, aşağı tezliklərdə $350K < T < 400K$ intervalında temperaturun artması ilə dielektrik itkiləri azalır. 3C-SiC nanokristallarında bu azalma metal-yarımkeçirici keçidi ilə əlaqəli ola bilər. Ümumiyyətlə, hər iki asılılıqda ($f(\tan\delta) \sim f(f)$ və $f(\tan\delta) \sim f(T)$ asılılıqları) neytronlara şüalanmadan sonra dielektrik itkilərində artma açıq aydın müşahidə olunur. Bu isə adətən, neytron çevrilmələri, rabitə sürüşməsi (dangling bonds), defekt və ya əlavə yükdaşıyıcıların yaranması ilə izah edilir.

VII FƏSİL

NEYTRON SELİNİN NANOKRİSTALLİK 3C-SiC

HİSSƏCİKLƏRİNİN TERMİK XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ

Bu fəsildə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin termik xassələri fərqli sürətlərlə isitmədə, neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli nəzərdən keçirilmişdir. Şüalanmadan öncə silisium karbid nanohissəciklərinin termik analizləri 300÷1270K temperatur intervalında, 5, 10, 15 və 20 K/dəq termik işlənmə sürətlərində DSC, DTG, DTA və TGA metodları ilə aparılmışdır. Fərqli isitmə sürətlərindən mümkün termik effektlərin kinetik parametrləri (istilik axını, oksidləşmə reaksiya sürəti və aktivləşmə enerjisi) hesablanmışdır. Eyni zamanda fərqli termik işlənmə sürətlərində xüsusi istilik tutumu və Gibbs enerjisi təyin olunmuşdur. Aparılan analizlərdən optimal termik işlənmə sürəti təyin edilmiş və məhz bu sürətdə neytron seli ilə şüalanmadan sonra analizlər müqayisəli aparılmışdır. Neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra təcrübi nəticələrə əsasən nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin xüsusi istilik tutumu, istilik axını, oksidləşmə reaksiya sürəti, aktivləşmə enerjisi, Gibbs enerjisi entalpiya və entropiyası hesablanmışdır. Bu fəsildə neytron selinin nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin termik xassələrinə təsiri nəzərdən keçirilmişdir. Kubik modifikasiyalı nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin termik işlənmə sürətindən aslı olaraq DSC (Differential Scanning Calorimetry), TGA (Thermogravimetric Analysis) və DTG (Differential Thermogravimetric Analysis) analizləri aparılmışdır. 99,5+ % təmizlik dərəcəsinə malik silisium karbid nanohissəciklərinin 300÷1270K temperatur intervalında, 5, 10, 15 və 20 K/dəq termik işlənmə sürətləri ilə yaranan termik effektlərin kinetik parametrləri (istilik axını, oksidləşmə reaksiya sürəti və aktivləşmə enerjisi) təyin olunmuşdur. Fərqli termik işlənmə sürətlərində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin aktivləşmə enerjiləri Arenius yanaşması ilə hesablanmışdır. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin oksidləşmə dərəcəsi temperaturun 1270K qiymətinə qədər

öyrənilmişdir. Əlavə olaraq, silisium karbid nanohissəciklərinin 300÷1270K temperatur intervalında, 5, 10, 15 və 20 K/dəq termik işlənmə sürətlərində xüsusi istilik tutumu və Gibbs enerjisi təyin olunmuşdur. Fərqli termik işlənmə sürətlərində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərindən təşkil olunmuş sistemin entalpiya və entropiyası hesablanmışdır (nəzəri hesablamalar təcrübi nəticələr ilə əsaslandırılmışdır). Təcrübi nəticələrdən alınmış qiymətlər bütün termofiziki parametrlər üçün fərqli termik işlənmə sürətlərində müqayisəli öyrənilmişdir. Eyuni zamanda TRIGA Mark II tipli tədqiqat nüvə reaktorunda 5 saata qədər neytron seli (2×10^{13} n/sm²san) ilə şüalandırılmış nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin DSC, TGA və DTG analizləri aparılmışdır. Neytron seli ilə modifikasiya olunmuş nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin oksidləşmə dərəcəsi temperaturun 300K<T<1300K intervalında öyrənilmişdir. Şüalanmadan öncə və sonra TGA və DSC əyriələrində bəzi effektlər müşahidə edilmiş və izahi verilmişdir. Məlum olmuşdur ki, neytron seli istilik mübadiləsi zamanı ədədi qiymətin dəyişməsinə səbəb olur. Əlavə olaraq, neytron selinin təsiri nəticəsində oksidləşmə prosesi nisbətən ləng getməsi göstərilmişdir. Xüsusi istilik tutumunun ədədi qiymətinin 3C-SiC nanokristalları üçün xarakterik ($500 \div 750$ C·kq⁻¹K⁻¹) qiyməti müəyyən edilmişdir.

7.1 Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin termik parametrlərinin DSC metodu ilə tədqiqi

Termoqravimetrik analiz (Thermogravimetric Analysis – TGA) bir çox birləşmələrin termik deqradasiya və istilik sabitliyini araşdırmaq üçün geniş istifadə olunur [189, s.4456; 192, s.147; 265, s.165; 275, s.278; 315, s.725]. TGA – nın bir neçə tətbiq sahələri vardır ki, bunlardan da kinetik parametrlərin, oksidləşmə və parçalanma reaksiyaları, aktivləşmə enerjisinin müəyyən edilməsi və s. göstərmək olar. TG analizində, reaksiya dərəcəsi (X) deqradasiya prosesinə müvafiq olan tam çəki itirilməsinin faktiki çəki itirilməsinə nisbəti kimi müəyyən edilə bilər [10, s.177; 265, s.165]:

$$X = \frac{W_0 - W_t}{W_0 - W_\infty} \quad (7.1)$$

burada, W_0 nümunənin ilkin çəkisi, W_t nümunənin faktiki çəkisi, W_∞ nümunənin son çəkisi və X isə hissələrə ayrılma dərəcəsidir. Kinetik prosesin tipik modeli temperatur və kütlənin funksiyası kimi X – in temperatura (zaman) nəzərən xüsusi törəməsidir (dX/dt). Bunu nəzərə alsaq hissələrə parçalanma dərəcəsi aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$\frac{dX}{dt} = kf(X) \quad (7.2)$$

burada, dX/dt hissələrə parçalanma dərəcəsi, k parçalanma sabiti və $f(X)$ kinetik funksiya modelinin diferensial ifadəsidir. Buna baxmayaraq, parçalanma sabiti k , həmçinin Arrhenius tərəfindən aşağıdakı kimi ifadə edilmişdir:

$$k = A \cdot e^{-\frac{E}{RT}} \quad (7.3)$$

burada, A pre – exponential faktor (s^{-1}), E deqradasiya reaksiyalarında aktivasiya enerjisi (kJ/mol), R universal qaz sabiti (8,314C/mol·K), T isə mütləq temperaturdur (K). (7.2) və (7.3) tənliklərinin kombinasiyasından növbəti tənliyi alırıq:

$$\frac{dX}{dt} = A \cdot e^{-\frac{E}{RT}} f(X) \quad (7.4)$$

TG analizdə, nümunənin temperatur dəyişməsi istilik dərəcəsi sabiti β ($\beta = dT/dt$) ilə (7.4) tənliyindən aşağıdakı kimi təyin edilə bilər:

$$\frac{dX}{dT} = \frac{A}{\beta} \cdot e^{-\frac{E}{RT}} f(X) \quad (7.5)$$

Buna görə də, kinetik parametrləri müəyyən etmək üçün əsas TG məlumatları

(7.5) münasibətindən təyin etmək olar. Aktivləşmə enerjisini bir neçə metod ilə hesablamaq olar ki, bunlardan da əsasən konversiya ölçmələrinin dərəcəsini (X) və istilik dərəcəsi sabitini (β) göstərmək olar. Beləliklə, kinetik parametrlərin deqradasiyası TG analizi məlumatlarına əsasən asanlıqla hesablanıla bilər. Aktivləşmə enerjisini fərqli temperatur nisbətlərində TGA məlumatlarına əsasən təyin etmək üçün bir neçə fərqli metodlar vardır ki, bunlara da, Ozava, Kissinger, Van Krevelen, Coatse – Redfem və s. tədqiqatçıların işlərində rast gəlmək olar [275, s.273].

Flynn – Vall – Ozavan metodu: Reaksiya qaydalarını və TGA – nın bəzi diferensial məlumatlarını bilmədən Flynn – Vall – Ozavan metodu ilə aktivasiya enerjisini hesablamaq mümkündür [253, s.310]. İlkin T_0 temperaturunun (7.5) tənliyinə inteqrasiyası, məlum dərəcədə X_0 konversiyası, pik temperatur T_p və $X = X_p$ olarsa, aşağıdakı bərabərliyi yazıla bilər:

$$g(X) = \int_{x_0}^{x_p} \frac{dX}{f(X)} = \frac{A}{\beta} \int_{T_0}^{T_p} e^{-\frac{E}{RT}} dT \quad (7.6)$$

burada, $g(X)$ konversiyanın inteqral funksiyasıdır. $x = E/RT$ kimi qəbul etsək, (7.6) tənliyini aşağıdakı kimi yazıla bilər:

$$\frac{A}{\beta} \int_{T_0}^{T_p} e^{-\frac{E}{RT}} dT = \frac{AE}{\beta R} p(x) \quad (7.7)$$

Ozavan metodu adətən Doyle yaxınlaşmasına əsaslanır. $\log p(x) \approx 2,315 - 0,457x$ və ya $\ln p(x) \approx 5,330 - 1,052x$. $20 < x < 60$ şərti daxilində (7.7) tənliyini aşağıdakı kimi yazıla bilər:

$$\log \beta = \log \frac{AE}{g(X)R} - 2,315 - \frac{0,4567 E}{RT} \quad (7.8)$$

burada, A və R sabit və $g(X)$ isə spesifik çevrilmə üçün sabitdir. Beləliklə, E qiyməti

istənilən hissələrə bölünən spesifik hal üçün xətti asılılıqdan kənar çıxma ($\log \beta$) və fərqli istilik nisbətlərində ($1/T$) reaksiya şərtləri bilinmədən Ozavan üsulu ilə hesablanı bilər.

Ozavan metodundan istifadə edərək aktivasiya enerjisini təyin edərkən, bir neçə TGA əyrisi və müxtəlif qızma dərəcələri (β) mühüm parametrlərdir. Təqdim olunan işdə, dörd fərqli qızma temperaturunda ($\beta = 5^\circ\text{S/dəq.}, 10^\circ\text{S/dəq.}, 15^\circ\text{S/dəq.}$ və 20°S/dəq.) nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri nəzərdən keçirilmişdir.

Termodinamik proseslərdə temperaturun artması ilə sistemi təşkil edən molekulların hərəkət tezliyi artır. Molekulların tezliyinin artması qaz, maye və bərk halda olan bütün növ maddələr üçün doğrudur. Molekulların kinetik enerjisi onların sürəti ilə düz mütənasibdir, temperaturun artması kinetik enerjinin artmasıdır. Termik halda daha çox molekul böyük kinetik enerjiyə malik olacaq və enerji baryeri yüksək olan molekullar fraksiyası yaranacaqdır. Fraksiya payı yüksək olan molekulların enerji aktivləşmə enerjisinə E_a bərabər və yaxud ondan böyükdür [10, s.179; 30, c.2, s.44; 89, s.293]. Aktivləşmə enerjisini təyin etmək üçün digər yanaşma Arenius yanaşmasıdır. Arenius tənliyindən istifadə edərək E_a aktivləşmə enerjisi təyin olunur.

$$\kappa = Z \exp \left(- \frac{E_a}{RT} \right) \quad (7.9)$$

(7.9) tənliyində κ -kimyəvi reaksiyanın sürəti, Z pre-exponential factor və ya Arenius tənliyinin A faktoru adlanır. A faktoru temperaturdan empirik olaraq aslıdır və kimyəvi reaksiyanın sürət əmsaləddir. A faktoru eksperimental təcrübə ilə təyin olunur və sistemdə termik işlənmə zamanı vahid zamanda toqquşan molekulların sayını təyin edir. Birinci tərtib reaksiyalar üçün vahidi ($1/\text{saniyə}$) dir. E_a -reaksiyanın aktivləşmə enerjisi, R -universal qaz sabiti və T - Kelvin ilə mütləq temperaturdur. Termik prosesdə

$$\ln \kappa_1 = - \frac{E_a}{RT_1} + \ln Z \quad (7.10)$$

və

$$\ln \kappa_2 = -\frac{E_a}{RT_2} + \ln Z \quad (7.11)$$

($\ln \kappa_2 - \ln \kappa_1$) fərqini hesablasaq onda

$$\ln \kappa_2 - \ln \kappa_1 = \left(-\frac{E_a}{RT_1} + \ln Z \right) - \left(-\frac{E_a}{RT_2} + \ln Z \right) \quad (7.12)$$

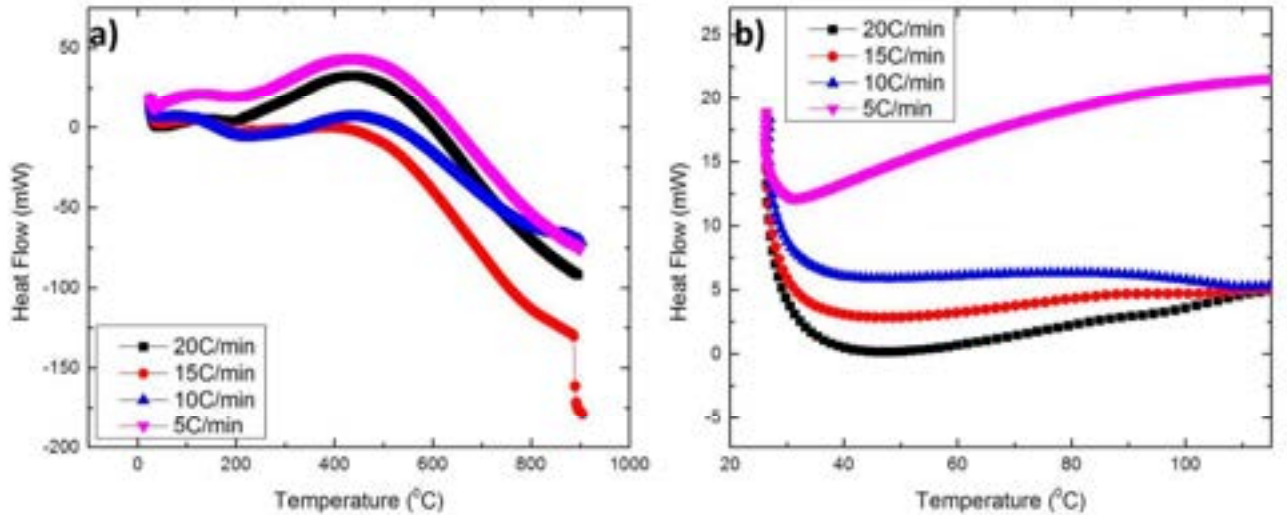
$$\ln \frac{\kappa_1}{\kappa_2} = \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \left(\frac{E_a}{R} \right) \quad (7.13)$$

$$E_a = \ln \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \cdot \frac{R}{\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)} \quad (7.14)$$

həmin prosesin aktivləşmə enerjisi (7.14) ifadəsi şəklində veriləcəkdir.

Fərqli termik sürətlərlə işlənmiş nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin istilik selinin temperaturdan asılılıq (DSC) spektri **şəkil 7.1.1**-də verilmişdir. İstilik axımının temperatur asılılığında geniş temperatur (25 – 1000⁰S) oblastında xaotiklik müşahidə olunur (**Şəkil 7.1.1a**). Lakin seçilmiş aşağı temperatur oblastında (25 – 115⁰S – yə qədər) qızdırılma dərəcəsi ilə mütanasiblik mövcuddur (**Şəkil 7.1.1b**). Şəkillərdən görüldüyü kimi, ümumi yanaşmada nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində baş verən termik prosesləri iki hissə ilə izah etmək olar. Hər iki hissədə atmosferdən adsorbsiya olunan suyun və ya digər aşqar elementlərin sistemdən çıxması müşahidə olunur. Birinci mərhələdə, proses temperaturun təqribən 110⁰S qiymətində yekulaşır (**Şəkil 7.1.1a**). Uyğun olaraq təqribən 110⁰S temperaturda digər proses başlayır. Məlumdur ki, nanomateriallar çox böyük xüsusi səth sahəsinə (Specific Surface Area - SSA) malikdirlər [10, s.180]. Məhz bu səbəbdən, bu tip

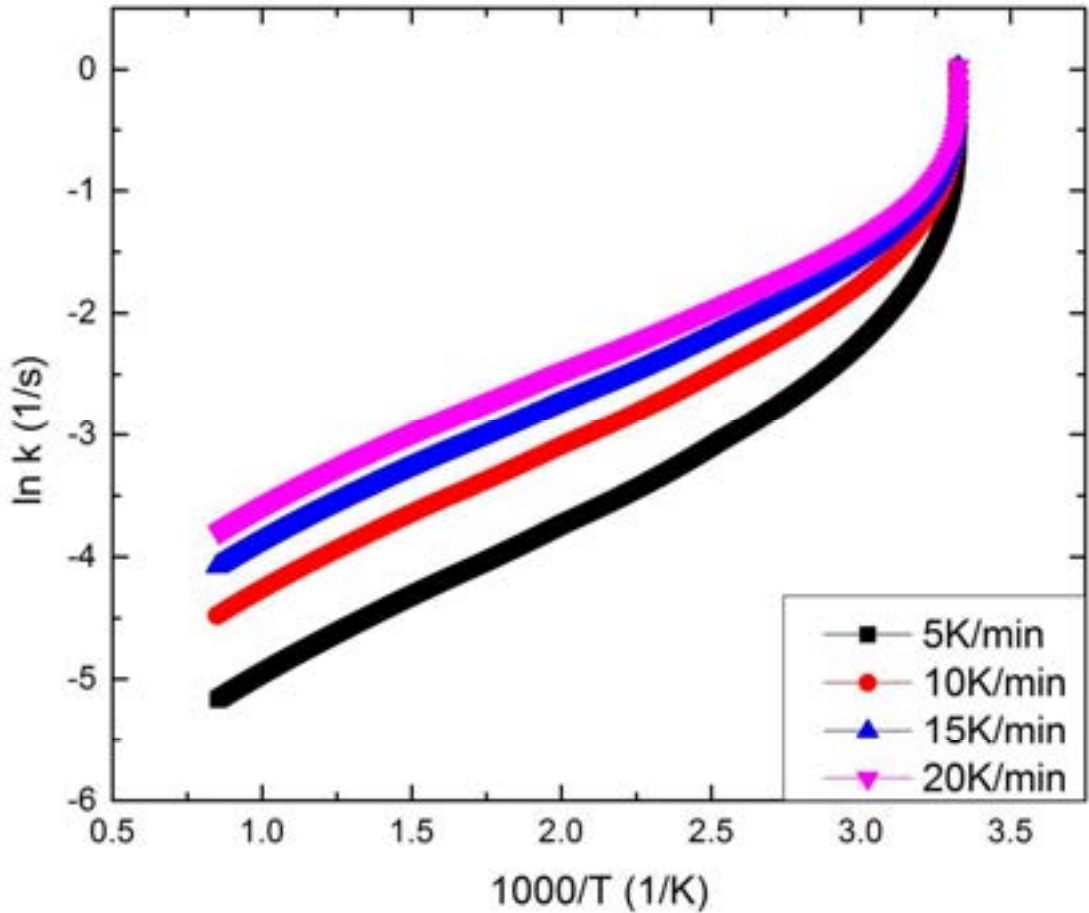
materiallar səthi aktiv olur və atmosferlə təmasdan dərhal su və ya digər birləşmələri nanohissəcik səthində asılı hala salırlar. Termik ayrılmanın müşahidəsindən belə nəticəyə gəlmək olar ki, ikinci prosədə temperaturun artması nəticəsində nanomaterialda mövcud asılı su və ya digər qatışıqlar sistemi tərk etməyə başlayır. Bu proses temperaturun təqribən 450 – 500⁰S qiymətinə qədər davam edir. Temperaturun 500⁰S qiymətindən 1000⁰S qiymətinə qədər nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin termik spektrlərində demək olar ki, dəyişiklik yoxdur. Şəkillərədən görüldüyü kimi, termik işlənmə sürətinin artması ilə nümunəni tərk edən aşqar elementlərin sistemdən çıxma tezliyi azalır. Bu prosesi **şəkil 7.1.1b** – də daha asanlıqla müşahidə etmək mümkündür.



Şəkil 7.1.1 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fərqli termik işlənmə sürətlərində istilik selinin temperatur asılılıqları (a geniş aralıqda, b seçilmiş aralıqda).

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fərqli termik işlənmə sürətlərində aktivləşmə enerjisini Arenius yanaşması ilə hesablamaq üçün $\ln k - 1000/T$ asılılıqları **şəkil 7.1.2** – də verilmişdir. Qeyd edək ki, Arenius yanaşmasına əsasən qurulmuş $\ln k - 1000/T$ asılılıqlarında ayrılmanın xətti hissəsinin $1000/T$ xətti ilə əmələ gətirdiyi bucağın tangensi birbaşa aktivləşmə enerjisini ifadə edir. Hesablanmış aktivləşmə enerjilərinin müqayisəsindən görünür ki, termik işlənmə sürətinin

artırılması aktivləşmə enerjisinin azalmasına səbəb olur. Fiziki olaraq bunu belə izah etmək olar ki, daha çox sürətlə qızdırılma zamanı prosesdə iştirak edən hissəciklərin sayı azalır. Bu isə öz növbəsində aktivləşmə enerjisinin azalmasına səbəb olur. Temperaturun kiçik qiymətlərində ($1000/T > 3.1$) müşahidə olunan kənarçıxmalar, hesab olunur ki, nanomaterial daxilində adsorbsiya olunan olan əlavə su və ya digər qatışıqlarla əlaqəlidir.



Şəkil 7.1.2 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fərqli termik işlənmə sürətlərində $\ln k - 1000/T$ asılılıqları.

Arenius yavaşması ilə hesablanmış aktivləşmə enerjisi cədvəl 1 də təsvir edilmişdir. Termik işlənmə sürətinin artması ilə aktivləşmə enerjisinin ədədi qiyməsinin azalması cədvəldən aydın müşahidə edilir. Temperaturun $300K < T < 325K$ qiymətəri aralığında aktivləşmə enerjisinin hesablanmış ədədi qiyməti təqribən 680 – 870 kJ/mol aralığında dəyişir deyə bu qiymət reallıqdan kənardır. Alınmış bu nəticələri cihaz xətası və ya nümunə daxilində olan əlavə adsorbatlarla

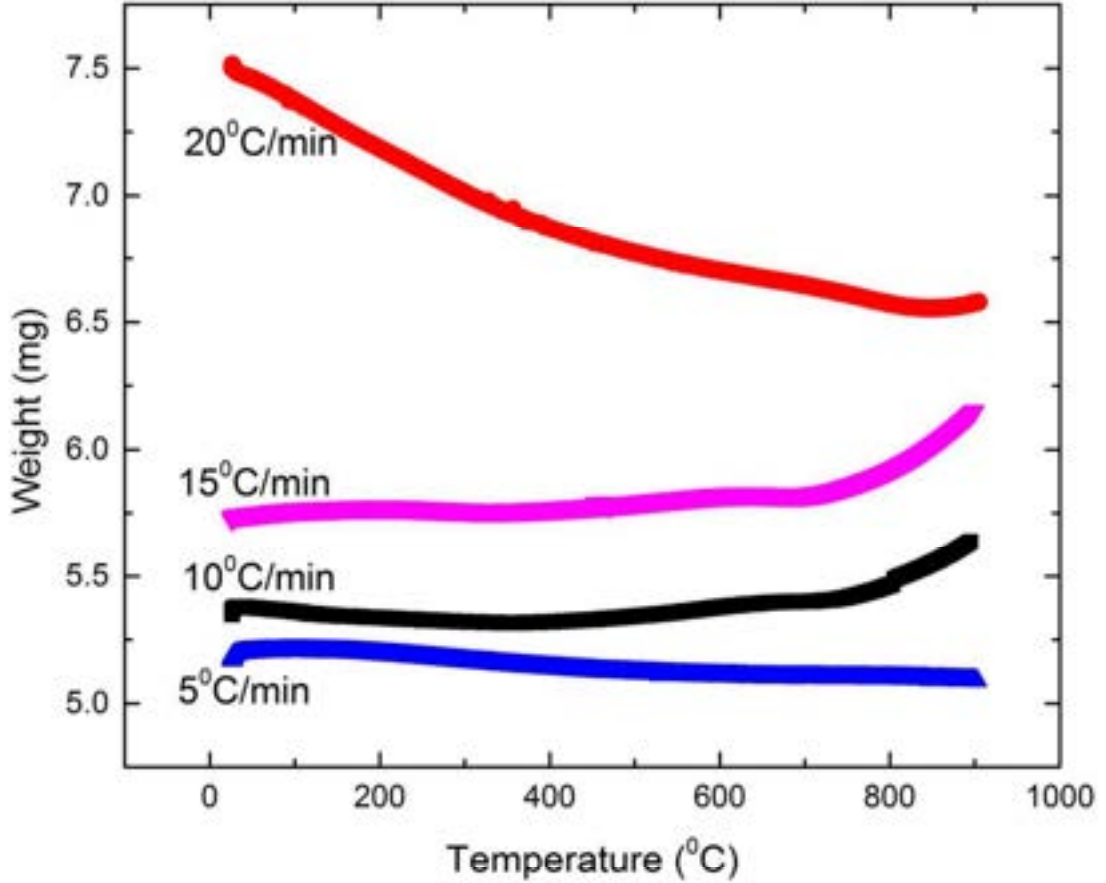
əlaqələndirmək olar. Cədvəldə həmçinin temperaturun $325\text{K} < T < 1270\text{K}$ qiymətlərində baş verən effektlərin enerjisi cihazın proqram təminatının köməyi ilə hesablanmışdır.

Cədvəl 7.1.1 Müxtəlif termik sürətlərdə işlənmiş nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin aktivləşmə və baş verən digər effektlərinin enerjiləri

325K < T < 1270K		
Termik işlənmə sürəti, (K/min)	Effektin enerjisi, A (mJ)	Aktivləşmə enerjisi, ΔE (kJ/mol)
5	$1.7 \cdot 10^5$	127.42
10	$9.4 \cdot 10^4$	124.03
15	$8.6 \cdot 10^4$	116.21
20	$7.7 \cdot 10^4$	108.27

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fərqli termik işlənmə sürətlərində kütləsinin temperaturundan asılı olaraq dəyişmə asılılıqları **şəkil 7.1.3** – də təsvir edilmişdir. Şəkildən görüldüyü kimi, temperaturun artması ilə ümumi yanaşmada kütlədə çox az dəyişmə müşahidə olunur. İlk öncə qeyd etmək lazımdır ki, aparılan eksperimentlərdən alınan nəticələr başlanğıc kütlənin ədədi qiymətindən asılı deyil və başlanğıc kütlənin fərqli olması tam texniki xarakterlidir ki, bu da heç bir fiziki məna kəsb etmir. Temperaturun təqribən $T < 800^{\circ}\text{S}$ qiymətində az miqdarda azalma müşahidə olunur ki, bunu da nümunə daxilinə adsorbsiya olunmuş əlavə qatışıqlarla izah etmək olar. Lakin temperaturun təqribən $T > 800^{\circ}\text{S}$ qiymətindən başlayaraq kütlədə az miqdarda artma müşahidə olunur. Bunun isə səbəbi oksidləşmə ola bilər, lakin bunu təstiqləmək üçün daha çox analitik işlərə ehtiyac vardır. “Pyris Manger” proqram təminatının köməyi ilə oksidləşmə dərəcəsinin temperatur asılılığı çıxarılmışdır. Məlum olmuşdur ki, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində temperaturun 1270 K qiymətinə qədər oksidləşmə çox azdır. Xüsusən temperaturun təqribən 1000K qiymətinə qədər oksidləşmə demək olar ki yoxdur. Lakin temperaturun 1000K – dən böyük qiymətlərində çox cüzi oksidləşmə müşahidə

olunur və praktik olaraq ümumi yanaşmada oksidləmə dərəcəsi sifira yaxındır. Bu isə bir daha bu tip materialların yüksək temperaturda oksidləşməyə dayanıqlı olmasını sübut edir.



Şəkil 7.1.3 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fərqli termik işlənmə sürətlərində kütləsinin temperaturundan asılı olaraq dəyişməsi

7.2 DTA, TGA və DTG metodları ilə nanokristallik silisium karbid

(3C-SiC) hissəciklərinin termofiziki parametrlərinin öyrənilməsi

Termal analizlər aparılan zaman sistemin halından asılı olaraq temperatur sabit sürətlə və ya müəyyən qədər fluktasiyalarla arta bilər. Real təcrübə halında adətən qurğuların proqram təminatında sabit termik işlənmə sürətinin verilməsinə baxmayaraq temperaturun artmasında az və ya çox dərəcədə fluktasiyalar müşahidə olunur. Belə olan halda, nümunə və qurğunun proqram temperaturu və digər fiziki parametrlərin qiymətlərində çox kiçik fərq yaranır. Belə ki, əgər qızdırıcıda istilik

axımını Φ_{FS} ilə işarə etsək, nümunədə zamandan asılı olaraq daxili proseslər səbəbindən mövcud istilik axımı $\Phi_{r(t)}$ olur və bu halda balanslaşmış istilik tutumu aşağıdakı formula ilə xarakterizə oluna bilər [9, s.49; 113, c.2, s.272]:

$$C_s = \frac{dT_s}{dt} = \Phi_{FS} - \Phi_r \quad (7.15)$$

Eqzotermik halda Φ_r müsbət, endotermik halda isə mənfi qiymətlər alır. Əgər $\Delta T = T_s - T_R$ olduğunu nəzərə alsaq, onda:

$$C_s \frac{dT_R}{dt} + C_s \frac{d\Delta T}{dt} = \Phi_{FS} - \Phi_r \quad (7.16)$$

alırıq. $\Phi_r = 0$ halı üçün aşağıdakı bərabərliyi alırıq:

$$C_s \frac{dT_R}{dt} = \Phi_{FS} \quad (7.17)$$

İki hal arasında fərq olarsa balanslaşdırılmış tənliyi aşağıdakı kimi yazıla bilər [113, c.2, s.273]:

$$\Phi_{FS} - \Phi_{FR} = (C_s - C_R) \frac{dT_R}{dt} + C_s \frac{d\Delta T}{dt} + \Phi_r \quad (7.18)$$

İstilik axımı dərəcələri Φ_{FS} və Φ_{FR} uyğun olaraq aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$\Phi_{FS} = \frac{(T_F - T_s)}{R_{FS}} \quad (7.19)$$

$$\Phi_{FR} = \frac{(T_F - T_R)}{R_{FR}} \quad (7.19a)$$

burada, R_{FR} və R_{FS} uyğun olaraq qızdırıcı və nümunə arasında istilik müqavimətidir.

Termal simmetrik hal üçün $R_{FR} = R_{FS} = R$ olur və aşağıdakı bərabərliyi alırıq:

$$\Phi_r = -\left[\frac{\Delta T}{R}\right] - (C_S - C_R) \frac{dT_R}{dt} - C_S \frac{d\Delta T}{dt} \quad (7.20)$$

Real təcrübələrdə nümunənin və proqram temperaturunun fərqli olduğunu nəzərə alaraq aşağıdakı bərabərliyi yaza bilərik:

$$T_{MS} = T_S - \tau_2 \cdot \frac{dT_{MS}}{dt} \quad (7.21)$$

burada, T_{MS} ölçü nöqtəsində temperatur, T_S nümunənin temperaturu, τ_2 nümunə və ölçü nöqtəsində temperaturlar arasında xarakteristik zaman sabitidir. Müqayisə (reference) nümunəsi üçün də anoloji yanaşma ilə aşağıdakı bərabərliyi yuaza bilərik:

$$T_{MR} = T_R - \tau_2 \cdot \frac{dT_{MR}}{dt} \quad (7.22)$$

Qeyd edək ki, (7.21) və (7.22) bərabərliklərində qeyd olunan τ_2 parametri hər iki nümunə üçün eynidir. (7.21) və (7.22) bərabərliklərində aşağıdakı fərq bərabərliyini alırıq:

$$\Delta T_{SR} = T_S - T_R = T_{MS} - T_{MR} + \tau_2 \left[\frac{dT_{MS}}{dt} - \frac{dT_{MR}}{dt} \right] = \Delta T_M + \tau_2 \frac{d\Delta T_M}{dt} \quad (7.23)$$

burada, $\Delta T_M = T_{MS} - T_{MR}$ ölçmə zamanı yaranan temperatur fərqi. Son tənlikləri və

effektiv termal müqavimətin R olduğunu nəzərə alsaq istilik axımı üçün aşağıdakı bərabərliyi alırıq [113, c.2, s.277]:

$$\Phi_r(t) = -\frac{1}{R} \left[\Delta T_M + R(C_s - C_R)\beta + \tau_1 \frac{d\Delta T_M}{dt} + \tau_1 \cdot \tau_2 \left(\frac{d^2 \Delta T_M}{dt^2} \right) \right] \quad (7.24)$$

burada, $\beta = \frac{dT}{dt}$ termik işlənmə sürəti, τ_1 və τ_2 isə uyğun olaraq qızdırıcı və nümunənin ölçü nöqtələrində temperaturlar arasında xarakteristik zaman sabitidir. Nümunə daxilində fərqli hissələrdə (adətən bu hal laylı nümunələrdə müşahidə olunur) müxtəlif zaman intervallarında istilik axımını nəzərə alsaq, o zaman 7.24 tənliyini aşağıdakı kimi yazı bilərik:

$$\Phi_r(t) = -\frac{1}{R} \left[\Delta T + k_0 + k_1 \frac{d\Delta T}{dt} + k_2 \frac{d^2 \Delta T}{dt^2} + k_3 \frac{d^3 \Delta T}{dt^3} + \dots \right] \quad (7.25)$$

burada, k_i termal müqavimət və tutum arasındakı zaman sabitidir. Simmetrik halda ($R_{\lambda s} = R_{\lambda R} = R$, $C_{\lambda s} = C_{\lambda R} = C$) istilik axımı üçün aşağıdakı bərabərlik doğrudur [113, c.2, s.277]:

$$\begin{aligned} \Phi_r = & -\left(\frac{1}{R} + \frac{2}{R_{\lambda s t}} \right) \Delta T - \left\{ C - C_s \left[1 + R_{\lambda s} \left(\frac{1}{R} + \frac{2}{R_{\lambda s t}} \right) \right] \right\} \frac{dT}{dt} - \\ & - R_{\lambda s} \cdot C \cdot C_s \frac{d^2 \Delta T}{dt^2} (C_R - C_s) \frac{dT_R}{dt} + C_s \cdot C_R (R_{\lambda s} - R_{\lambda R}) \frac{d^2 T_R}{dt^2} \end{aligned} \quad (7.26)$$

$\beta = \frac{dT_R}{dt}$ olduğunu qəbul etsək kiçik xətalı yanaşma ilə inteqral şəklində (7.26)

tənliyini aşağıdakı kimi yazı bilərik:

$$\int_{t_1}^{t_2} \Phi_r dt = Q_r = \left(\frac{1}{R} + \frac{2}{R_{\text{int}}} \right) \left\{ \int_{t_1}^{t_2} \Delta T dt - \int_{t_1}^{t_2} \beta \frac{C_R - C_S}{\left[\frac{1}{R} + \frac{2}{R_{\text{int}}} \right]} dt \right\} = \left(\frac{1}{R} + \frac{2}{R_{\text{int}}} \right) \int_{t_1}^{t_2} (\Delta T - \Delta T_a) dt \quad (7.27)$$

burada, Q nümunədə t_1 və t_2 zaman aralıklarında mövcud istilik miqdarıdır. Klassik yanaşmada $dQ = c_p dT$ olduğunu nəzərə alsaq, onda sistemin xüsusi istilik tutumunu istilik axımına uyğun olaraq hesablaya bilərik [113, c.2, s.56; 280, s.1592]:

$$c_p = \frac{C_p}{m} = \frac{\frac{dQ_s}{dt}}{m \cdot \frac{dT}{dt}} = \frac{\Phi_s}{m \cdot \beta} = \frac{\Phi_m - \Phi_0}{m \cdot \beta} \quad (7.28)$$

(7.28) bərabərliyindən xüsusi istilik tutumunu təcrübi alınmış DSC əyrisində istilik axımına uyğun şəkildə asanlıqla hesablamaq mümkündür. Normal halda DSC spektrləri sabit təzyiqdə aparılır və təqdim olunan işdə istifadə olunan nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri bərk halda olduğundan ümumiyyətlə çox kiçik xəta ilə sabit təzyiq və ya həcm anlayışları aradan qalxmış olur. Belə olan halda ümumi şəkildə DSC spektrlərindən xüsusi istilik tutumunu aşağıdakı bərabərliklə hesablaya bilərik [9, s.51]:

$$c = \frac{\Phi}{m \cdot \beta} \quad (7.29)$$

burada, Φ DSC spektrlərində mövcud istilik axımı, β termik işlənmə sürəti, m nümunənin kütləsidir. Hesablanmış istilik tutumuna uyğun şəkildə verilmiş temperatur aralığında sistemin entalpiya və entropiyasını aşağıdakı bərabərliklərlə hesablaya bilərik [9, s.52; 280, s.1593]:

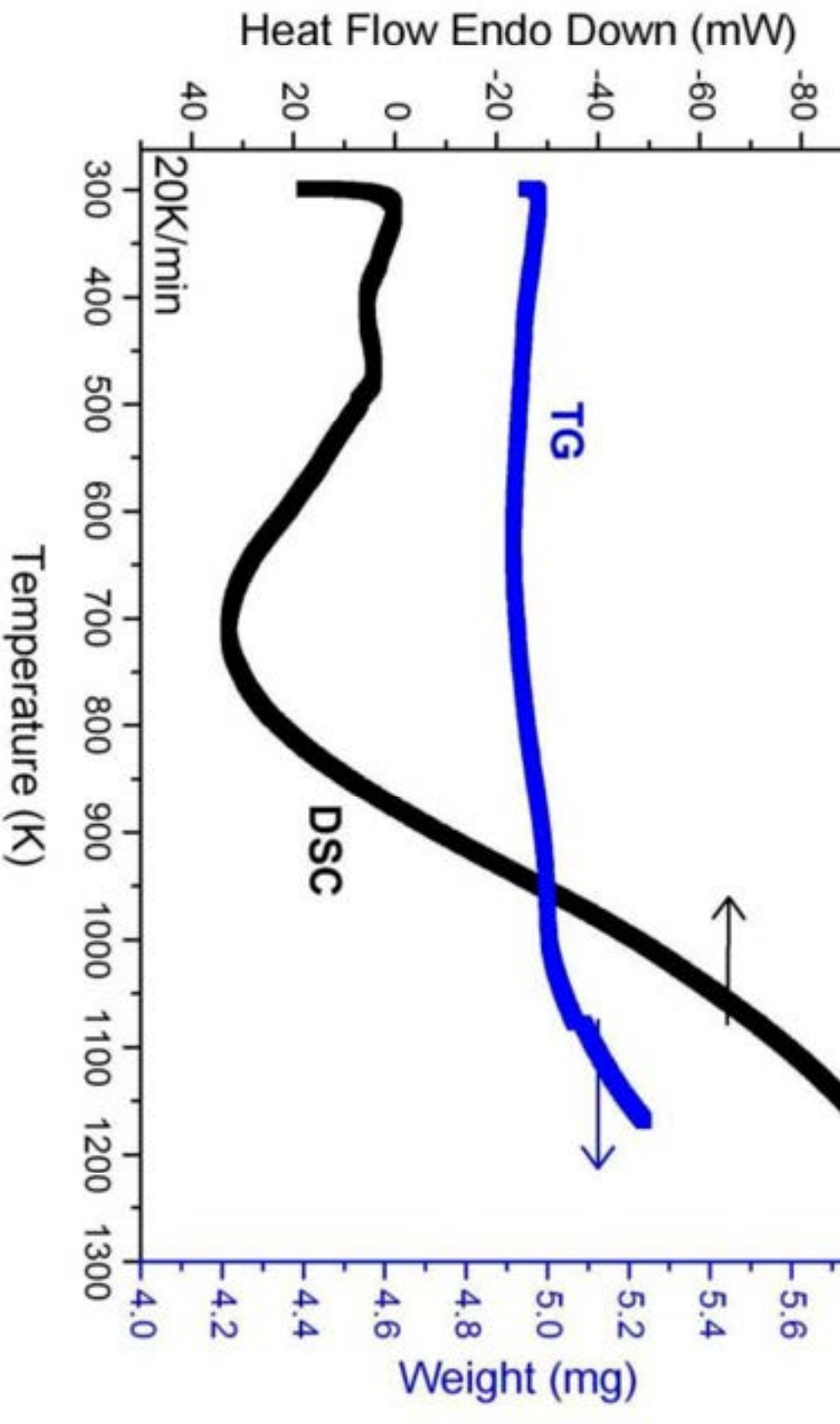
$$H = \int_0^T C dT \quad \text{və} \quad S = \int_0^T \frac{C}{T} dT \quad (7.30)$$

Hesablanmış entalpia və entropiyanın qiymətlərinə uyğun şəkildə sadə yanaşma ilə sistemin sərbəst Gibbs enerjisini hesablamaq olar:

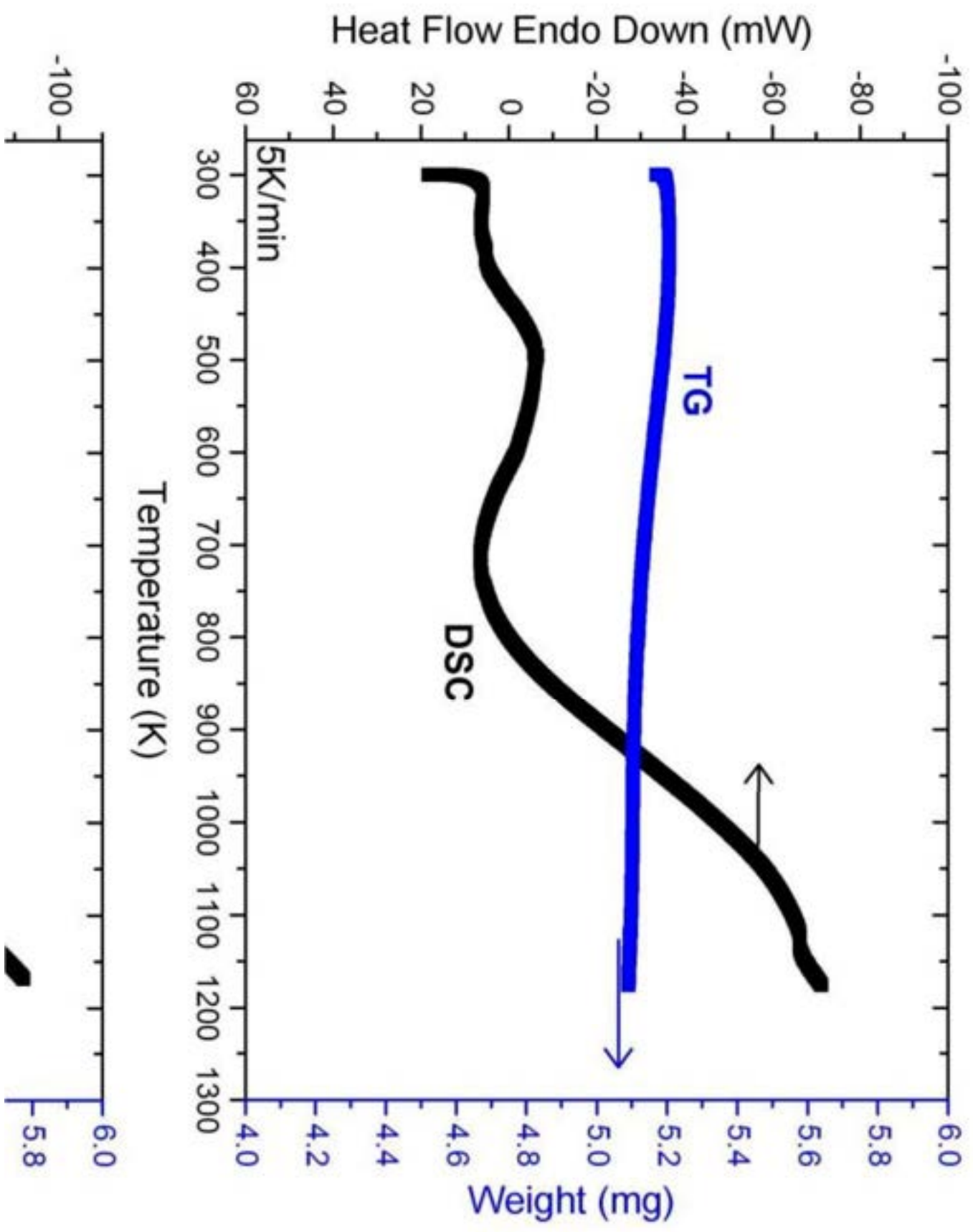
$$G = H - TS \quad (7.31)$$

Təqdim olunan işdə (7.29), (7.30), və (7.31) bərabərliklərdən istifadə olunaraq nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin xüsusi istilik tutumu, sərbəst Gibbs enerjisi, sistemin entalpia və entropiyası temperaturun fərqli qiymətlərində hesablanmışdır.

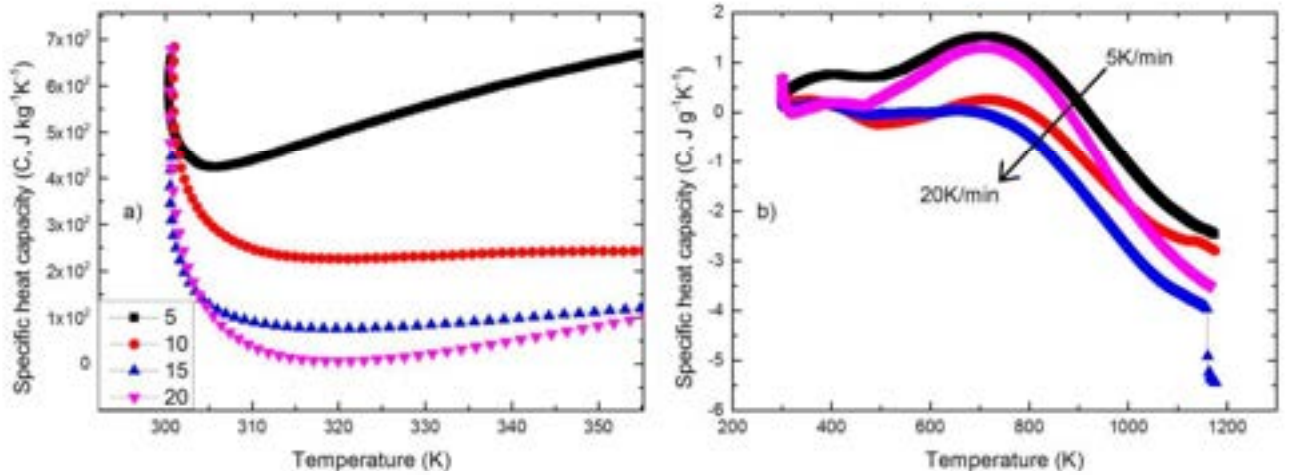
Təqdim olunan işdə nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri dörd fərqli isitmə sürətləri (5 K/dəq, 10 K/dəq, 15 K/dəq və 20K/dəq) ilə 300K – 1200K temperatur aralığında tədqiq olunmuşdur. Bütün termik işlənmə sürətlərində (5 K/dəq, 10 K/dəq, 15 K/dəq və 20K/dəq) nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin istilik tutumu, Gibbs enerjisi, sistemin entalpiya və entropiyası təcrübi nəticələrə əsaslanaraq nəzəri hesablanmışdır. **Şəkil 7.2.1**-də qısa olaraq 5 K/dəq və 20K/dəq termik işlənmə sürətlərinə uyğun spektrlər təsvir edilmişdir. İlkin yanaşmada spektrlərdən göründüyü kimi, atmosferdən adsorbsiya olunan suyun və ya digər aşqar elementlərin sistemdən çıxması müşahidə olunur. Məlumdur ki, nanomateriallar çox böyük xüsusi səth sahəsinə (Specific Surface Area - SSA) malikdirlər və bu tip materiallar səthi aktiv olur ki, bu da onların atmosferlə təmasından dərhal su və ya digər birləşmələri nanohissəcik səthində asılı hala salırlar. Aktiv səth ətraf mühütdən H₂O və OH qrupları ilə zəyif qarşılıqlı təsirdə xemosorbsiya olur. Temperaturun xətti artması zəyif qarşılıqlı təsiri parçalayır. Termik ayrılərin müşahidəsindən belə nəticəyə gəlmək olar ki, temperaturun artması nəticəsində nanomaterialda mövcud asılı su və ya digər qatışıqlar sistemi tərk etməyə başlayır. Bu proses temperaturun təqribən 450 – 500°S qiymətlərində bitir. Temperaturun 500⁰S qiymətindən 1000⁰S qiymətinə qədər nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin termik spektrlərində ilkin yanaşmada demək olar ki, dəyişiklik yoxdur.



Şakil 7.2.1 Nanokristallik 3C-SiC hissaciklerinin farklı termik işleme süratlerinde DSC ve TG spektrleri.



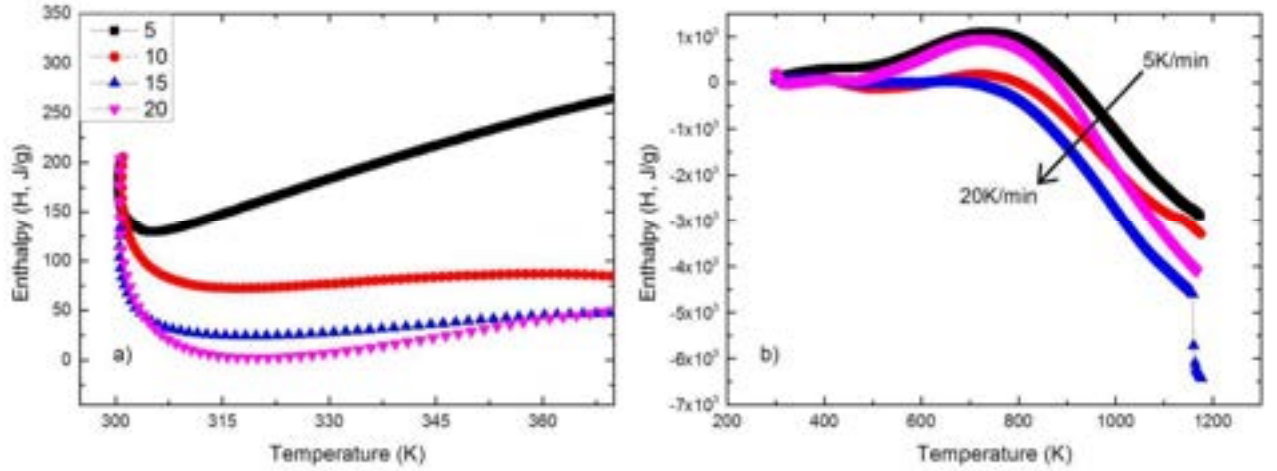
Fərqli termik işlənmə sürətlərində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin xüsusi istilik tutumunun temperaturdan asılılıq əyriləri **şəkil 7.2.2**-də verilmişdir. Xüsusi istilik tutumunun seçilmiş aşağı temperatur oblastında (300 K – 350 K temperatur aralığında) qızdırılma dərəcəsi ilə mütənasiblik mövcuddur (**Şəkil 7.2.2a**). Lakin, xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığında geniş temperatur (300K – 1200K) oblastında xaotiklik müşahidə olunur (**Şəkil 7.2.2b**). Xüsusi istilik tutumunun ədədi qiyməti aşağı temperatur oblastında SiC üçün xarakterik ($750 \text{ C} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) qiymət ətrafındadır. Lakin temperaturun artması ilə kəskin kənarçıxmalar mövcuddur. Temperaturun təqribən $T \geq 800 \text{K}$ qiymətlərində xüsusi istilik tutumunun ədədi qiyməti mənfi olur. Bu isə onu deməyə əsas verir ki, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində $T \geq 800 \text{K}$ temperaturlarda eksotermik effektlər müşahidə olunur. Belə ki, bu halda təcrübə aparılan cihazda nümunə olan qabın (pənin) temperaturu nümunənin temperaturundan aşağıdır. Digər tərəfdən xüsusi istilik tutumunun ədədi qiyməti temperaturun 300K-800K aralıqlarında müsbətdir və ya ümumi yanaşmada endotermik proseslərə uyğundur.



Şəkil 7.2.2 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fərqli termik işlənmə sürətlərində xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılıqları (a seçilmiş aralıqda, b geniş aralıqda).

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fərqli termik işlənmə sürətlərində entalpiyasının temperatur asılılıqları **şəkil 7.2.3**-də təsvir edilmişdir. Şəkildən görüldüyü kimi, entalpiyanın aşağı temperatur oblastında ədədi qiyməti termik

işlənmə sürətinə mütənasib olaraq azalır (Şəkil 7.6a). Temperaturun nisbətən böyük qiymətlərində, sistemin entalpiyasında istilik tutumuna anoloji olaraq xaotiklik mövcuddur. Lakin ümumi yanaşmada bütün temperatur oblastında termik işlənmə sürətinin artması ilə sistemin entalpiyası azalır (Şəkil 7.6b).

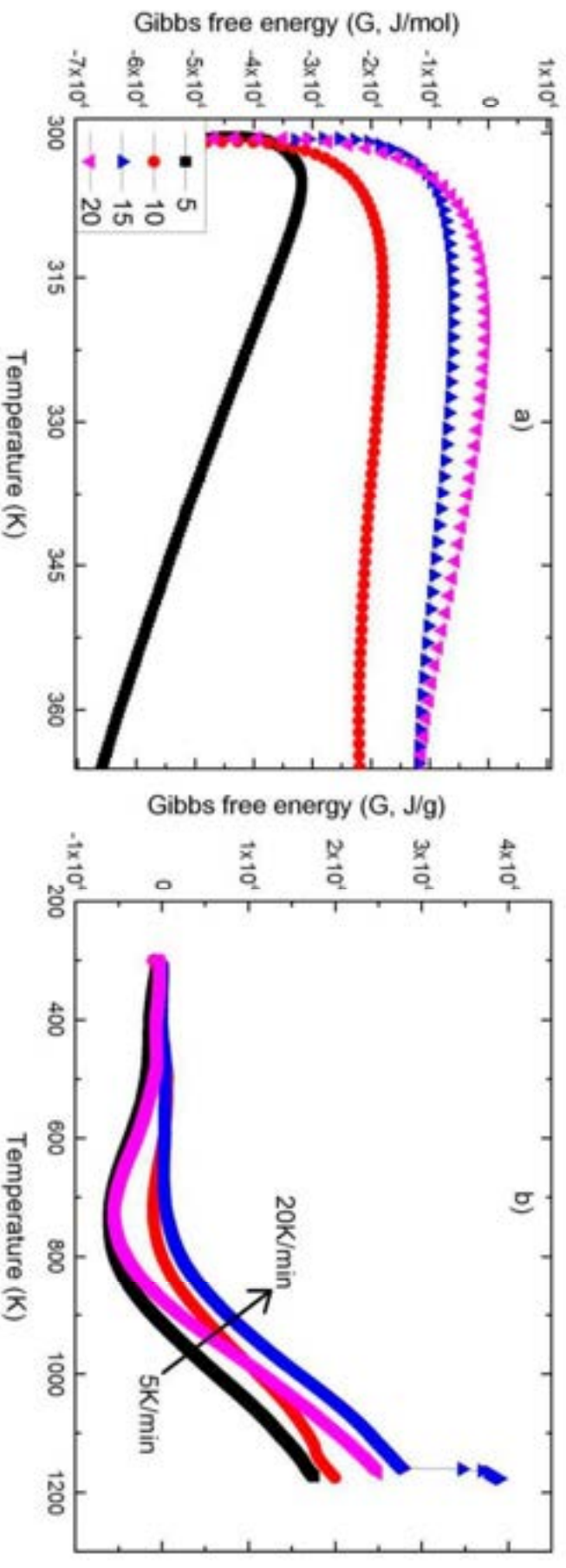


Şəkil 7.2.3 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fərqli termik işlənmə sürətlərində entalpiyasının temperatur asılılıqları (a seçilmiş aralıqda, b geniş aralıqda).

Təcrübi nəticələrə əsaslanaraq nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri üçün hesablanmış sistemin entropiyası şəkil 7.2.4-də təsvir edilmişdir. Sistemin entropiyasının temperatur asılılıqlarından görüldüyü kimi, entalpiya və istilik tutumuna uyğun olaraq bu halda da aşağı temperatur oblastlarında termik işlənmə sürətlərinin artması ilə sistemin entropiyası azalır. Geniş temperatur oblasından görüldüyü kimi, sistemin entropiyası temperaturun təqribən $T \geq 800\text{K}$ qiymətindən sonra mənfi qiymət alır. Bu hal isə ümumi yanaşmada xüsusi istilik tutumuna oxşar olaraq eksotermik effektlərlə izah edilə bilər.

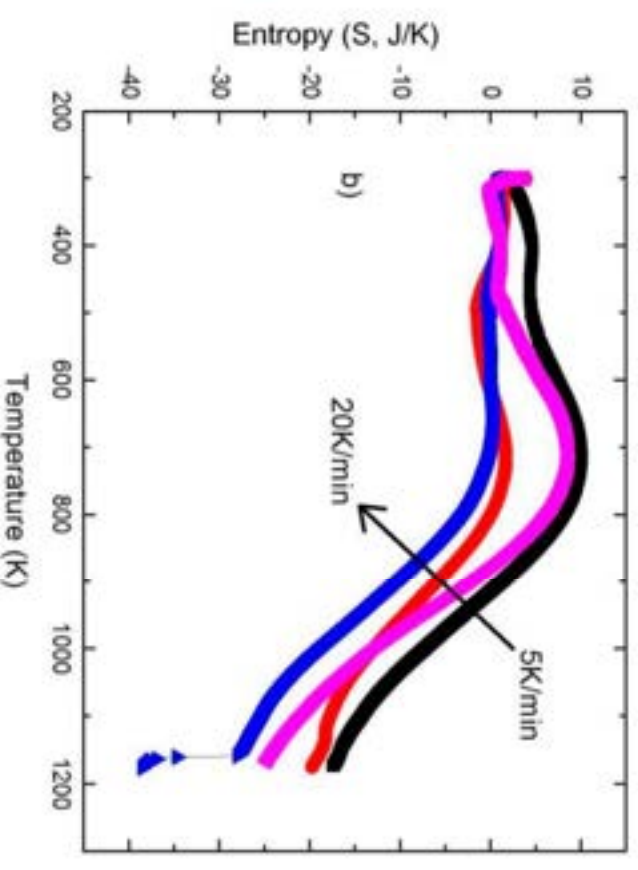
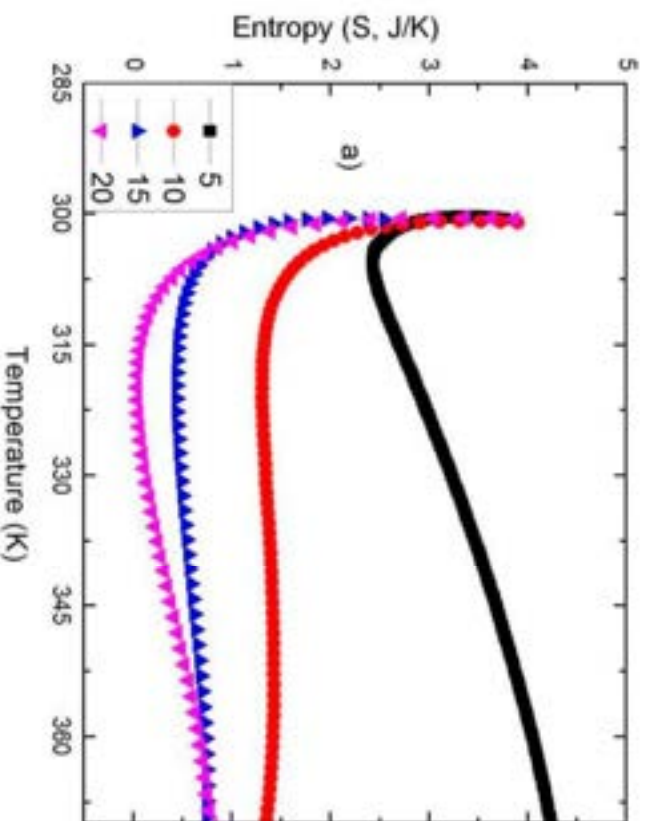
Təcrübi nəticələrə uyğun olaraq hesablanmış sərbəst Gibbs enerjisinin temperatur asılılıqları şəkil 7.2.5-də təsvir edilmişdir. Şəkillərdən görüldüyü kimi sərbəst Gibbs enerjisinin ədədi qiyməti termik işlənmə sürətindən tərs mütənasib asılıdır (Şəkil 7.2.5a). Termik işlənmə sürətinin artması ilə sərbəst Gibbs enerjisinin ədədi qiyməti artır ki, bu da nisbətən az sürətlərlə isitmə zamanı sistemin daha çox dayanıqlı olmasının göstəricisidir. Geniş temperatur aralıqlarında alınmış

Şekil 7.2.4 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklerinin fərqli termik işləmə sürətlərində entropiyasının temperatur asılılıqları (a seçilmiş aralıqda, b geniş aralıqda).



Şəkil 7.2.5 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fərqli termik işləmə sürətlərində sərbəst Gibbs enerjisinin temperatur asılılıqları (a seçilmiş aralıqda, b geniş aralıqda).

aslılıqlardan göründüyü kimi serbest Gibbs enerjisinin ededi qiymeti temperaturun nisbaten böyük qiymetlerinde demek olar ki, temperaturla düz mütenasib olaraq artır. Sistem üçün serbest Gibbs enerjisinin ededi qiymetinin artması müeyyan menada sistemin potensial enerjisinin artmasıdır (kimyevi potensial). İstenilen sistem zaman keçdikce potensial enerjisini minimuma endirmeye çalışır ve her hansı sistemde serbest Gibbs enerjisinin qiymetinin artması o sistemin dayanıqlılığının azalmasına sebep ola biler. Fiziki olaraq bu onu izah edir ki, tabii olaraq sistemin yuxarı temperaturda dayanıqlılığı azalır.



Təcrübi nəticələrə uyğun olaraq hesablanmış sərbəst Gibbs enerjisinin ədədi qiyməti aşağı temperaturlar oblastında mənfi qiymətlər alır. Bu isə o deməkdir ki, sistemdə baş verən proseslər spontandır və sistem tarazlıq halına doğru irəliləyə bilər. Qeyd edək ki, temperaturun $T < 800\text{K}$ qiymətlərində ümumi yanaşmada sərbəst Gibbs enerjisinin ədədi qiyməti sıfır ətrafında dəyişir ki, bu da sistemin tarazlıqda olmasının göstəricisidir. $T > 800\text{K}$ temperaturlarda sərbəst Gibbs enerjisinin ədədi qiyməti müsbətdir. Bu halda sistemdə baş verən proseslər spontan deyil, lakin əks istiqamətində spontan sistemə doğru dəyişikliklər müşahidə edilə bilər.

7.3 Silisium karbid (3C-SiC) nanokristallarına neytron selinin təsirinin DSC spektroskopiyası ilə öyrənilməsi

Məlumdur ki nano ölçülü materiallarda xüsusi səth sahəsi digər materiallarla müqayisədə dəfələrlə böyükdür (təcrübələr aparılan nanokristallik 3C-SiC üçün $120 \text{ m}^2/\text{q}$). Belə olan halda, aydındır ki, nanomateriallarda istilik axımı digər materiallarla müqayisədə səth sahəsinin böyük olması səbəbindən fərqli olacaqdır. İlkin yanaşmada əgər materialın səthi S olarsa bu zaman bu materialdan istilik axımı aşağıdakı kimi xarakterizə oluna bilər [7, s.162; 342 c.2, s.10]:

$$Q = S\alpha(T_2 - T_1) \quad (7.32)$$

burada T_1 və T_2 uyğun olaraq başlanğıc və son temperatur, S materialın səthinin sahəsi, α isə səthdə istilik axımı kofisientidir. Diferensial şəkildə səthdə istilik axımı kofisientidir aşağıdakı kimi təyin oluna bilər:

$$\alpha = - \frac{\lambda}{(T_2 - T_1)} \frac{\partial T}{\partial n} \quad (7.33)$$

Son bərabərliklərdən diferensial şəkildə aşağıdakı bərabərlikləri alırıq:

$$dQ = -\lambda \frac{\partial T}{\partial n} dS$$

$$dQ = \alpha (T_2 - T_1) dS \quad (7.34)$$

Adətən α kofisenti materialın tipindən asılı olaraq Nusselt (Nu), Prandl (Pr), Reynolds (Re) və Grashof (Gr) kimi bir neçə kriteriya ədədləri ilə təyin olunur [30, c.2, s.79; 89, s.293; 342 c.2, s.12]:

$$(Nu) = \frac{al}{\lambda}, \quad (Pr) = \frac{\nu}{a}$$

$$(Re) = \frac{wl}{\nu}, \quad (Gr) = \frac{g\beta l^3 (T_1 - T_0)}{\nu} \quad (7.35)$$

burada, λ - termik keçiricilik, a - termal diffuziya əmsalı, ν - kinematik özüllük, l - xarakterik ölçülər, w – xarakterik sürət, g – qravitasiya sahəsində sürətlənmə, $(T_1 - T_0)$ - temperatur fərqi və β termal genişlənmə kofisentidir. Yayınmış istilik miqdarı Q_r , temperatur T_s olarkən səth sahəsi A_s və temperatur T_0 olarkən səth sahəsi A_0 olarsa, ümumi şəkildə istilik miqdarı aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$Q_r = A_s \varepsilon_m \sigma (T_s^4 - T_0^4) \quad (7.36)$$

burada, ε_m - səth emissiyasından asılı olaraq emissiya əmsalı və σ - şüalanma sabitidir ($\sigma = 5.77 \cdot 10^{-8} \text{Wm}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$). Ümumi halda vahid sətdə olan yekun enerji aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$q_r = \frac{Q_r}{A_s} \quad (7.37)$$

Son iki bərabərlikdən alırıq:

$$q_r = \varepsilon_m \sigma (T_s^4 - T_o^4) \quad (7.38)$$

Yaxud (7.33) bərabərliyinə analogi olaraq:

$$q_r = \alpha_r (T_s - T_o) \quad (7.39)$$

burada

$$\alpha_r = \varepsilon_m \sigma \frac{T_s^4 - T_o^4}{T_s - T_o} = \varepsilon_m \sigma (T_s + T_o)(T_s^2 + T_o^2) \quad (7.40)$$

Son bərabərlik şüalanma zamanı istilik daşınması kofisientini xarakterizə edir [7, s.163; 89, s.293; 342 c.2, s.15]. Seçilmiş temperatur aralığı üçün $\Delta T = T_s - T_o$ olduğunu nəzərə alsaq, alarıq:

$$\alpha_r = 4\varepsilon_m \sigma T_o^3 \left(1 + \frac{3}{2} \frac{\Delta T}{T_o} \right) \quad (7.41)$$

Xüsusi halda $\frac{\Delta T}{T_o}$ nisbəti çox kiçik olarsa və bunu nəzərə almasaq $\alpha_r = 4\varepsilon_m \sigma T_o^3$ bərabərliyini alarıq. Adətən istilik ölçən cihazlar istilik axımı kofisientini, konveksiyanın istilik axımını, ötürülən və şüalanan istilikləri ölçür. Kalorimetriyada G kofisientindən daha çox istifadə olunur ki, bu da istilik itkisi kofisienti adlanır. Bu isə birbaşa nümunənin bütün səthindən ötürülən istilik ilə mütənasib olaraq qiymətləndirilir.

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra aktivləşmə enerjisini Arenius yanaşması ilə qiymətləndirmək üçün $\ln k - 1000/T$ asılılıqları **şəkil 7.3.1** – də verilmişdir. Qeyd edək ki, Arenius yanaşmasına əsasən qurulmuş $\ln k - 1000/T$ asılılıqlarında əyrilərin xətti hissəsinin $1000/T$ xətti ilə

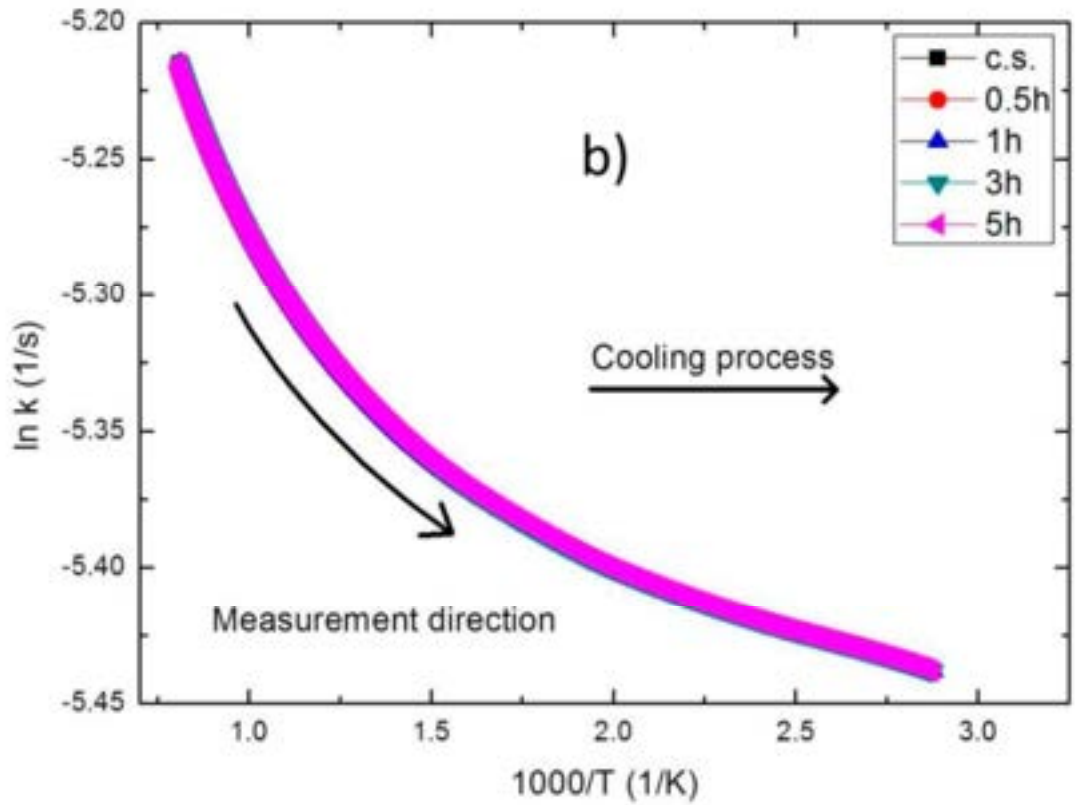
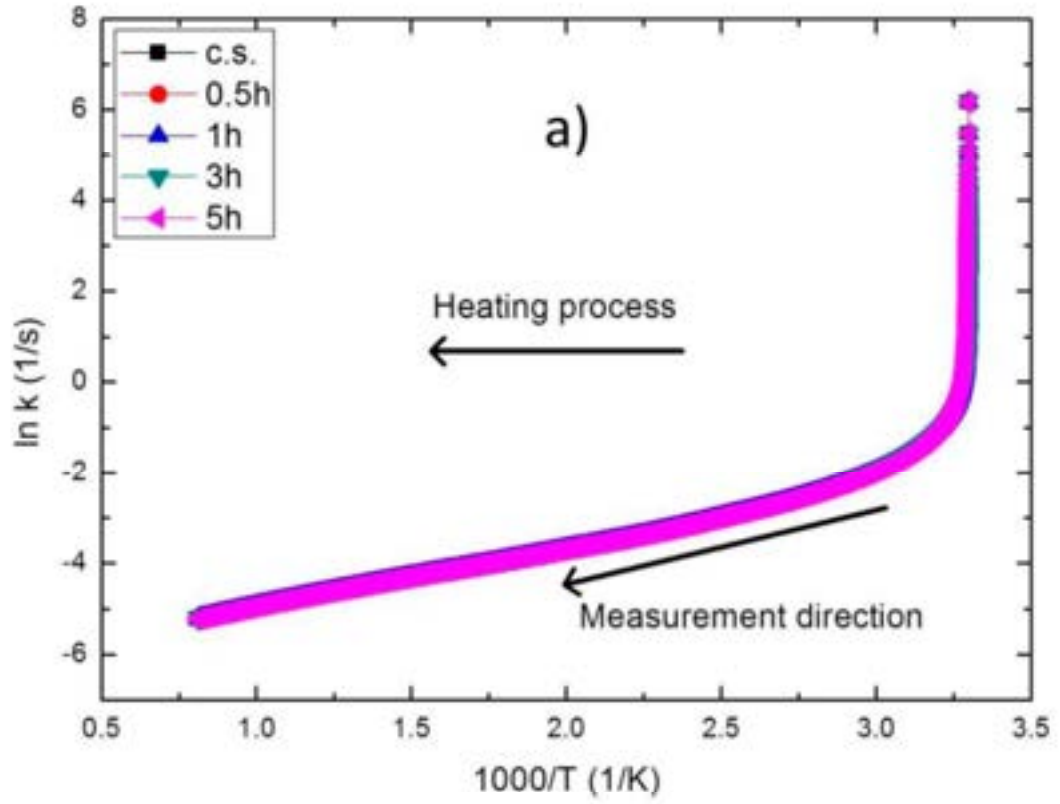
əmələ gətirdiyi bucağın tangensi birbaşa aktivləşmə enerjisini ifadə edir. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin aktivləşmə enerjisi həm qızma, həm də soyuma proseslərində ayrı ayrılıqda nəzərdən keçirilmişdir. Şəkildən görüldüyü kimi qızma prosesində aktivləşmə enerjisi əsasən bir real qiymətə malikdir (**Şəkil 7.3.1a**). Temperaturun kiçik qiymətlərində ($1000/T > 3.1$) müşahidə olunan kənar çıxımlar, hesab olunur ki, nanomaterial daxilində adsorbsiya olunan olan əlavə su və ya digər qatışıqlarla əlaqəlidir. Bu isə öz təstiqini soyuma prosesinin $\ln k - 1000/T$ asılılıqlarında tapır (**Şəkil 7.3.1b**). Belə ki, soyuma zamanı ümumi yanaşmada aktivləşmə prosesini bir qiymətlə izah etmək mümkündür. Digər tərəfdən, şəkildən görüldüyü kimi neytron seli ilə şüalanma nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin aktivləşmə enerjisinə demək olar ki, təsir etmir [7, s.164].

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra kütləsinin temperaturundan asılı olaraq dəyişmə asılılıqları **şəkil 7.3.2** – də təsvir edilmişdir. İlk öncə qeyd etmək lazımdır ki, aparılan eksperimentlərdən alınan nəticələr başlanğıc kütlənin ədədi qiymətindən asılı deyil və başlanğıc kütlənin fərqli olması tam texniki xarakterlidir ki, bu da heç bir fiziki məna kəsb etmir. Şəkildən görüldüyü kimi, qızma və soyuma proseslərində kütlə dəyişməsində fərq mövcuddur (**Şəkil 7.3.2a və 7.3.2b**). Qızma prosesində, temperaturun təqribən $300K < T < 1000K$ intervalında heç bir dəyişiklik müşahidə olunmur (**Şəkil 7.3.2a**). Lakin, temperaturun $1000K < T < 1300K$ intervalında, temperaturun artması ilə ümumi yanaşmada kütlədə çox az miqdarda artma müşahidə olunur. Mövcud kütlə artımının səbəbi oksidləşmə ola bilər, lakin bunu təstiqləmək üçün daha çox analitik işlərə ehtiyac vardır. “Pyris Manger” proqram təminatının köməyi ilə, neytron selinin təsirindən öncə və sonra oksidləşmə dərəcəsinin temperatur asılılığı çıxarılmışdır. Məlum olmuşdur ki, şüalanmadan öncə və sonra nanomaterialda temperaturun 1270 K qiymətinə qədər oksidləşmə çox az miqdarda mövcuddur. Temperaturun təqribən 1000K qiymətinə qədər oksidləşmə demək olar ki, tam yoxdur. Lakin temperaturun 1000K – dən böyük qiymətlərində çox cüzi oksidləşmə müşahidə olunur, bu da göstərilən intervalda kütlənin artmasına səbəb olur. Digər tərəfdən, soyuma prosesində kütlədə heç bir dəyişikliyin olmaması və artmış kütlənin saxlanması, bir daha qızma prosesində

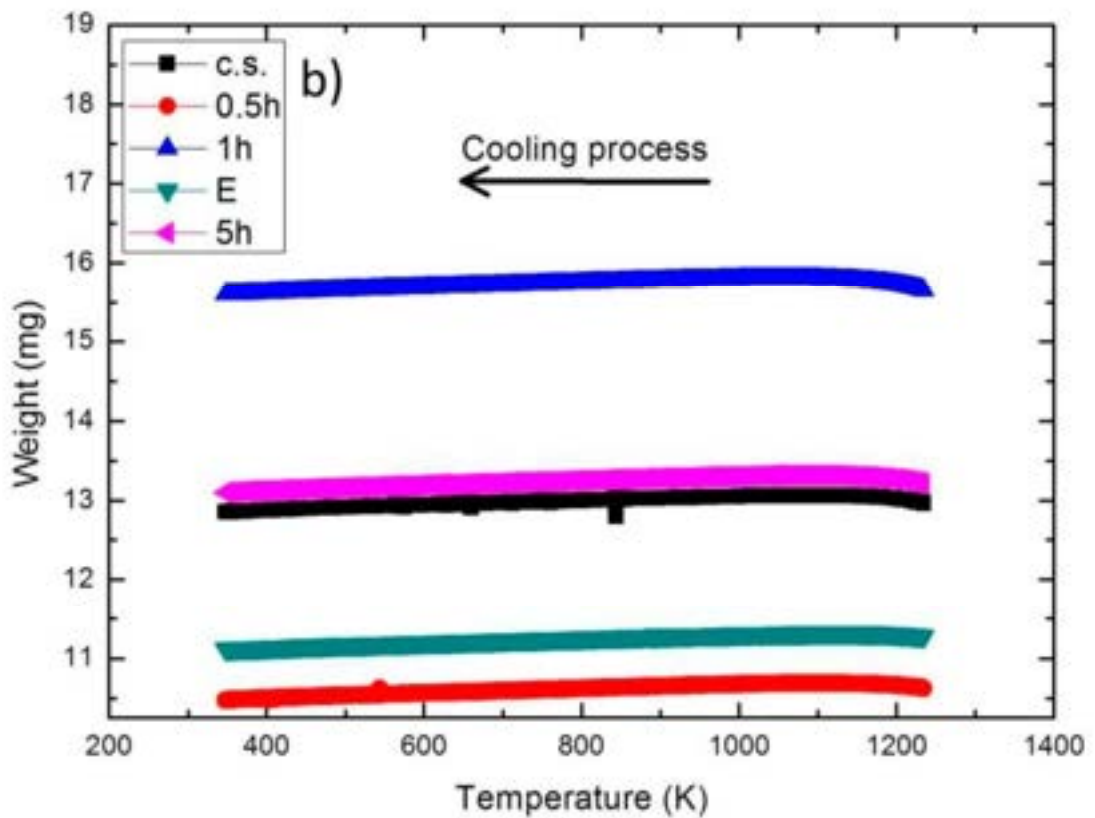
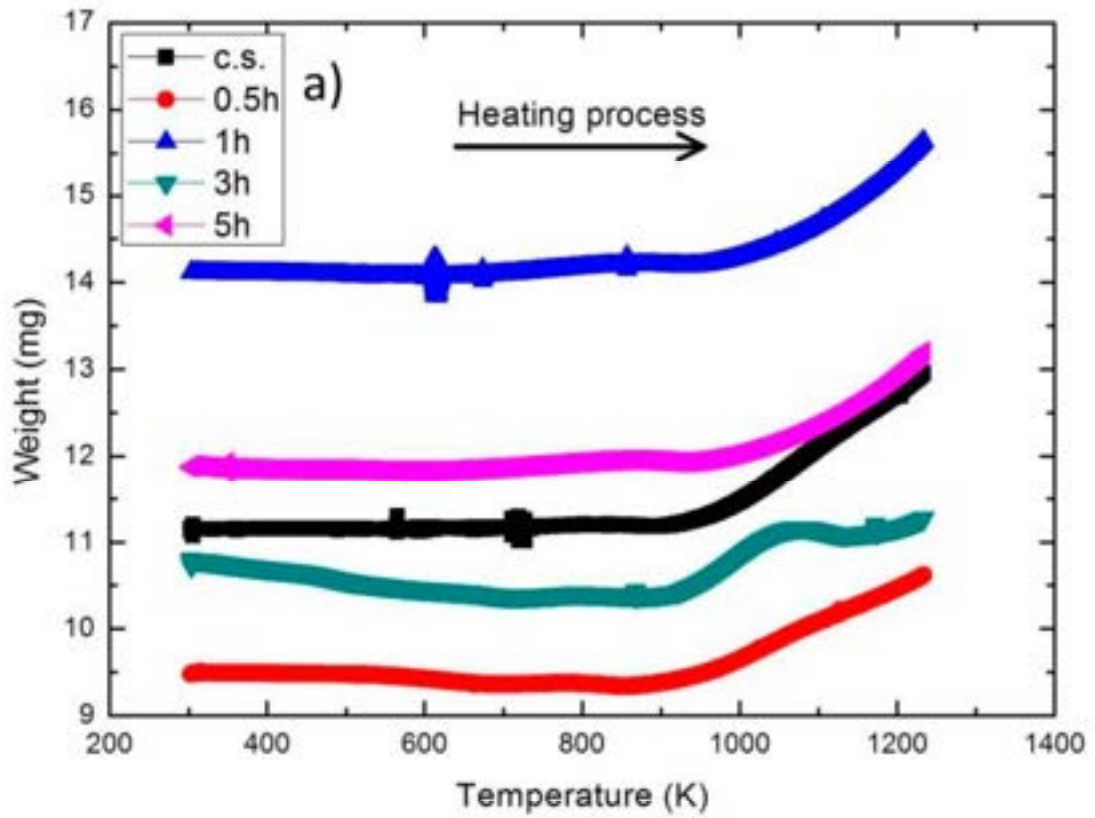
mövcud olan artımın oksidləşmə ilə əlaqəli ola bilməsini təstiqləyir (**Şəkil 7.3.3b**).

Fərqli müddətlərdə neytron selinin təsirinə məruz qalmış nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin istilik selinin temperaturdan asılılıq (DSC) spektri **şəkil 7.3.3**-də verilmişdir. Ümumi yanaşmada istilik axımının temperatur asılılığında neytronlarla şüalanmadan asılılıq çox azdır və xaotiklik müşahidə olunur. Şəkillərdən görüldüyü kimi, neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində baş verən termik prosesləri əsasən bir hissə ilə izah etmək olar. Digər kiçik kənar çıxma, atmosferdən adsorbsiya olunan suyun və ya digər aşqar elementlərin sistemdən çıxması kimi qiymətləndirilə bilər. belə ki, bu mərhələ temperaturun təqribən 400K qiymətində yekulaşır (**Şəkil 7.3.3a**). Əsas mərhələ isə temperaturun təqribən 800K qiymətinə qədər davam edir. Nanomateriallar çox böyük xüsusi səth sahəsinə (Specific Surface Area - SSA) malik və səthi aktiv olduğu üçün, ilkin yanaşmada ehtimal olunur ki, bu mərhələdə atmosferlə təmasdan səthədən asılı hala düşən su və ya digər birləşmələr nanohissəciyi tərk edir. Bu proses təqribən temperaturun 800K qiymətinə qədər davam edir.

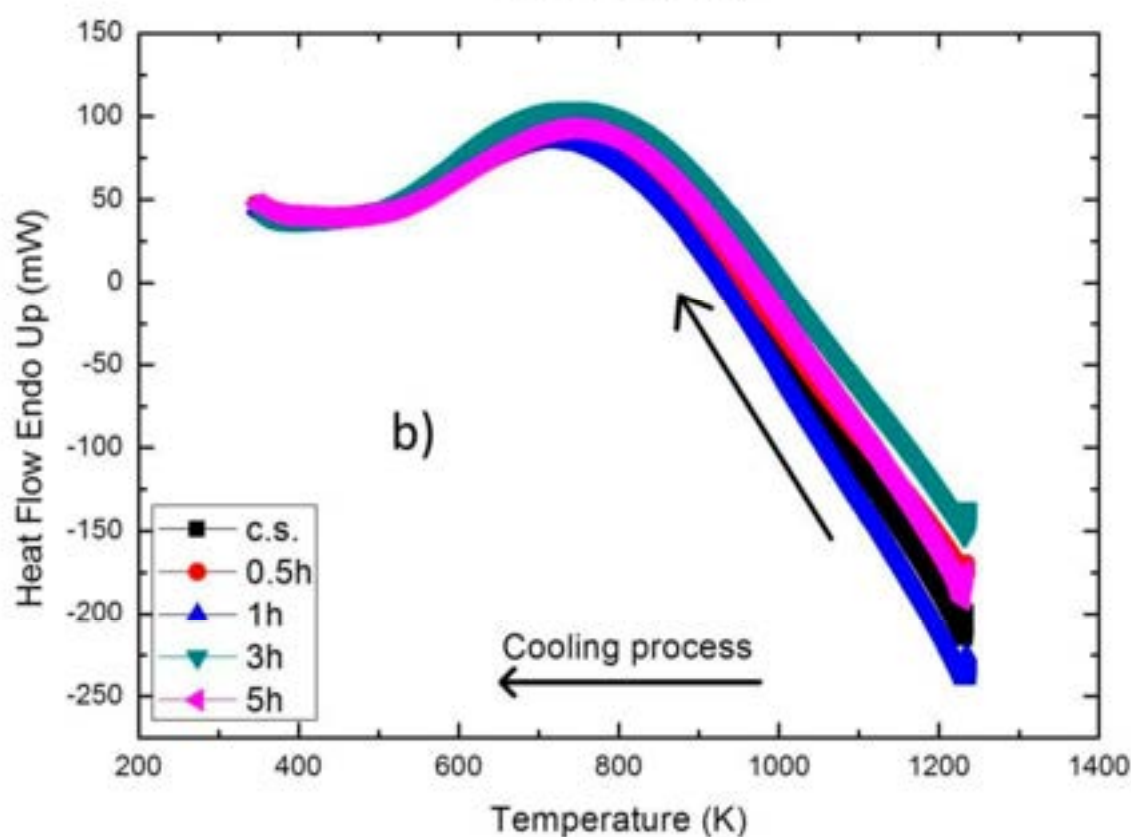
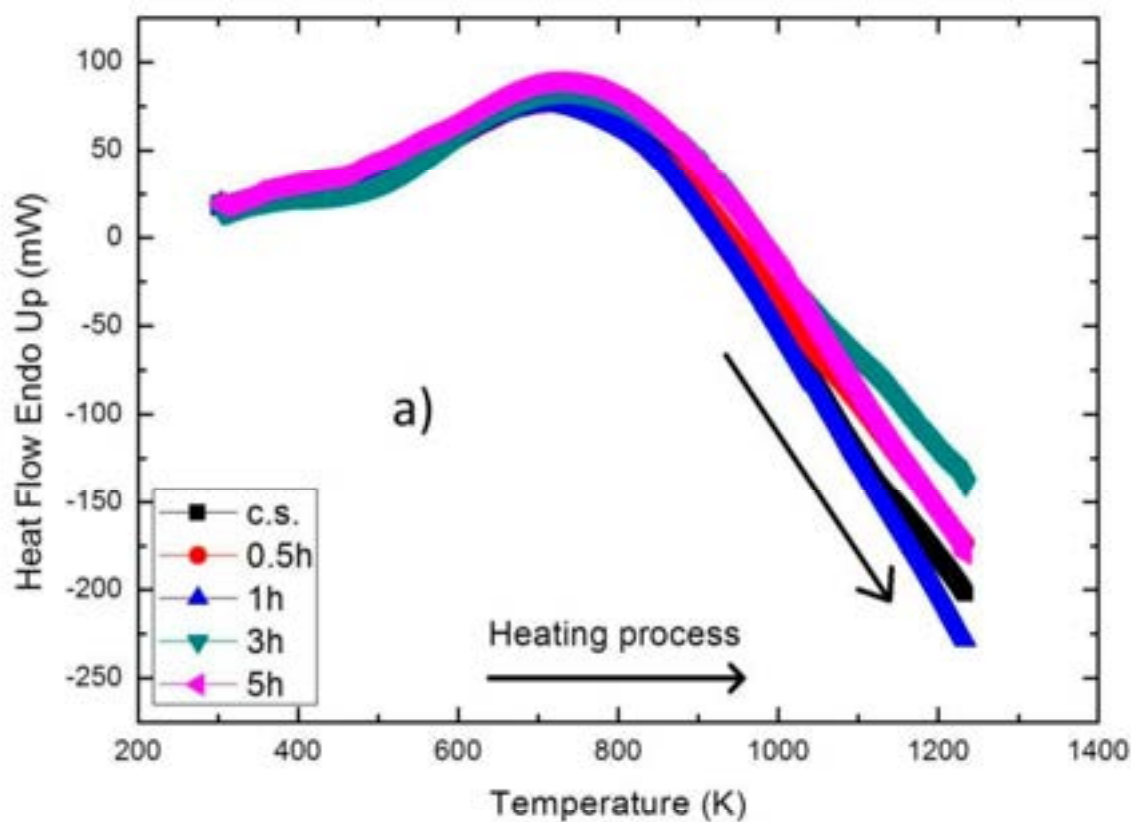
Temperaturun $800 < T < 1300\text{K}$ intervalında sistemə verilən enerji sadəcə nümunənin qızmasına sərf olunur və digər effektlər müşahidə olunmur. Lakin, soyuma prosesində də anoloji halın müşahidə olunması 800K temperaturda sistemdən asılı maddələrin sistemi tərk etməsi fərziyyəsinə müəyyən mənada ziddiyyət yaranır (**Şəkil 7.3.3b**). Belə olan hal, adətən Debay temperaturu ilə az və ya çox dərəcədə izah olunur. Lakin, baxılan haldan fərqli olaraq, ədəbiyyatlarda silisium karbid üçün Debay temperaturu 1270K – dir [60, s.1265; 199, c.2, s.594; 322, s.106401]. Belə olan halda, SiC nanohissəciklərində Debay temperaturunun ölçünün təsiri ilə 800K temperatura qədər azalmasını iddia etmək olar. Soyuma proseslərində mövcud pik, ola bilsin ki, ətrafdan sistemə yenidən daxil olan aşqar materiallarla əlaqəlidir.



Şəkil 7.3.1 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin neytron seli ilə şüalanmadan öncə (c.s.) və (0.5h,1h,3h,5h) sonra $\ln k - 1000/T$ asılılıqları (a – qızma prosesi, b – soyuma prosesi).



Şəkil 7.3.2 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin hissəciklərinin neytron seli ilə şüalanmadan öncə (c.s.) və (0.5h,1h,3h,5h) sonra kütləsinin temperaturundan asılı olaraq dəyişməsi (a – qızma prosesi, b – soyuma prosesi).



Şəkil 7.3.3 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin neytron seli ilə şüalanmadan öncə (c.s.) və (0.5h,1h,3h,5h) sonra istilik selinin temperatur asılılıqları (a – qızma prosesi, b – soyuma prosesi).

7.4 Neytron selinin təsiri altında nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin DTA, TGA və DTG spektroskopik analizləri

Təqdim olunan işdə, istifadə olunan nümunələr kristallik olduğu üçün bütün termal parametrlər yalnız temperaturun dəyişməsi ilə analiz edilə bilər. Təcrübələr aparılan temperatur oblastında (290K-1273K) bərk cisimlərdə təzyiq və həcm dəyişməsi demək olar ki, sıfıra yaxındır. Bu halda xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılıqlarını nəzəri olaraq araşdırmaq nisbətən sadə halda olur [6, s.65; 239, c.14, s.107; 280, s.1592; 342 c.2, s.20]. İlkin yanaşmada izobarik prosədə termal əmsal aşağıdakı kimi təyin oluna bilər [239, c.14, s.107]:

$$\beta = \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial T} \Big|_p \quad (7.42)$$

Ümumi yanaşmada neytronlarla şüalanma zamanı temperaturun sabit qiymətlərində mikrostrukturlarda nöqtəvi defektəmələgəlmə halları $B=N\alpha/\lambda$ kimi təyin oluna bilər (burada, N – nöqtəvi defekt mənbələrinin sayı, α – nöqtəvi defekt yaradan qüvvə sabiti və λ – defektlərin yaranma məsafəsidir) [239, c.14, s.108]: Bərk cisimlərdə həcm və ya təzyiqin dəyişməsi defekt konsentrasiyasına təsir etmir. Başqa sözlə təmiz bərk cisimlərdə qismən xəta ilə $(\partial B / \partial P)_T = 0$ və ya $(\partial B / \partial T)_P = 0$ kimi yazıla bilər. Lakin real kristallarda bu qiymət sıfırdan fərqlidir. Defekt parametrlərinin müzakirəsi zamanı $(\partial B / \partial P)_T$ kəmiyyətinin ədədi qiyməti çox önəmlidir. İlkin yanaşmada aşağıdakı bərabərliklə bu kəmiyyəti qiymətləndirmək olar [239, c.14, s.145; 280, s.1593; 342 c.2, s.21]:

$$\frac{\partial B}{\partial P} \Big|_T = \frac{\partial B}{\partial V} \Big|_T \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_T = \frac{\partial B}{\partial V} \Big|_T \begin{bmatrix} V \\ -B \end{bmatrix} \quad (7.43)$$

buradan

$$\left. \frac{dB}{dP} \right|_T = \frac{dB}{B} \left[- \frac{dV}{V} \right] \quad (7.44)$$

$(\partial B / \partial P)_T$ kəmiyyətinin qiyməti adətən 3.5-8 aralığında olur [239, c.14, s.145]. Digər tərəfdən adətən $(\partial B / \partial P)_T$ kəmiyyətinin qiyməti temperaturun artması ilə artır. İndi isə, B kəmiyyətinin digər terik xassələrə təsirini qısa olaraq nəzərdən keçirək. İlkin yanaşmada defektin Gibbsin enerjisi aşağıdakı kimi təyin oluna bilər [239, c.14, s.145; 280, s.1597; 342 c.2, s.23]:

$$g = cB \Omega \quad (7.45)$$

burada, c – defekt mexanizmi ilə izah olunan temperatur və təzyiq kəffisenti, B – izotermal bərk cisim modulu, Ω - isə atomun “orta” həcmidir. Mütləq sıfır temperaturunda formalaşmış Gibbs enerjisi ($g^f = c^f B \Omega$) formalaşmış entalpiyaya bərabər olduğu üçün aşağıdakı ifadəni yazma bilərik [239, c.14, s.146]:

$$h_0^f = c^f B_0 \Omega_0 \quad (7.46)$$

və ya

$$c^f = \frac{h_0^f}{B_0 \Omega_0} \quad (7.46a)$$

Son ifadəni nəzərə alsaq Gibbs enerjisi üçün alırıq:

$$g^f = \left(\frac{h_0^f}{B_0 \Omega_0} \right) B \Omega \quad (7.47)$$

Nəzərə alsaq ki, $\Omega / \Omega_0 = b$ o zamanq alırıq:

$$b = \exp \left[\int_0^f \beta dT \right] \quad (7.48)$$

Bütün bunlar yuxarıdakı bərabərliklərdə nəzərə alınsa, formalaşmış Gibbs enerjisi üçün alarıq:

$$g^f = \frac{h_0^f}{B_0} Bb \quad (7.49)$$

Gibbs enerjisinin ifadəsini bilərək biz entropyanı da aşağıdakı ifadə ilə qiymətləndirə bilərik [239, c.14, s.184; 342 c.2, s.33]:

$$s^f = -c^f \Omega \left[\beta B + \left. \frac{\partial B}{\partial T} \right|_p \right] \quad (7.50)$$

Bu bərabərlikdə c^f -i nəzərə alsaq alarıq:

$$s^f = -\frac{h_0^f}{B_0} b \left[\beta B + \left. \frac{\partial B}{\partial T} \right|_p \right] \quad (7.51)$$

Entropiyaya uyğun olaraq entalpiyanı da aşağıdakı bərabərliklərlə ifadə edə bilərik [6, s.65; 239, c.14, s.184; 342 c.2, s.33]:

$$h^f = c^f \Omega \left[B - T \beta B - T \left. \frac{\partial B}{\partial T} \right|_p \right] \quad (7.52)$$

və ya

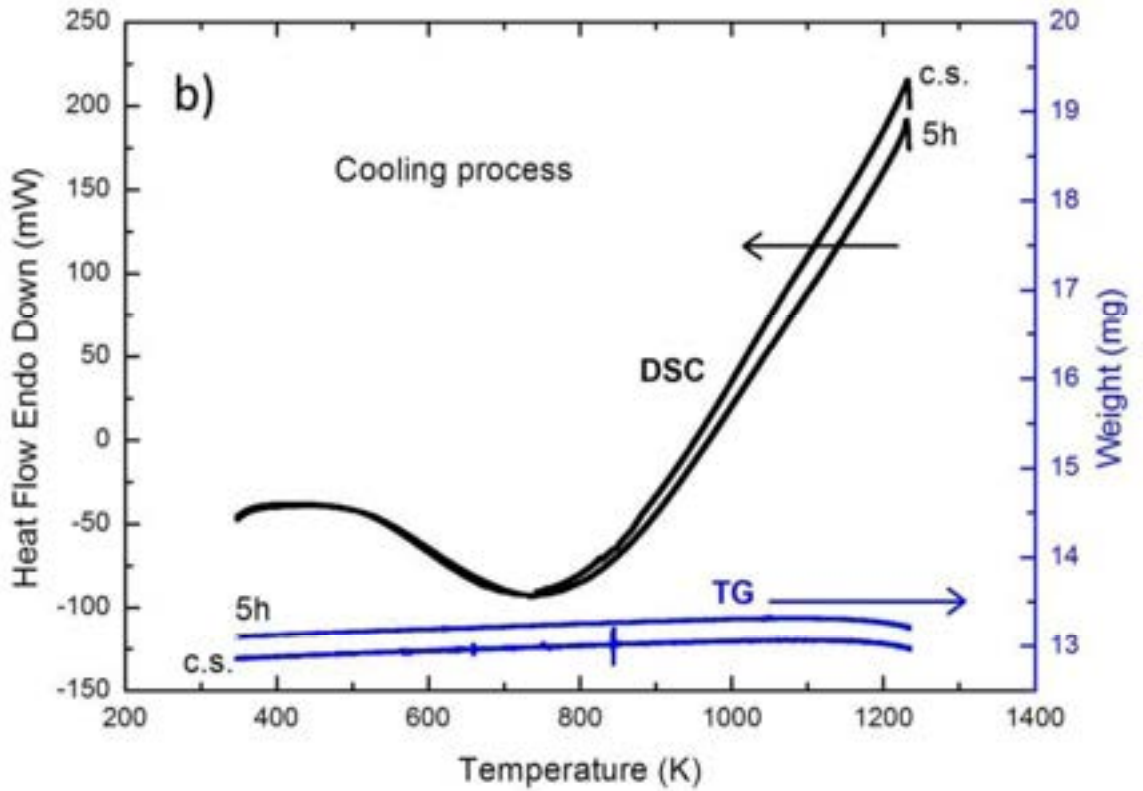
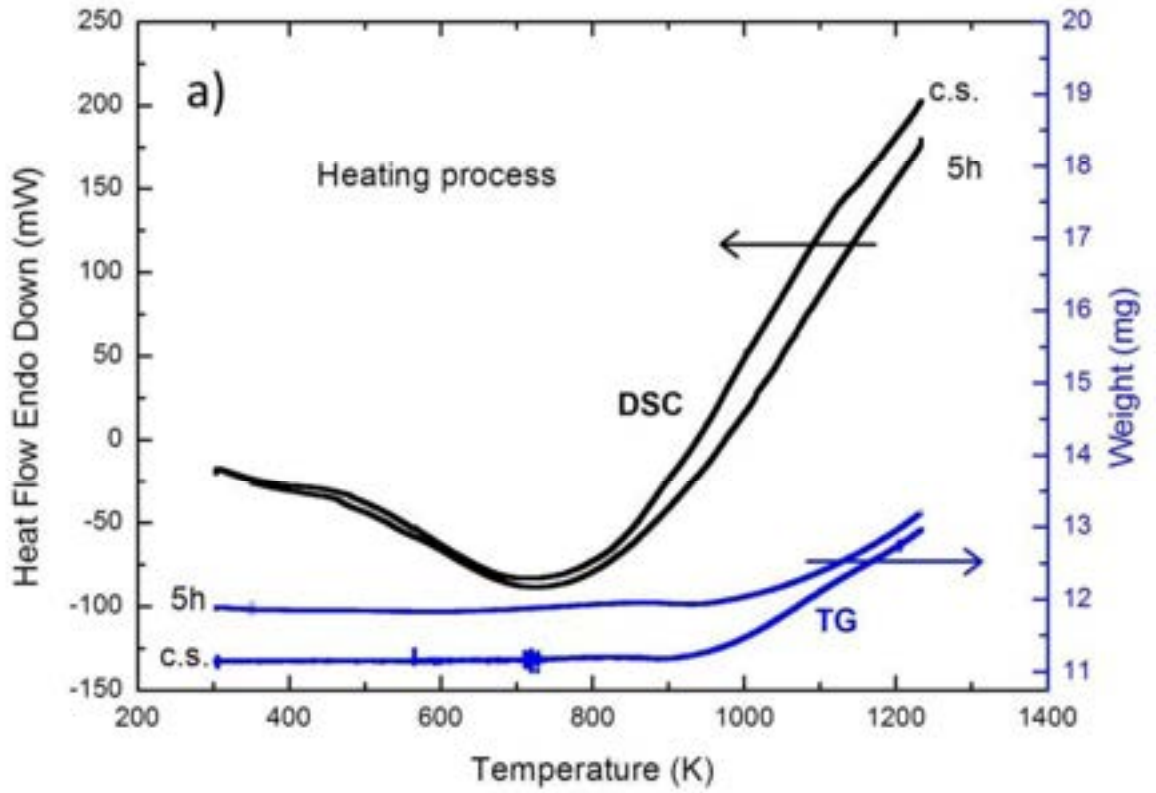
$$h^f = \frac{h_0^f}{B_0} b \left[B - T \beta B - T \left. \frac{\partial B}{\partial T} \right|_p \right] \quad (7.53)$$

Ümumi yanaşmada DSC spektrlərindən xüsusi istilik tutumunu (7.29) bərabərliyi ilə hesablaya bilərik. (7.29) bərabərliyi ilə hesablanmış istilik tutumuna uyğun şəkildə verilmiş temperatur aralığında sistemin entalpiya və entropiyasını (7.30) bərabərlikləri ilə hesablaya bilərik. Digər tərəfdən məlumdur ki, sistemin entalpiya və entropiyasını bilərək asanlıqla Gibbs enerjisini hesablamaq olar. Bunun üçün isə, sadə yanaşmada (7.31) bərabərliyi ilə hesablanmış entalpia və entropiyanın qiymətlərinə uyğun şəkildə sistemin sərbəst Gibbs enerjisini hesablamaq olar. Beləliklə, təqdim olunan işdə (7.29), (7.30) və (7.31) bərabərliklərdən istifadə olunaraq nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin xüsusi istilik tutumu, sərbəst Gibbs enerjisi, sistemin entalpia və entropiyası temperaturun fərqli qiymətlərində hesablanmışdır [6, s.69].

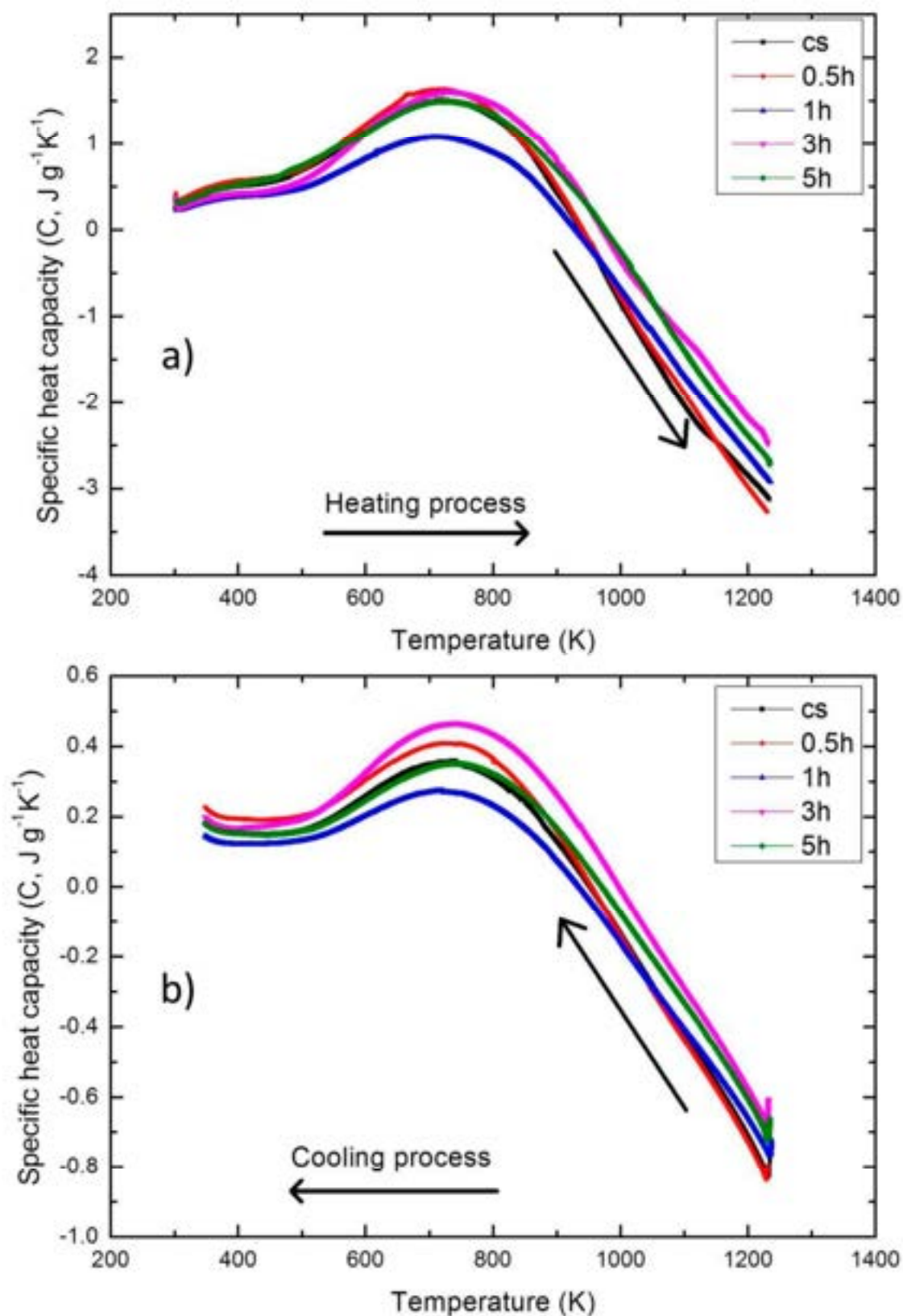
Temperaturun 300K – 1200K aralığında 3C-SiC nanokristallarının termik parametrləri neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra analiz edilmişdir. Eyni zamanda qızma və soyuma prosesləri nəzərdən keçirilmişdir. Bütün hallarda nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin istilik tutumu, Gibbs enerjisi, sistemin entalpiya və entropiyası təcrübi nəticələrə əsaslanaraq nəzəri hesablanmışdır. Qızma və soyuma proseslərində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin DSC və TG spektrləri neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra müqayisəli verilmişdir (**Şəkil 7.4.1**). Şəkildən görüldüyü kimi temperaturun təqribən 800K qiymətinə qədər DSC spektrlərində mühiti tərk edən əlavə qatışıqlar mövcuddur (**Şəkil 7.4.1a**). Lakin, sistemi tərk edən qatışıqların miqdarı çox kiçik olduğundan TG spektrində dəyişiklik müşahidə olunmur. Temperaturun $T > 800K$ qiymətlərində DSC əyrilərində stabilləşmə müşahidə olunur. Digər tərəfdən TG əyrilərində temperaturun $T > 900K$ qiymətlərindən başlayaraq kütlə artması müşahidə edilir. Mövcud bu proses adətən oksidləşmə ilə izah edilir. Bu öz təstiqini soyuma prosesində göstərir. Belə ki, soyuma prosesində demək olar ki, TG spektrlərində heç bir dəyişiklik müşahidə edilmir (**Şəkil 7.4.1b**). 3C-SiC nanokristallarının DSC və TG spektrlərinə neytron seli xarakter cəhətdən heç bir dəyişiklik yaratmur. Lakin neytron seli istilik mübadiləsi zamanı ədədi qiymətin dəyişməsinə səbəb olur. Digər tərəfdən neytron selinin təsiri nəticəsində oksidləşmə prosesi nisbətən ləng gedir (**Şəkil 7.4.1a**). Bu isə ola bilsin ki,

$^{31}\text{Si} \rightarrow (\beta\text{-parçalanma}) \ ^{31}\text{P}$ nüvə çevrilmələri nəticəsində daha çox dayanıqlı yeni P izotoplarının konsentrasiyasının artması ilə bağlıdır.

Neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılıqları **şəkil 7.4.2**-də verilmişdir. Eyni zamanda xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılıqları qızma və soyuma proseslərində müqayisəli verilmişdir. Ümumi yanaşmada, xüsusi istilik tutumunun ədədi qiyməti 3C-SiC nanokristalları üçün xarakterik ($500\div 750 \text{ C}\cdot\text{kg}^{-1}\text{K}^{-1}$) qiymət ətrafındadır (**Şəkil 7.4.2a**). Lakin nisbətən yüksək temperaturlarda müəyyən qədər kənarçıxmalar mövcuddur. Nisbətən yüksək temperaturda xüsusi istilik tutumunun ədədi qiyməti mənfi olması, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində bu temperaturlarda eksotermik effektlərin olmasının göstəricisidir. Bu halda təcrübə aparılan cihazda nümunə olan qabın (pənin) temperaturu nümunənin temperaturundan aşağıdır. Bunun isə səbəbi, öncə qeyd etdiyimiz oksidləşmə prosesi ola bilər. Digər temperaturlarda xüsusi istilik tutumunun ədədi qiymətinin mübət olması, endotermik proseslərə uyğundur. Soyuma prosesində isə xüsusi istilik tutumunun ədədi qiyməti çox az dəyişir (**Şəkil 7.4.2b**). Həm qızma, həm də soyuma proseslərində, temperaturun 800K qiyməti ətrafında baş verən kənarçıxmaları bu materiallar üçün xarakterik Debay temperaturu ($\theta_D \sim 800\text{K}$) ilə əlaqələndirmək olar [**199, c.2, s.370**]. Lakin, Debay temperaturu haqqında daha dəqiq fikr söyləmək üçün daha çox analitik təcrübələrə ehtiyac var.



Şəkil 7.4.1 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin neytron seli ilə şüalanmadan öncə (c.s.) və sonra (5h) DSC və TG spektrləri (a qızdırılma prosesi, b soyuma prosesi).



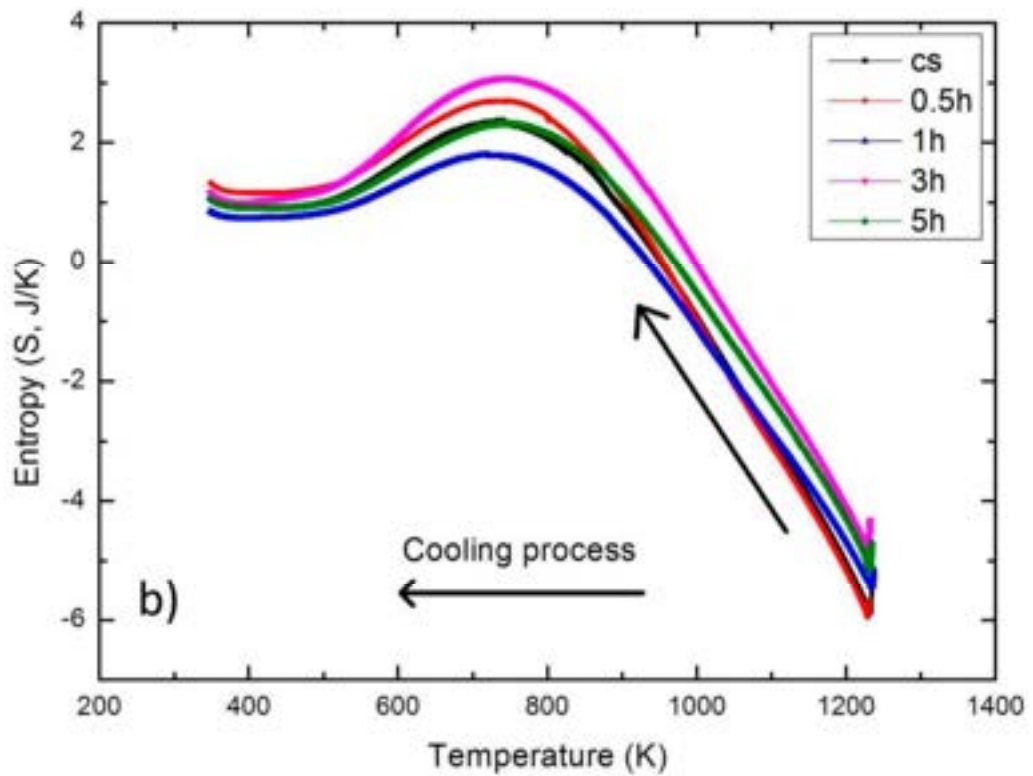
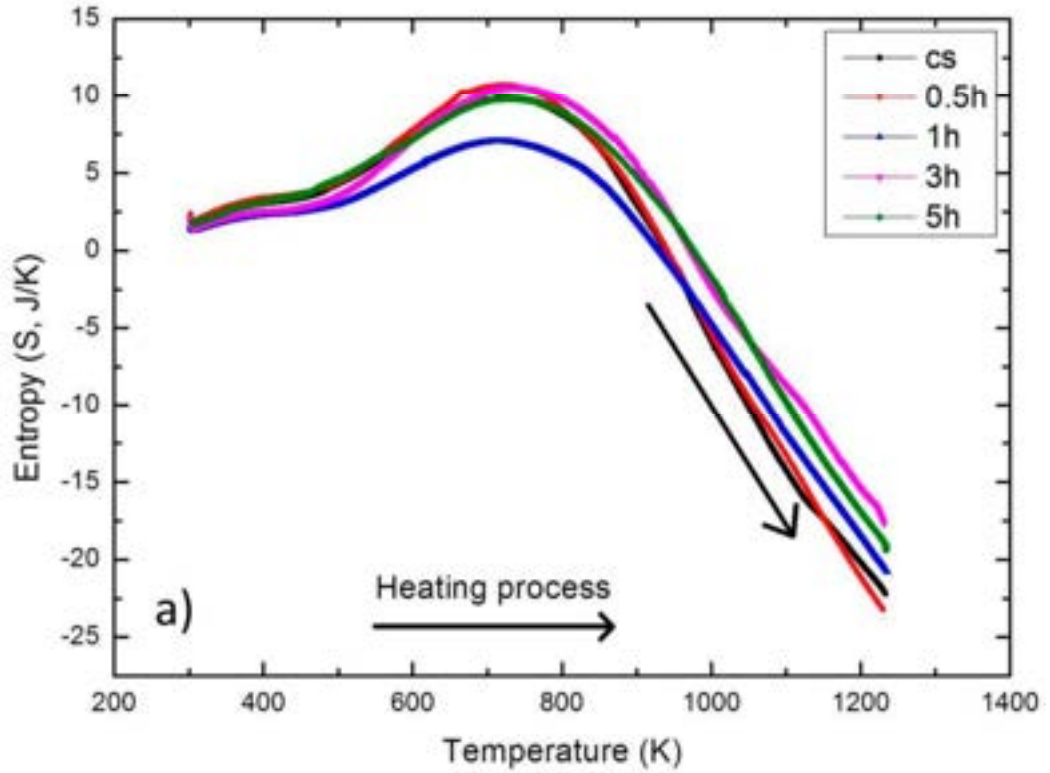
Şəkil 7.4.2 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin neytron seli ilə şüalanmadan öncə (c.s.) və sonra (0.5h, 1h, 3h, 5h) xüsusi istilik tutumunun temperatur asılıqları (a qızdırılma prosesi, b soyuma prosesi).

Digər tərəfdən, öncə qeyd etdiyimiz kimi, uyğun temperatur ətrafında oksidləşmə prosesinin başlaması bu temperaturdan etibarən xüsusi istilik tutumunun ədədi qiymətinin sabit qalmasına mane olur. Nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri üçün təcrübi nəticələrə əsaslanaraq hesablanmış sistemin entropiyasını qısa olaraq nəzərdən keçirək (**Şəkil 7.4.3**). Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin entropiyasının temperatur asılılıqlarından görüldüyü kimi temperaturun nisbətən aşağı qiymətlərində entropiya kiçik qiymətlər alır (**Şəkil 7.4.3a**). Təbii olaraq temperaturun artması ilə sistemin xaotikliyi artır və buna uyğun olaraq entropiyanın da ədədi qiyməti artır. Şəkildən görüldüyü kimi, temperaturun təqribən $T \geq 900K$ qiymətindən sonra sistemin entropiyası mənfi qiymət alır. Bu halı da, öncə qeyd etdiyimiz kimi, nisbətən yüksək temperaturlarda nanomaterialda başlayan oksidləşmə prosesi ilə izah etmək olar. Digər tərəfdən soyuma prosesində sistemin entropiyası qızma prosesi ilə müqayisədə kifayət qədər kiçikdir (**Şəkil 7.4.3b**). Bu isə onu deməyə əsas verir ki, soyuma prosesi zamanı sistemdə xaotiklik azalır.

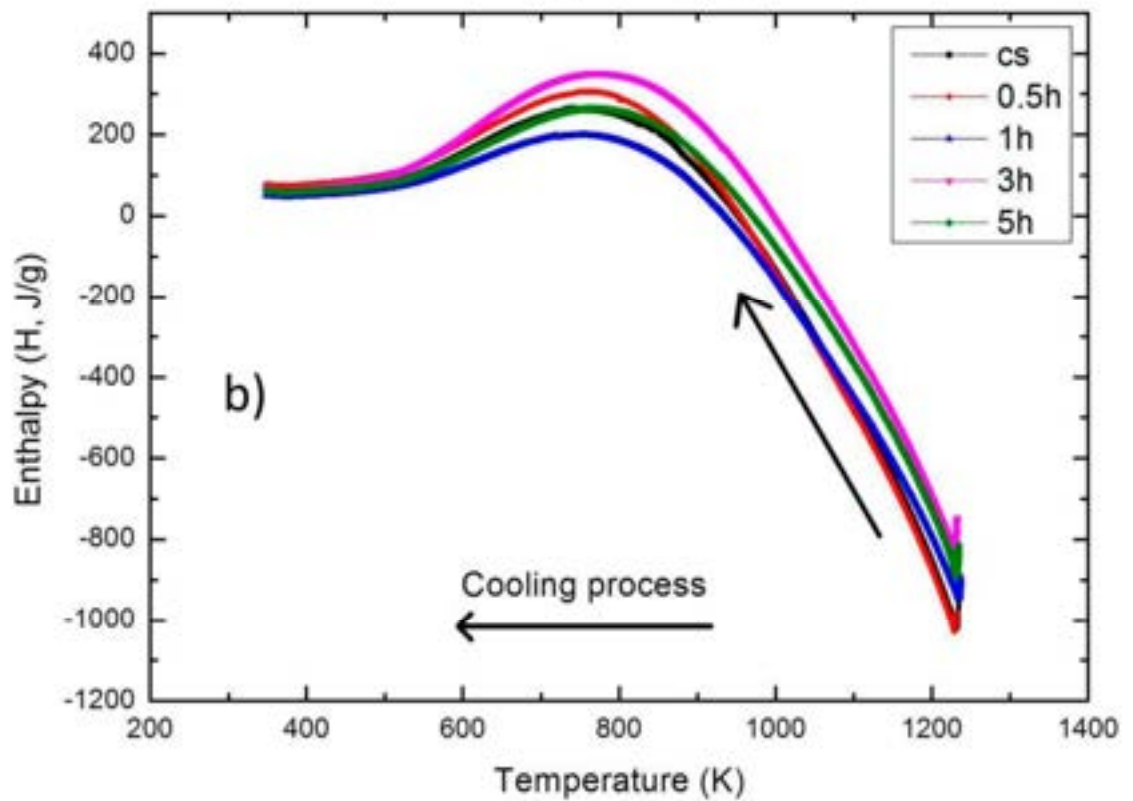
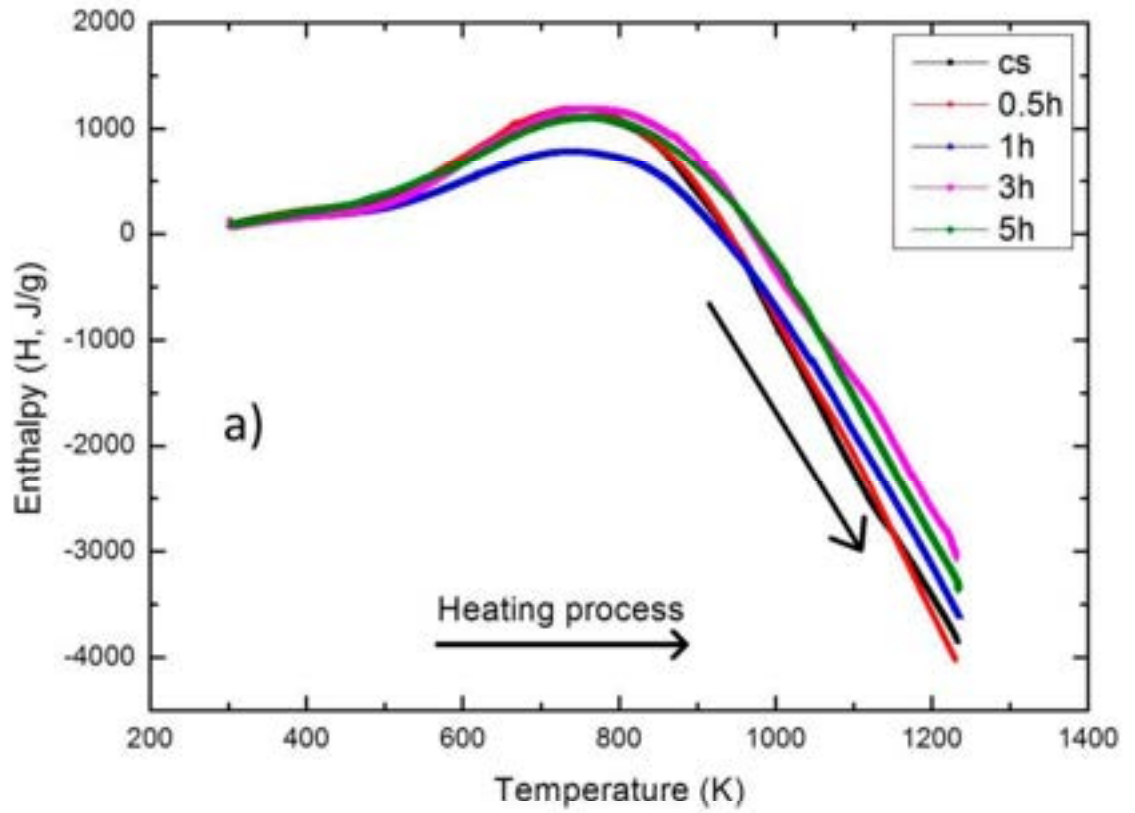
3C-SiC nanokristallarının entalpiyasının temperatur asılılıqları da entropiyasına uyğundur (**Şəkil 7.4.4**). Qızma və soyuma proseslərinin müqayisəsindən görünür ki, sistemin entalpiyasının ədədi qiymətində kəskin fərq mövcuddur (**Şəkil 7.4.4a və 7.4.4b**). Soyuma prosesində entalpiyanın ədədi qiymətinin çox kiçik olmasını oksidləşmə prosesi ilə əlaqələndirmək olar. Belə ki, nisbətən oksidləşmiş nümunənin entalpiyasının ilkin nümunə ilə müqayisədə fərqli olması təbiidir.

3C-SiC nanohissəcikləri üçün sərbəst Gibbs enerjisinin temperatur asılılıqları təcrübi nəticələrə uyğun olaraq hesablanmışdır (**Şəkil 7.4.5**). Sərbəst Gibbs enerjisi neytron seli ilə şüalanmadan öncə və sonra, qızma və soyuma proseslərində ayrı – ayrılıqda hesablanmışdır. Nisbətən aşağı temperaturlarda sərbəst Gibbs enerjisinin ədədi qiyməti 0 ətrafındadır və bəzən mənfi qiymətlər alır. Sərbəst Gibbs enerjisinin ədədi qiyməti sıfır ətrafında dəyişməsi, sistemin tarazlıqda olmasını izah edir. Digər tərəfdən, sərbəst Gibbs enerjisinin ədədi qiymətinin mənfi olması sistemdə baş verən proseslərin spontan və sistem tarazlıq halına doğru irəliləyən olmasının göstəricisidir. Temperaturun $T > 800K$ qiymətlərində sərbəst Gibbs enerjisinin ədədi qiyməti

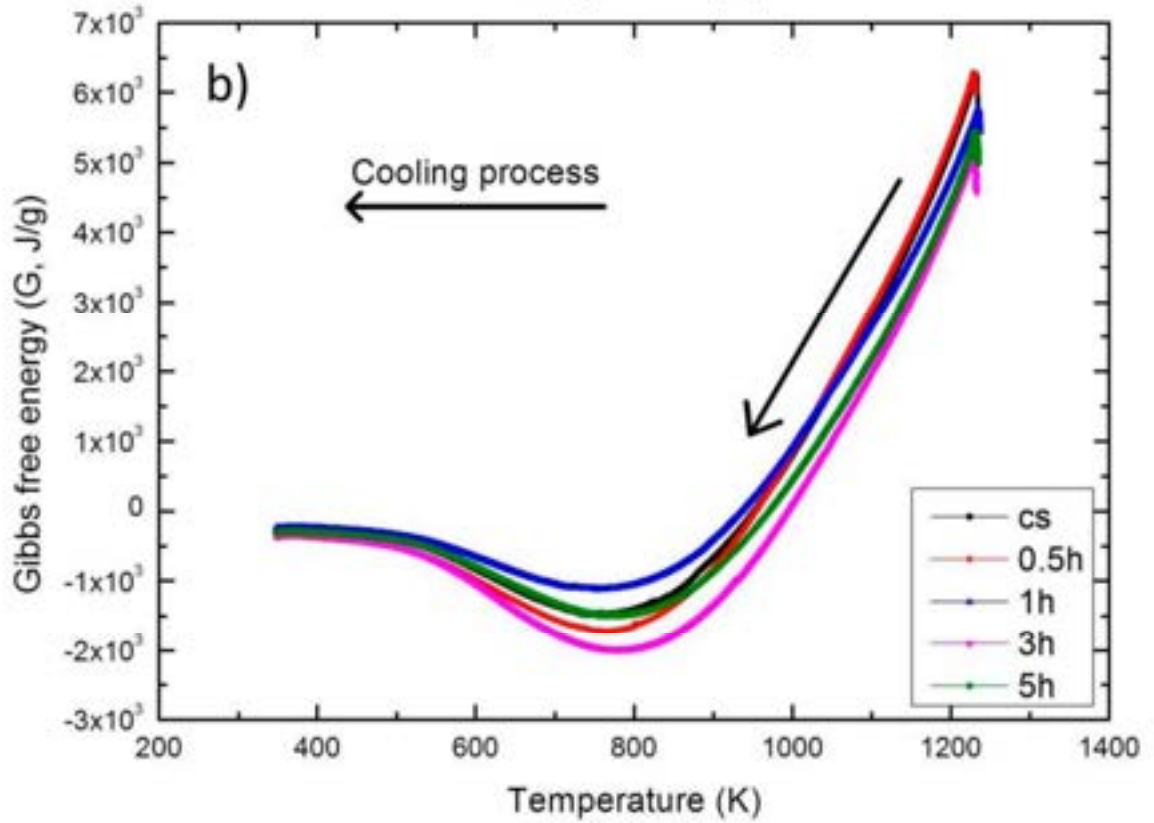
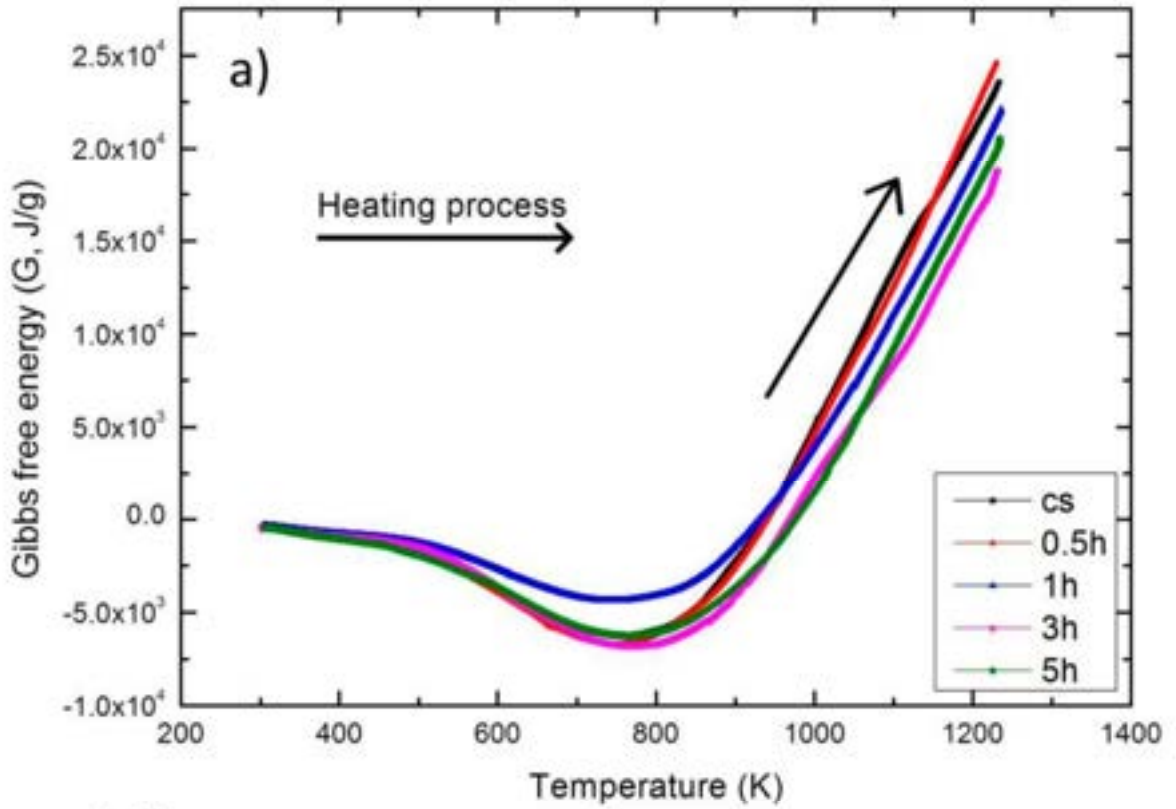
müsbətdir və bu halda sistemdə baş verən proseslər spontan deyil.



Şəkil 7.4.3 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin neytron seli ilə şüalanmadan öncə (c.s.) və sonra (0.5h, 1h, 3h, 5h) entropiyasının temperatur asılılıqları (a qızdırılma prosesi, b soyuma prosesi).



Şəkil 7.4.4 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin neytron seli ilə şüalanmadan öncə (c.s.) və sonra (0.5h, 1h, 3h, 5h) entalpiyasının temperatur asılılıqları (a qızdırılma prosesi, b soyuma prosesi).



Şəkil 7.4.5 Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin neytron seli ilə şüalanmadan öncə (c.s.) və sonra (0.5h, 1h, 3h, 5h) sərbəst Gibbs enerjisinin temperatur asılılıqları (a qızdırılma prosesi, b soyuma prosesi).

Ümumi yanaşmada Gibbs enerjisinə əsasən demək olar ki, sistem dayanıqsızdır və əks istiqamətində spontan sistemə doğru dəyişikliklər müşahidə edilə bilər. Digər tərəfdən, temperaturun nisbətən böyük qiymətlərində, sərbəst Gibbs enerjisinin ədədi qiyməti temperaturla mütənəsb olaraq artır. Məlumdur ki, hər hansı bir sistem üçün sərbəst Gibbs enerjisinin ədədi qiymətinin artması müəyyən mənada sistemin potensialının artmasıdır (kimyəvi potensial). Beləliklə sərbəst Gibbs enerjisinin qiymətinin artması sistemin dayanıqlılığının azalmasına gətirib çıxarır. Qızma və soyuma proseslərinin müqayisəsindən görünür ki, sistemin sərbəst Gibbs enerjisinin ədədi qiyməti soyuma prosesində kəskin azalır (**Şəkil 7.4.4a və 7.4.4b**). Bu isə, soyuma prosesində sistemin nisbətən daha çox dayanıqlı olmasını deməyə əsas verir. Eyni zamanda neytron seli ilə şüalanma nəticəsində sərbəst Gibbs enerjisinin ədədi qiyməti çox kiçik miqdarda azalır. Belə olan halda demək olar ki, neytron çevrilmələri nəticəsində yaranmış aşqar elementlər sistemin dayanıqlılığının çox az miqdarda artmasına səbəb olur.

7.5 Təcrübi nəticələrin müzakirəsi

Aparılan tədqiqatlardan məlum olmuşdur ki, temperaturun 1270K qiymətinə qədər nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri çox davamlı fiziki xassəyə malikdir. Nanomateriallara xarakterik xüsusi səth sahəsinin böyük olması nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində temperaturun 500K qiymətinə qədər DSC əyrilərində fərqli tip effektlərin müşahidə olunmasına səbəb olmuşdur. Fərqli termik işlənmə sürətləri ilə qızma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin termik aktivləşmə enerjilərinin qiymətləri seçilmiş nümunə üçün tipik qiymətə yaxın (120kJ/mol) alınmışdır. Müəyyən olunmuşdur ki, termik işlənmə sürətinin artması ilə aktivləşmə enerjisinin ədədi qiyməti azalır. Cihazın proqram təminatı ilə hesablanmış oksidləşmə dərəcəsinin temperaturun 1270K qiymətinə qədər praktik olaraq sıfıra yaxın olması tapılmışdır.

Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin xüsusi istilik tutumunun aşağı temperatur oblastında qızdırılma dərəcəsi ilə düz mütənəsb olması müəyyən edilmişdir. Aparılan tədqiqatlardan məlum olmuşdur ki, xüsusi istilik tutumunun

ədədi qiyməti aşağı temperatur oblastında 3C-SiC üçün xarakterik ($750 \text{ C} \cdot \text{kq}^{-1} \text{K}^{-1}$) qiymət ətrafında dəyişir. Nisbətən yüksək temperaturlarda xüsusi istilik tutumunun, sistemin entalpiya və entropiyasının ədədi qiymətinin mənfi olması aşkar olmuşdur ki, bu da uyğun temperaturlarda eksotermik effektlər ilə izah edilmişdir. Hesablanmış sərbəst Gibbs enerjisinə uyğun olaraq məlum olmuşdur ki, nisbətən aşağı temperaturlarda nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri spontandır və ya daha çox dayanıqlı hala malikdir. Müəyyən olunmuşdur ki, termik işlənmə sürətinin artması ilə sərbəst Gibbs enerjisinin ədədi qiyməti artır.

Neytronlarla şüalanmadan öncə və sonra aparılan müqayisəli analizlərdən məlum olmuşdur ki, ionlaşdırıcı şüalanmanın təsiri altında temperaturun təqribən 1300K qiymətinə qədər nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri çox davamlı fiziki xassəyə malikdir. Şüalanmadan öncə və sonra temperaturun təqribən $300\text{K} < T < 800\text{K}$ intervalında DSC ayrılarında bəzi effektlər müşahidə edilmişdir. Neytron selinin nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin aktivləşmə enerjisinə təsir etmədiyi aşkar olunmuşdur (aktivləşmə enerjisi tipik qiymətə yaxın 120kJ/mol alınmışdır). TGA və DTG analizlərindən məlum olmuşdur ki, $300\text{K} < T < 800\text{K}$ temperatur intervalında demək olar ki, şüalanmadan sonra oksidləşmə dərəcəsi sifira yaxındır. Baxmayaraq ki, temperaturun təqribən $800\text{K} < T < 1300\text{K}$ intervalında nanomaterialda az miqdarda oksidləşmə müşahidə edilmişdir.

Aparılan tədqiqatlardan məlum olmuşdur ki, neytron seli 3C-SiC nanokristallarının DSC və TG spektrlərinə xarakter cəhətdən təsir etmir. Bununla yanaşı, neytron seli istilik mübadiləsi zamanı ədədi qiymətin dəyişməsinə səbəb olur. Əlavə olaraq, neytron selinin təsiri nəticəsində oksidləşmə prosesi nisbətən ləng gedir. İşdə oksidləşmə prosesini ləngidən amil kimi $^{31}\text{Si} \rightarrow (\beta\text{-parçalanma}) ^{31}\text{P}$ nüvə çevrilmələri göstərilmişdir. Xüsusi istilik tutumunun ədədi qiymətinin 3C-SiC nanokristalları üçün xarakterik ($500\div 750 \text{ C} \cdot \text{kq}^{-1} \text{K}^{-1}$) qiymət ətrafında olması tapılmışdır. Həm qızma, həm də soyuma proseslərində, temperaturun 800K qiyməti ətrafında baş verən kənarçıxmaları bu materiallar üçün xarakterik Debay temperaturu ($\theta_D \sim 800\text{K}$) ilə əlaqələndirmək olar, baxmayaraq ki, Debay temperaturu haqqında daha dəqiq fikiri söyləmək üçün daha çox analitik təcrübələrə ehtiyac var.

Sərbəst Gibbs enerjisinin hesablanmış qiymətinə uyğun olaraq demək olar ki, nisbətən aşağı temperaturlarda 3C-SiC nanokristalları spontandır və ya nisbətən yüksək temperaturlarla müqayisədə daha çox dayanıqlıdır.

NƏTİCƏ

1. HRTEM analizləri ilə yüksək böyütmədə kristal qəfəsdə mövcud atomlar müşahidə olunmuş və 3C-SiC hissəciklərinin nanokristallik təbiəti müəyyən edilmişdir. Neytronlarla şüalanma intensivliyinin yüksək qiymətlərində (1.5×10^{18} neytron/sm²) nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin səthində qalınlığı ~ 3 nm olan amorf təbəqənin yaranması HRTEM təsvirləri ilə aşkar olunmuşdur. TEM və SEM analizlərindən məlum olmuşdur ki, neytron selinin təsiri nəticəsində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində nadir hallarda maksimum 70-80 nm tərtibində aqloremasiya mövcuddur. k_0 -INAA üsulu ilə nanomaterialın təmizlik dərəcəsinin 99.5+% olması və material daxilində mövcud qatışıq elementlərin məxsusi miqdarları təyin edilmişdir [123, 127].

2. 3C-SiC nanokristallarında mövcud silisium və karbon izotoplarında neytron selinin maksimum zəbtinə uyğun effektiv enerjisi qiymətləndirilmişdir. ²⁸Si, ²⁹Si və ³⁰Si izotoplarında udulma spektrlərində müşahidə olunan rezonans halların minimal enerjisi uyğun olaraq təqribən $5 \cdot 10^{-2}$ MeV, 10^{-2} MeV və 10^{-3} MeV kimi tapılmışdır. Neytronların enerjisinin 10^{-3} MeV qiymətindən başlayaraq ³⁰Si izotopunda neytron zəbti nəticəsində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində ³¹P izotopunun yaranması göstərilmişdir. 3C-SiC nanokristallarında digər (n, p), (n, α), (n, γ) və (n,n') çevrilmələrinin enerjisi Si və C izotopları üçün uyğun olaraq 3-7MeV və 10-20MeV aralıqlarında təyin edilmişdir [1, 3, 5].

3. Məlum olmuşdur ki, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərdə kristal strukturu dəyişmədən neytron transmutasiya üsulu ilə donor aşqarlar yaratmaq mümkündür. Şüalanmadan öncə və sonra 3C-SiC polipinin strukturunda heç bir dəyişikliyin olmaması SAED, EDP və rentgenstruktur analizləri ilə göstərilmişdir. 3C-SiC nanokristallarının strukturuna uyğun qəfəs parametrləri $a=b=c=4,377565$ və $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ kimi müəyyən olunmuşdur [129].

4. Neytron selinin təsiri ilə 3C-SiC nanokristallarında n – tip aşqarların yaranması nəticəsində RIC keçiriciliyinin meydana gəlməsi müşahidə olunmuşdur. Yaranan aşqar konsentrasiyasının artması nəticəsində 3C-SiC nanokristallarının elektrik keçiriciliyi ədədi qiymətcə ~ 5.5 dəfə artır. Hesablanmış elektrik aktivləşmə

enerjilərinin ədədi qiymətinin neytron selinin təsir müddətinin (başqa sözlə aşqar konsentrasiyasının) və tezliyin artması ilə azalması müşahidə edilmişdir [119].

5. Neytron seli ilə modifikasiya olunmuş nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin impedans spektrlərində rezonans hallar müşahidə olunmuş və relaksasiya müddətlərinin 3.5×10^{-2} saniyyədən 1.7×10^{-4} saniyyəyə qədər azalması aşkarlanmışdır. 3C-SiC nanokristallarının kompleks impedans spektroskopiyasından keçiriciliyin əsasən yarımkeçirici davranışı müəyyən edilmişdir. Tezliyin 0.1MHz, 1MHz və 2.5MHz qiymətlərinə uyğun olaraq $T_{MS} = 250K, 325K$ və $370K$ temperaturalarda 3C-SiC nanokristallarında metal-yarımkeçirici keçidi baş verir. Ümumi yanaşmada, $f \geq 0.1MHz$ tezlik və $T < T_{MS}$ temperatur intervallarında 3C-SiC nanokristallarında metallik davranış müşahidə olunmuşdur. Neytron çevrilmələri, rabitə sürüşməsi, defekt və ya əlavə yükdaşıyıcıların yaranması nəticəsində T_{MS} – in ədədi qiymətinin şüalanma müddətinə mütənasib olaraq azalması müəyyən edilmişdir [122, 126].

6. 3C-SiC nanokristallarının neytron seli ilə aşqarlanması nəticəsində xətti Volt – Amper xarakteristikasında bucaq meylinin dəyişməsi 3C-SiC nanokristallarının müqavimətinin neytronlarla aşqarlandıqdan sonra $4 M\Omega$ -dan $1 M\Omega$ -a qədər azalması ilə əlaqələndirilmişdir. Fovler–Nordheim asılılıqlarından şüalanmadan öncə və sonra 3C-SiC nanokristallarında birbaşa tunel keçidinin mövcudluğu və termal aktivliyin bütün tədiq olunan aralıqlarda dominant olması məlum olmuşdur [124].

7. Neytron seli ilə modifikasiya zamanı məlum olmuşdur ki, 3C-SiC nanohissəciklərinin aralıq səthdə polyarlaşması dispersiya hallarının yaranmasına səbəb olur. Tədqiqatlar nəticəsində müşahidə olunan bütün dielektrik asılılıqlarının Havriliak–Negami fenimoloji tənliklərinə uyğunluğu aşkarlanmış və ion polyarlaşmanın dominant olması tapılmışdır [120].

8. Neytron selinin təsiri nəticəsində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində n – tip aşqar elementlərin konsentrasiyasına uyğun g faktorun 2.006 qiymətində güclü siqnal müşahidə edilmişdir. Neytronlarla şüalanma müddətinin artması ilə, mövcud siqnal intensivliyində artma və yeni siqnallar müşahidə olunmuşdur. Neytronlarla şüalanma zamanı 3C-SiC nanokristallarında əlavə ^{29}Si və ya ^{13}C izotoplarının yaranması aşkar olunmuşdur. Neytronlarla şüalanma nəticəsində anizotropik və izotropik strukturlu Si

(ν_s^-) və C (ν_c^-) vakansiyalarının yaranması müəyyən edilmişdir. Neytronlarla şüalanmadan sonra g – faktorun fərqli qiymətlərində yeni yaranan paramaqnit mərkəzlərin ümumi sayı 3.5×10^{18} mərkəz/sm³ kimi tapılmışdır. Neytronlarla şüalanma nəticəsində yeni yaranmış sərbəst elektronlara uyğun mərkəzlərin (g – faktorun 2.006 qiymətində) sayının 2.7×10^{16} mərkəz/sm³ olması məlum olmuşdur ki, bunun da böyük əksəriyyəti n – tip aşqarların payına düşür [121].

9. 3C-SiC nanokristallarında tezliyin artması ilə, dielektrik itkiləri azalması və $f(\tan\delta) \sim f(T)$ asılılıqlarında temperaturun artması ilə dielektrik itkilərinin artması aşkarlanmışdır. $f(\tan\delta) \sim f(f)$ asılılığında tezliyin müəyyən qiymətlərində “əyilmə” halları və neytron seli ilə şüalanmaya mütənasib olaraq sürüşmələr müşahidə edilmişdir ki, bunun da metal-yarımkəçirici keçidi ilə əlaqəli olması məlum olmuşdur. Hər iki, $f(\tan\delta) \sim f(f)$ və $f(\tan\delta) \sim f(T)$ asılılıqlarında neytronlara şüalanmadan sonra dielektrik itkilərinin ədədi qiymətində kiçik miqdarda artma müşahidə edilmişdir [125].

10. 3C-SiC nanokristallarının termal analizlərindən məlum olmuşdur ki, şüalanmadan öncə, temperaturun 1270K qiymətinə qədər nanohissəcikləri çox böyük termik davamlığa malikdir. Şüalanmadan öncə 3C-SiC nanokristallarında temperaturun təqribən $800K < T < 1270K$ intervalında çox az miqdarda oksidləşmə müşahidə edilmişdir ki, bunun da neytron seli ilə şüalanmadan sonra yeni izotopların təsiri ilə azalması məlum olmuşdur. 3C-SiC nanokristalları üçün xarakterik Debay temperaturunun 1200K – dən 800 K - ə qədər azalması məlum olmuşdur. DSC spektroskopiyası ilə, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin şüalanmadan öncə və sonra termal aktivləşmə enerjisinin 120kJ/mol və xüsusi istilik tutumunun $500 \div 750 \text{ C} \cdot \text{kq}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ qiyməti ətrafında olması məlum olmuşdur [7, 9].

İŞLƏRİN SİYAHISI

1. Huseynov, E., Anze, J., Luka, S. Temperature vs. impedance dependencies of neutron-irradiated nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // *Applied Physics A*, – 2019, 125, – p. 91-98.
2. Huseynov, E., Anze, J. EPR spectroscopic studies of neutron-irradiated nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // *Silicon*, – 2019, 11, – p. 21-27.
3. Huseynov, E.M. Current-voltage characteristics of neutron irradiated nanocrystalline silicon carbide (3CSiC) // *Physica B: Condensed Matter*, – 2018, 544, – p. 23-27.
4. Huseynov, E.M. Electrical impedance spectroscopy of neutron-irradiated nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // *Applied Physics A*, – 2018, 124, – p. 191-198.
5. Huseynov, E.M. Neutron irradiation, amorphous transformation and agglomeration effects on the permittivity of nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // *NANO*, – 2018, 13 (3), – p. 1830002.
6. Huseynov, E.M. Dielectric loss of neutron-irradiated nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) as a function of frequency and temperature // *Solid State Sciences*, – 2018, 84, – p. 44-50.
7. Huseynov, E.M. Neutron irradiation effects on the temperature dependencies of electrical conductivity of silicon carbide (3C-SiC) nanoparticles // *Silicon*, – 2018, 10, – p. 995–1001.
8. Huseynov, E.M. Neutron activation analysis of 3C-SiC nanoparticles under the neutron flux // *Journal of Radiation Researches*, – 2018, 5 (1), – p. 20-26.
9. Hüseynov, E.M. Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərində neytron zəbtinin tədqiqi // – Bakı: *Azerbaijan Journal of Physics*, – 2018, 24 (AZ1), – s. 3-7.
10. Hüseynov, E.M. Neytron selinin təsiri ilə nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərində (n, p) və (n, α) çevrilmələri // – Bakı: AMEA – nın Xəbərləri, Fizika-

texnika və riyaziyyat elmləri seriyası, fizika və astronomiya, – 2018, 38 (2), – s. 15-22.

11. Hüseynov, E.M., Əliyeva, Ü.S., Mirzəyev, M.N. Silisium karbid (3C-SiC) nanokristallarına neytron selinin təsirinin DSC spektroskopiyası ilə öyrənilməsi // – Bakı: Bakı Universitetinin Xəbərləri, Fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, – 2018, № 3, – s. 160-170.

12. Hüseynov, E.M. Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərində neytron selinin təsiri ilə defekt hallarının yaranması // – Bakı: Azerbaijan Journal of Physics, – 2018, 24 (AZ2), – s.3-10.

13. Hüseynov, E.M., Əliyeva, Ü.S., Mirzəyev, M.N. Neytron selinin təsiri altında nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin DTA, TGA və DTG spektroskopik analizləri // – Bakı: AMEA – nın Xəbərləri, Fizika-texnika və riyaziyyat elmləri seriyası, fizika və astronomiya, – 2018, 38 (5), – s. 65-71.

14. Huseynov, E., Anze, J. Trace elements study of high purity nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) using k_0 -INAA method // Physica B: Condensed Matter, – 2017, 517, – p. 30–34.

15. Huseynov, E.M. Permittivity-frequency dependencies study of neutron-irradiated nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // NANO, – 2017, 12 (6), – p. 1750068.

16. Huseynov, E.M. Investigation of the agglomeration and amorphous transformation effects of neutron irradiation on the nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) using TEM and SEM methods // Physica B: Condensed Matter, – 2017, 510, – p. 99–103 .

17. Huseynov, E., Garibov, A. Effects of neutron flux on the temperature dependencies of permittivity of 3C-SiC nanoparticles // Silicon, – 2017, 9 (5), – p. 753–759.

18. Huseynov, E.M. EDP study of nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) under the neutron irradiation // Journal of Radiation Researches, – 2017, 4 (2), – p. 24-30.

19. Hüseynov, E.M. Nanokristallik silisium karbid ($3C-SiC$) hissəciklərindən neytron selinin səpilməsi // – Bakı: Azerbaijan Journal of Physics, – 2017, 23 (AZ2), – s. 24-32.
20. Hüseynov, E.M., Mirzəyev, M.N. Nanokristallik silisium karbid ($3C-SiC$) hissəciklərinin termik parametrlərinin DSC metodu ilə tədqiqi // – Bakı: Bakı Universitetinin Xəbərləri, Fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, – 2017, № 4, – s. 176-185.
21. Hüseynov, E.M., Mirzəyev M.N. DTA, TGA və DTG metodları ilə nanokristallik silisium karbid ($3C-SiC$) hissəciklərinin termofiziki parametrlərinin öyrənilməsi // – Bakı: AMEA – nın Xəbərləri, Fizika-texnika və riyaziyyat elmləri seriyası, fizika və astronomiya, 2017, 37 (5), s. 48-57.
22. Huseynov, E. Neutron irradiation and frequency effects on the electrical conductivity of nanocrystalline silicon carbide ($3C-SiC$) // Physics Letters A, – 2016, 380, – p. 3086-3091.
23. Hüseynov, E.M., Qəribov, A.A. TRIGA Mark II tipli tədqiqat nüvə reaktorunda neytron selinin təsiri ilə $3C-SiC$ nanohissəciklərinin radioaktivlik tədqiqi // – Bakı: Azerbaijan Journal of Physics, 2016, 22 (AZ3), s. 3-9.
24. Huseynov, E.M. Effects of neutron irradiation on the frequency dependencies of electrical conductivity of nanocrystalline $3C-SiC$ particles // DPG-Frühjahrstagung und EPS-CMD27, Technische Universität Berlin, Deutsche Physikalische Gesellschaft e.V., Berlin, Germany, – 2018, – p.137.
25. Huseynov, E.M. Impedance study of neutron-irradiated nanocrystalline silicon carbide ($3C-SiC$) as a function of temperature // 27th International Conference Nuclear Energy for New Europe, Slovenia, – 2018, – p.95-96.
26. Huseynov, E.M. Nanoscopic study of neutron irradiated nanocrystalline silicon carbide ($3C-SiC$) particles // 2nd International congress on semiconductor materials and devices, Turkey, – 2018, – p. 120-121.
27. Hüseynov, E. Nanokristallik silisium karbid ($3C-SiC$) hissəciklərində neytronlarla şüalanma zamanı (n, p) və (n, α) çevrilmələrinin limit enerjiləri //

Ümummilli lider Heydər Əliyevin anadan olmasının 95-ci ildönümünə həsr olunmuş Gənc Tədqiqatçıların II Beynəlxalq Elmi Konfransı, Bakı, – 2018, – s. 67-69.

28. Huseynov, E.M. Frequency – electrical impedance dependencies of neutron irradiated nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // XXVII International Materials Research Congress, F2. Advances in functional semiconducting materials - IMRC2018, Cancun, Mexico, – 2018, – p. 2879-2880.

29. Huseynov, E.M. Neutron irradiation effects on the dielectric loss of nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // VIII International Conference, Semipalatinsk Test Site: Legacy and Prospects for Scientific and Technical Potential Development, Kurchatov, Republic of Kazakhstan, – 2018, – p. 161-162.

30. Huseynov, E.M. Permittivity vs. temperature dependencies of neutron irradiated nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // XXI Simposio Chileno de Fisica Antofagasta, SOCHIFI, Area H: Materia Condensada Fis. Estado Solido, Chile, – 2018, – p. SPH04.1-2.

31. Huseynov, E.M. Temperature - electrical conductivity dependencies of silicon carbide (3C-SiC) nanoparticles exposed to neutron irradiation // International scientific conference of students and young scientists "Lomonosov-2018", Moscow, – 2018, – p. 34.14.1-3.

32. Huseynov, E.M. Neutron activation analysis of high purity nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) particles // 11th International Conference «Nuclear and radiation physics», Almaty, Republic of Kazakhstan, – 2017, – p. 374.

33. Huseynov, E. Investigation of the Paramagnetic Centers of Neutron - Irradiated Nanocrystalline Silicon Carbide (3C-SiC) Particles // 26th International Conference Nuclear Energy for New Europe, Slovenia, – 2017, – p. 55.

34. Huseynov, E. Frequency dependencies of electrical conductivity of silicon nanoparticles exposed to neutron flux // 25th International Conference Nuclear Energy for New Europe, Slovenia, – 2016, – p. 42-43.

35. Huseynov E.M. Investigation of thermal parameters of nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) particles using DSC method // I International scientific conference of young researchers, Baku Engineering University, Baku, – 2017, – p. 39.

İSTİFADƏ EDİLMİŞ ƏDƏBİYYAT SİYAHISI

1. Hüseynov, E.M. Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərində neytron zəbtinin tədqiqi // – Bakı: Azerbaijan Journal of Physics, – 2018. № 1, – s. 3-7.
2. Hüseynov, E.M. Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərində neytron selinin təsiri ilə defekt hallarının yaranması // – Bakı: Azerbaijan Journal of Physics, – 2018. № 2, – s. 3-10.
3. Hüseynov, E.M. Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərindən neytron selinin səpilməsi // – Bakı: Azerbaijan Journal of Physics, – 2017. № 2, – s. 24-32.
4. Hüseynov E.M. Neytron selinin nano SiO₂ – nin elektrofiziki xassələrinə təsiri və radioaktiv çevrilmə prosesləri: / fizika üzrə fəlsəfə doktoru dissertasiyası / – Bakı, 2014. – 152 s.
5. Hüseynov, E.M. Neytron selinin təsiri ilə nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərində (n, p) və (n, α) çevrilmələri // – Bakı: AMEA – nın Xəbərləri, Fizika-texnika və riyaziyyat elmləri seriyası, fizika və astronomiya, – 2018. № 2, – s. 15-22.
6. Hüseynov, E.M., Əliyeva, Ü.S., Mirzəyev, M.N. Neytron selinin təsiri altında nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin DTA, TGA və DTG spektroskopik analizləri // – Bakı: AMEA – nın Xəbərləri, Fizika-texnika və riyaziyyat elmləri seriyası, fizika və astronomiya, – 2018. № 5, – s. 65-71.
7. Hüseynov, E.M., Əliyeva, Ü.S., Mirzəyev, M.N. Silisium karbid (3C-SiC) nanokristallarına neytron selinin təsirinin DSC spektroskopiyası ilə öyrənilməsi // – Bakı: Bakı Universitetinin Xəbərləri, Fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, – 2018. № 3, – s.160-170.
8. Hüseynov, E.M., Qəribov, A.A. TRIGA Mark II tipli tədqiqat nüvə reaktorunda neytron selinin təsiri ilə 3C-SiC nanohissəciklərinin radioaktivlik tədqiqi // – Bakı: Azerbaijan Journal of Physics, – 2016. № 3, – s. 3-9.
9. Hüseynov, E.M., Mirzəyev, M.N. DTA, TGA və DTG metodları ilə

nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin termofiziki parametrlərinin öyrənilməsi // – Bakı: AMEA – nın Xəbərləri, Fizika-texnika və riyaziyyat elmləri seriyası, fizika və astronomiya, – 2017. № 5, – s. 48-57.

10. Hüseynov, E.M., Mirzəyev, M.N. Nanokristallik silisium karbid (3C-SiC) hissəciklərinin termik parametrlərinin DSC metodu ilə tədqiqi // – Bakı: Bakı Universitetinin Xəbərləri, Fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, – 2017. № 4, – s. 176-185.

11. Afzaal, Q. A large pseudo-Hall effect in n-type 3C-SiC (1 0 0) and its dependence on crystallographic orientation for stress sensing applications / Q. Afzaal, D. Toan, J. Mohsen [et al.] // *Materials Letters*, – 2018, 213, – p. 11-14.

12. Agarwal, S. Multiscale characterization of irradiation behaviour of ion-irradiated SiC/SiC composites / S. Agarwal, G. Duscher, Y. Zhao [et al.] // *Acta Materialia*, – 2018, 161, – p. 207-220.

13. Aiming, B. Microstructure, properties and formation mechanism of SiO₂/SiC nano-coating onto carbon fiber by non-electrode plasma electrolysis / B. Aiming, Z. Yuping, Z. Yongfu [et al.] // *Journal of Alloys and Compounds*, – 2019, 773, – p.346-351.

14. Ajay, K. Kadiyala, J. Poly (ether ether ketone) - Silicon carbide composite adhesives for elevated temperature applications of stainless steel joints // *Composites Science and Technology*, – 2018, 155, – p. 177-188.

15. Akifumi, A. Ultrafast dynamics of photoinduced semiconductor-to-metal transition in the optical switching nano-oxide Ti₃O₅ / A. Akifumi, W. Hiroshi, T. Hiroko [et al.] // *Phys. Rev. B*, – 2014, 90, – p. 014303.

16. Akimori, T., Yoshikazu, I. Current density–voltage and admittance characteristics of hydrogenated nanocrystalline cubic SiC/crystalline Si heterojunction diodes prepared with varying H₂ gas flow rates // *Solid-State Electronics*, – 2015, 104, – p. 33-38.

17. Alberto, A.S., John, T.W., Agustin, D.F. Impedance behavior of nanoporous SiC // *Electrochimica Acta*, – 2006, 51, – p. 1656–1663.

18. Allen, B. J. Neutron radiative capture: Neutron physics and nuclear data in

science and technology / B. J. Allen, I. Bergqvist, R. E. Chrien – England, Pergamon Press Ltd. Oxford, – 1984. – 278 p.

19. Allen, S. T. Recent Progress in SiC Microwave MESFETs / S. T. Allen, S. T. Sheppard, W. L. Pribble [et al.] // *Wide-Bandgap Semiconductors for High-Power*, – 1999, 572, – p. 15–22.

20. Ambrozic, K., Zerovnik, G., Snoj, L. Computational analysis of the dose rates at JSI TRIGA reactor irradiation facilities // *Applied Radiation and Isotopes*, – 2017, 130, – p. 140-152.

21. Amit, S., Pipit, F., Dang-Hyok, Y. Fabrication of SiCf/SiC and integrated assemblies for nuclear reactor applications // *Ceramics International*, – 2017, 43, –p. 17211-17215.

22. Andreja, P. TRIGLAV: A program package for TRIGA reactor calculations / P. Andreja, Z. Tomaz, R. Matjaz [et al.] // *Nuclear Engineering and Design*, – 2017, 318, – p. 24-34.

23. Angelici, V. Oxidation at high temperatures in steam atmosphere and quench of silicon carbide composites for nuclear application / V. Angelici, M. Grosse, U. Stegmaier [et al.] // *Nuclear Engineering and Design*, – 2015, 295, – p. 468–478.

24. Anna, K., Jacek, M. Effect of carbon nanoparticle reinforcement on mechanical and thermal properties of silicon carbide ceramics // *Ceramics International*, – 2018, 44 (9), – p. 10273-10280.

25. Anzalone, R. Interface state density evaluation of high quality hetero-epitaxial 3C-SiC(0 0 1) for high-power MOSFET applications / R. Anzalone, S. Privitera, M. Camarda [et al.] // *Materials Science and Engineering: B*, – 2015, 198, – p. 14-19.

26. Arai, M. Experimental techniques // *Experimental Methods in the Physical Sciences*, – 2013, 44, – p. 245-316.

27. Arbuzov, A.B., Kopylova, T.V. Relativization of the Sommerfeld-Gamow-Sakharov factor // *Nuclear Physics B - Proceedings Supplements*, – 2012, 225, – p. 22-26.

28. Asghar, M. Study of deep level defects in doped and semi-insulating n-6H-SiC epilayers grown by sublimation method / M. Asghar, F. Iqbal, S. Faraz [et al.] // *Physica B: Condensed Matter*, – 2012, 407, – p. 3038-3040.
29. Ashith, V.K., Gowrish, R.K. A study of microstructural properties and quantum size effect in SILAR deposited nano-crystalline CdS thin films // *Thin Solid Films*, – 2016, 616, – p. 197-203.
30. Atkins, P. *Physical Chemistry for the Life Sciences*. / P. Atkins, J. Paula – New York: Oxford University Press, – 2011. – 618 p.
31. Atsushi, N., Kazuhide, K., Tetsuya, A. Current-voltage characteristics of p - In Ga N / n - Ga N vertical conducting diodes on n + - Si C substrates // *Applied Physics Letters*, – 2005, 87, – p. 233505.
32. Bagraev, N. T. Electrically Detected Electron Paramagnetic Resonance of Point Centers in 6HSiC Nanostructures / N. T. Bagraev, D. S. Gets, E. N. Kalabukhova [et al.] // *Semiconductors*, – 2014, 48 (11), – p. 1467–1480.
33. Baillet, J. Surface damage on polycrystalline β -SiC by xenon ion irradiation at high fluence / J. Baillet, S. Gavarini, N. Millard-Pinard [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2018, 503, – p. 140-150.
34. Baliga, B. J. *Power Semiconductor Devices*. – Boston: PWS Publishing Company, – 1996. – 622 p.
35. Baranov, P. G. Probing of the Shallow Donor and Acceptor Wave Functions in Silicon Carbide and Silicon through an EPR Study of Crystals with a Modified Isotopic Composition / P. G. Baranov, B. Y. Ber, O. N. Godisov [et al.] // *Physics of the Solid State*, – 2005, 47 (12), – p. 2219–2232.
36. Baranov, P. G., Ilyin, I. V., Mokhov, E. N. EPR study of shallow and deep phosphorous centers in 6H-SiC // *Physical Review B*, – 2002, 66, – p. 165206.
37. Bátor, G. Determination of cesium transfer factors by instrumental neutron activation analysis / G. Bátor, A. Bednár, T.J. Glover [et al.] // *Journal of Environmental Radioactivity*, – 2018, 187, – p. 16-21.
38. Brauer, G. Characterization of a SiC/SiC composite by X-ray diffraction, atomic force microscopy and positron spectroscopies / G. Brauer, W. Anwand, F.

- Eichhorn [et al.] // *Applied Surface Science*, – 2006, 252, – p. 3342-3351.
39. Brigdena, C.T., Farnana, I., Hania, P.R. Multi-nuclear NMR study of polytype and defect distribution in neutron irradiated silicon carbide // *Journal of Nuclear Materials*, – 2014, 444, – p. 92-100.
40. Brudnyia, V.N., Kosobutsky, A.V. Electronic properties of SiC polytypes: Charge neutrality level and interfacial barrier heights // *Superlattices and Microstructures*, – 2017, 111, – p. 499-505.
41. Bun, T. Radiation induced changes in electrical conductivity of chemical vapor deposited silicon carbides under fast neutron and gamma-ray irradiations / T. Bun, S. Tatsuo, N. Shinji [et al.] // *Fusion Engineering and Design*, – 2011, 86, – p.2487–2490.
42. Butler, J. P., Santry, D. C. Statistical-Theory Analysis of the $Mg^{24}(n,p)Na^{24}$ and the $Al^{27}(n,\alpha)Na^{24}$ Reactions // *Phys. Rev.*, – 1966, 152, – p. 1034.
43. Calame, J. P., Abe, D. K., Levush, B. Variable temperature measurements of the complex dielectric permittivity of lossy AlN–SiC composites from 26.5–40 GHz // *J. Appl. Phys.*, – 2001, 89, – p. 5618.
44. Can, A., McLachlan, D.S., Sauti, G., Herrmann, M. Relationships between microstructure and electrical properties of liquid-phase sintered silicon carbide materials using impedance spectroscopy // *Journal of the European Ceramic Society*, – 2007, 27, – p. 1361–1363.
45. Cantin, J. L. Identification of the Carbon Dangling Bond Center at the 4H-SiC=SiO₂ Interface by an EPR Study in Oxidized Porous SiC / J. L. Cantin, H. J. Bardeleben, Y. Shishkin [et al.] // *Phys. Rev. Lett.*, – 2004, 92, – p. 015502.
46. Carl, N. *Physics Handbook for science and engineering* / N. Carl, Ö. Jonny – Lund, Sweden, – 2006. – 504 p.
47. Catellani, A., Galli, G., Gygi, F. Reconstruction and thermal stability of the cubic SiC (001) surfaces // *Phys Rev Lett*, – 1996, 77, – p. 5090–5093.
48. Chakarova, R., Pazsit, I. Fluctuations and correlations in sputtering and defect generation in collision cascades in Si // *Nucl. Instrum. and Meth. B*, – 2000, 164&165, – p. 460 – 470.

49. Chang-An, W. Complex Impedance Analysis on the Orientation Effect of Whiskers in Oriented Silicon Carbide Whisker/Silicon Nitride Composites / W. Chang-An, H. Yong, X. Zhipeng [et al.] // *Journal of the American Ceramic Society*, – 2004, 83, –p. 2689–2692.
50. Chanukorn, T. A DFT investigation on group 8B transition metal-doped silicon carbide nanotubes for hydrogen storage application / T. Chanukorn, R. Vithaya, T. Sarawut [et al.] // *Applied Surface Science*, – 2018, 439, – p. 494-505.
51. Chao, X. Enhanced thermal conductivity of silicon carbide nanowires (SiCw)/epoxy resin composite with segregated structure / X. Chao, C. Lu, T. Yunlu [et al.] // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, – 2019, 116, – p. 98-105.
52. Chaoyang, K. In situ study on the electronic structure of graphene grown on 6H-SiC with synchrotron radiation photoelectron spectroscopy / K. Chaoyang, T. Jun, L. Limin [et al.] // *Applied Surface Science*, – 2012, 258, – p. 2187-2191.
53. Charles, E.L. Scanning Electron Microscopy, X-Ray Microanalysis, and Analytical Electron Microscopy / E.L. Charles, E.N. Dale, I.G. Joseph – New York: Plenum Press, – 1990. – 414 p.
54. Charpentier, L. Chemical degradation of SiC/SiC composite for the cladding of gas-cooled fast reactor in case of severe accident scenarios / L. Charpentier, K. Dawi, M. Balat-Pichelin [et al.] // *Corrosion Science*, – 2012, 59, – p. 127-135.
55. Charpentier, S., Kassiba, A., Emery, J. Investigation of the paramagnetic centres and electronic properties of silicon carbide nanomaterials // *J. Phys. Condens. Matter*, – 1999, 11, – p. 4887–4897.
56. Charpentier, S. EPR Investigations of SiC and SiOC Nanometric Powders / S. Charpentier, A. Kassiba, S. Fusil [et al.] // *Appl. Magn. Reson.*, – 1997, 12, – p. 255-267.
57. Chen, X. D. Low Energy Electron Irradiation Induced Deep Level Defects in 6H-SiC: The Implication for the Microstructure of the Deep Levels E1/E2 / X. D. Chen, C. L. Yang, M. Gong [et al.] // *Phys. Rev. Lett.*, – 2004, 92, – p. 125504.
58. Choyke, W.J. Silicon carbide, recent major advances / W.J. Choyke, H.

Matsunami, G. Pensl – Berlin: Springer-Verlag – 2004. – 910 p.

59. Chun, C.Y. , Yiu-Wing, M. Thermodynamics at the nanoscale: A new approach to the investigation of unique physicochemical properties of nanomaterials // *Materials Science and Engineering R*, – 2014, 79, – p. 1–40.

60. Coufal, O., Sezemsky, P., Zivny, O. Database system of thermodynamic properties of individual substances at high temperatures // *J. Phys. D: Appl. Phys.*, – 2005, 38, – p. 1265.

61. Dagmara, S. Electric conductivity percolation in naturally dehydrating, lightly wetted, hydrophilic fumed silica powder / S. Dagmara, D. Daniel, G. Urszula [et al.] // *Phys. Rev. E*, – 2013, 87, – p. 062404.

62. Dale, E.N. *Advanced Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis* / E.N. Dale, C.J. David – New York: Springer, – 1986. – 464 p.

63. Dariya, V.S. EPR study of conduction electrons in heavily doped n-type 4H SiC / V.S. Dariya, N.K. Ekaterina, P. Andreas [et al.] // *Phys. Status Solidi B*, – 2011, 248 (12), – p. 2950–2956.

64. David, B.W. *Transmission Electron Microscopy, A Textbook for Materials Science* / B.W. David, C.C. Barry – New York: Springer-Verlag US, – 2009. – 780 p.

65. David, L. *Neutron Scattering* / L. David, S. Kurt – London: Academic Press. Inc, – 1987. – 608 p.

66. David, S.M., Rosario, A.G. Interpreting impedance response of silicon carbide whisker/alumina composites through microstructural simulation // *Journal of the American Ceramic Society*, – 2006, 89, – p. 538–543.

67. Deck, C. Fabrication of SiC–SiC composites for fuel cladding in advanced reactor designs / C. Deck, H. Khalifa, B. Sammuli [et al.] // *Progress in Nuclear Energy*, – 2012, 57, – p. 38-45.

68. Derycke, V. Carbon atomic chain formation on the b-SiC(100) surface by controlled sp² sp³ transformation / V. Derycke, P. Soukiassian, A. Mayne [et al.] // *Phys Rev Lett*, – 1998, 81, – p. 5868–5871.

69. Dhahbi, T. Above room temperature complex impedance analysis of properties of La_{0.33}Sr_{0.67}Mn_{0.33}Ti_{0.67}O_{3±δ} perovskite / T. Dhahbi, H. Nejeh, H.

- Sobhi [et al.] // *Phase Transitions - A Multinational Journal*, – 2017, 90 (6), – p. 1-9.
70. Dick, B., Signe, K. Hill's nano-thermodynamics is equivalent with Gibbs' thermodynamics for surfaces of constant curvatures // *Chemical Physics Letters*, – 2018, 707, – p. 40-43.
71. Dimitrov, D. B. Current-voltage characteristics of porous-silicon layers // *Phys. Rev. B*, – 1995, 51, – p. 1562.
72. Dong-Lin, Z., Fa, L., Wan-Cheng, Z. Microwave absorbing property and complex permittivity of nano SiC particles doped with nitrogen // *Journal of Alloys and Compounds*, – 2010, 490, – p. 190–194.
73. Dong-Lin, Z., Hongsheng, Z., Wancheng, Z. Dielectric properties of nano Si=C=N composite powder and nano SiC powder at high frequencies // *Physica E*, – 2001, 9, – p. 679-685.
74. Douglas, M.P., Bucaro, J. A., Xiao, L. Quantum statistical effects in nano-oscillator arrays // *Phys. Rev. B*, – 2006, 73, – p. 165314.
75. Duo, X. Fabrication of a versatile lignin-based nano-trap for heavy metal ion capture and bacterial inhibition / X. Duo, D. Wei, Z. Jiubing [et al.] // *Chemical Engineering Journal*, – 2019, 358, – p. 310-320.
76. Elaa, O., Sobhi, H., Rhouma, O. Frequency and temperature dependence of conductance, impedance and electrical modulus studies of Ni_{0.6}Cu_{0.4}Fe₂O₄ spinel ferrite // *Journal of Alloys and Compounds*, – 2017, 726, –p.187-194
77. Emma, C. *Differential Scanning Calorimetry, Applications in Fat and Oil Technology* – London: Taylor & Francis Group, – 2015. – 296 p.
78. Erste, A. Contributions of distinctive dynamic processes to dielectric response of a relaxorlike reduced poly(vinylidene fluoride-trifluoroethylene) copolymer / A. Erste, C. Filipic, A. Levstik [et al.] // *Physical Review B*, – 2010, 81, – p. 214103.
79. Erste, A. Stable dielectric response in lead-free relaxor K_{0.5}Na_{0.5}NbO₃-SrTiO₃ thin films / A. Erste, A. Kupec, B. Kmet [et al.] // *Journal of Advanced Dielectrics*, – 2014, 4, – p. 1450012.
80. Erste, A. Investigations and separation of various contributions to dielectric

response of advanced ceramic and polymeric materials: / PhD on physics, dis. / Ljubljana, – 2012. – 116 p.

81. Eswar, P.K., Ramesh, K.T. Hardness and mechanical anisotropy of hexagonal SiC single crystal polytypes // *Journal of Alloys and Compounds*, – 2019, 770, – p. 158-165.

82. Evan, S. H. Kang, E.K. Multi-barrier field-emission behavior in PBTTT thin films at low temperatures // *Scientific Reports*, – 2015, 5, – p.8396.

83. Ewa, G., Paweł, K., Sabina, D. Nano-quantum size effect in sol–gel derived mesoporous titania layers deposited on soda-lime glass substrate // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, – 2014, 62, – p. 128-135.

84. Fabrizio, R. Emerging trends in wide band gap semiconductors (SiC and GaN) technology for power devices / R. Fabrizio, F. Patrick, G. Giuseppe [et al.] // *Microelectronic Engineering*, – 2018, 187 (188), – p. 66-77.

85. Fan, J., Chu, P. Group IV nanoparticles: synthesis, properties, and biological applications // *Small*, – 2010, 6, – p. 2080–2098.

86. Felix, C.T. Grain-boundary type and distribution in silicon carbide coatings and wafers / C.T. Felix, L.H. Eddie, C.W. Ross [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2018, 500, – p. 176-183.

87. Filipescu, M. Silicon carbide thin films as nuclear ceramics grown by laser ablation / M. Filipescu, G. Velisa, V. Ion [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2011, 416, – p. 18-21.

88. Filliatre, P., Jammes, C., Jazbec A. Experimental assessment of the kinetic parameters of the JSI TRIGA reactor // *Annals of Nuclear Energy*, – 2015, 83, – p. 236–245.

89. Flynn, J.H. A general differential technique for the determination of parameters for $d(a)/dt = f(a)A\exp(-E/RT)$ Energy of activation, preexponential factor and order of reaction (when applicable) // *Journal of Thermal Analysis*, – 1991, 37, – p. 293.

90. Friedland, E., Van der Berg, N.G., Malherbe, J.B. Investigation of silver and iodine transport through silicon carbide layers prepared for nuclear fuel element

- cladding // *Journal of Nuclear Materials*, – 2011, 410, – p. 24-31.
91. Gamez, L. PKA energy spectra and primary damage identification in amorphous silica under different neutron energy spectra / L. Gamez, M. Velarde, F. Mota [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2007, 367 (370), – p. 282–285.
92. Gareth, R.E. Quantitative EPR / R.E. Gareth, S.E. Sandra, P.B. David – New York: Springer, – 2010. – 186 p.
93. Gary, H. Properties of silicon carbide. Institution of Electrical Engineers – London: Inspec press, – 1995. – 298 p.
94. Gasper, Z. Validation of the neutron and gamma fields in the JSI TRIGA reactor using in-core fission and ionization chambers / Z. Gasper, K. Tanja, R. Vladimir [et al.] // *Applied Radiation and Isotopes*, – 2015, 96, – p. 27-35.
95. George, N. Evaluation of neutron irradiated silicon carbide and silicon carbide composites / N. George, L. Lance, H. Tatsuya [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2007, 371, – p. 76–89.
96. Gilbert, M.R., Marian, J., Sublet, J.-Ch. Energy spectra of primary knock-on atoms under neutron irradiation // *Journal of Nuclear Materials*, – 2015, 467, – p.121-134.
97. Gizem, N. Interplay of annealing temperature and doping in hole selective rear contacts based on silicon-rich silicon-carbide thin films / N. Gizem, S. Josua, W. Philippe [et al.] // *Solar Energy Materials and Solar Cells*, – 2017, 173, – p. 18-24.
98. Goela, J. S. , Burns, L. E., and Taylor, R. L. Transparent chemical vapor deposited β -SiC // *Appl. Phys. Lett.*, – 1994, 64, – p. 131.
99. Goodrich, A.E. On Carborundum // *Chemical news*, – 1893, 68 – p.179-186.
100. Guanglu, J., Bing, L., Jufan, Z. Influence of SiC surface defects on materials removal in atmospheric pressure plasma polishing // *Computational Materials Science*, – 2018, 146, – p. 26–35.
101. Guijin, Y. Defect-induced room temperature ferromagnetism in silicon carbide nanosheets / Y. Guijin, W. Yanyan, M. Shuyi [et al.] // *Superlattices and Microstructures*, – 2018, 119, – p. 19-24.
102. Haitao, L., Hao, T., Haifeng, C. Dielectric properties of SiC fiber-reinforced

- SiC matrix composites in the temperature range from 25 to 700 °C at frequencies between 8.2 and 18 GHz // *Journal of Nuclear Materials*, – 2013, 432, – p. 57–60.
103. Hans, M. The importance of a reliable grouping – Neutron activation analysis (NAA) data of Mycenaean pottery sherds re-evaluated with the Bonn filter method // *Journal of Archaeological Science*, – 2012, 39, – p. 704–707.
104. Hans, P.G. *Nuclear Reactions*. – Berlin: Springer-Verlag Heidelberg, – 2014. – 374 p.
105. Hara, S. Additional dimer-row structure of 3CSiC(001) surfaces observed by scanning tunneling microscopy / S. Hara, S. Misawa, S. Yoshida [et al.] // *Phys Rev B*, – 1994, 50, – p. 4548–4553.
106. Harry, J. Whitlow, S. Nakagawa T. Low-energy primary knock on atom damage distributions near MeV proton beams focused to nanometre dimensions // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, – 2007, 260, – p. 468–473.
107. Haubold, H. J. On Nuclear Reaction Rate Theory // *Annalen der Physik*, – 1984, 41 (7), – p. 380-396.
108. Henry, R., Tiselj, I., Snoj, L. Analysis of JSI TRIGA MARK II reactor physical parameters calculated with TRIPOLI and MCNP // *Applied Radiation and Isotopes*, – 2015, 97, – p. 140-148.
109. Hills, R., Kusmartseva, A., Kusmartsev, F. V. Current-voltage characteristics of Weyl semimetal semiconducting devices, Veselago lenses, and hyperbolic Dirac phase // *Phys. Rev. B*, – 2017, 95, – p. 214103.
110. Himanshu, A.K., Gupta, D.C., Sinha, T.P. Dielectric study of Ba(Zn_{1/3}Nb_{2/3})O₃ at low temperature // *Indian Journal of Pure & Applied Physics*, – 2006, 44 (5), – p. 391-397.
111. Hirofumi, S. Micro milling tool made of nano-polycrystalline diamond for precision cutting of SiC / S. Hirofumi, O. Mutsumi, A. Wataru [et al.] // *CIRP Annals*, – 2017, 66 (1), – p. 93-96.
112. Hodgson, E.R. Radiation induced modification of electrical conductivity for three types of SiC / E.R. Hodgson, M. Malo, J. Manzano [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2011, 417, – p. 421–424.

113. Hohne, G.W. Differential Scanning Calorimetry / G.W. Hohne, W.F. Hemminger, H.-J. Flammersheim – Berlin: Springer-Verlag, – 2003. – 298 p.
114. Hourri, A., Bose, T.K., Thoen, J. Effect of silica aerosil dispersions on the dielectric properties of a nematic liquid crystal // *Physical Review E*, – 2001, 63, – p. 051702.
115. Hsun-Chi, L., Wei-Sheng, C. Recovery of silicon carbide from waste silicon slurry by using flotation // *Energy Procedia*, – 2017, 136, – p. 53-59.
116. Huang, H. Mitigation of He embrittlement and swelling in nickel by dispersed SiC nanoparticles / H. Huang, W. Zhang, M. De Los Reyes [et al.] // *Materials & Design*, – 2016, 90, – p. 359-363.
117. Hui-Mei, Y. Studies on the thermal stability of nano-SiC powder with excessive free carbon by TG-DTA-MS, XRD and TEM / Y. Hui-Mei, L. Chang-Wei, Q. Ling-Jun [et al.] // *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, – 2006, 85, – p. 657–660.
118. Hunt, R.D. The addition of silicon carbide to surrogate nuclear fuel kernels made by the internal gelation process / R.D. Hunt, J.D. Hunn, J.F. Birdwell [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2010, 401, – p. 55-59.
119. Huseynov, E. Neutron irradiation and frequency effects on the electrical conductivity of nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // *Physics Letters A*, – 2016, 380, – p. 3086-3091.
120. Huseynov, E., Garibov, A. Effects of neutron flux on the temperature dependencies of permittivity of 3C-SiC nanoparticles // *Silicon*, – 2017, 9, – p. 753–759.
121. Huseynov, E., Jazbec, A. EPR spectroscopic studies of neutron-irradiated nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // *Silicon*, – 2019, 11, – p. 21-27.
122. Huseynov, E., Jazbec, A., Luka, S. Temperature vs. impedance dependencies of neutron-irradiated nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // *Applied Physics A*, – 2019, 125, – p. 91-98.
123. Huseynov, E., Jazbec, A. Trace elements study of high purity nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) using k_0 -INAA method // *Physica B*:

Condensed Matter, –2017, 517, – p. 30–34.

124. Huseynov, E.M. Current-voltage characteristics of neutron irradiated nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // *Physica B: Condensed Matter*, – 2018, 544, – p. 23-27.

125. Huseynov, E.M. Dielectric loss of neutron-irradiated nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) as a function of frequency and temperature // *Solid State Sciences*, – 2018, 84, – p. 44-50.

126. Huseynov, E.M. Electrical impedance spectroscopy of neutron-irradiated nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // *Applied Physics A*, – 2018, 124 – p.191-198.

127. Huseynov, E.M. Investigation of the agglomeration and amorphous transformation effects of neutron irradiation on the nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) using TEM and SEM methods // *Physica B: Condensed Matter*, – 2017, 510, – p. 99–103.

128. Huseynov, E.M. Neutron irradiation effects on the temperature dependencies of electrical conductivity of silicon carbide (3C-SiC) nanoparticles // *Silicon*, – 2018, 10, – p. 995–1001.

129. Huseynov, E.M. Neutron irradiation, amorphous transformation and agglomeration effects on the permittivity of nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // *NANO*, – 2018 13 (3), – p. 1830002.

130. Huseynov, E.M. Permittivity-frequency dependencies study of neutron-irradiated nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // *NANO*, – 2017, 12, – p. 1750068.

131. Isoya, J. ESR characterization of activation of implanted phosphorus ions in silicon carbide / J. Isoya, T. Ohshima, A. Ohi [et al.] // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, – 2003, 206, – p. 965–968.

132. Isoya, J. EPR identification of intrinsic defects in SiC / J. Isoya, T. Umeda, N. Mizuochi [et al.] // *Phys. Stat. Sol. B*, – 2008, 245 (7), – p. 1298–1314.

133. Jae-Won, P., Youngjin, C., Jonghwa, C. Effects of ion beam mixing of silicon carbide film deposited onto metallic materials for application to nuclear

- hydrogen production // *Journal of Nuclear Materials*, – 2007, 362, – p. 268-273.
134. Jaroslav, K. Radiation damage of structural materials. / K. Jaroslav, K. Jan – Prague, Elsevier Science Publishers, – 1994. – 354 p.
135. Jayant, B. Silicon carbide power devices – Carolina-USA: North Carolina State University, – 2005. – 526 p.
136. Jean, L. Optical response of metal or dielectric nano-objects in strongly convergent light beams / L. Jean, B. Christophe, B. Michel [et al.] // *Phys. Rev. B*, – 2008, 77, – p. 245406.
137. Jeremy, M.B. Transition from Direct Tunneling to Field Emission in Metal-Molecule-Metal Junctions / M.B. Jeremy, K. Bong-Soo, J. W. Gadzuk [et al.] // *Phys. Rev. Lett.*, – 2006, 97, – p. 026801.
138. Jiang, W. Response of nanocrystalline 3C silicon carbide to heavy-ion irradiation / W. Jiang, H. Wang, I. Kim [et al.] // *Phys. Rev. B*, – 2009, 80, – p. 161301.
139. Jin, J.J. ELEXSYS E 500 User's Manual, Basic Operations / J.J. Jin, T.W. Ralph – Boston USA: Bruker BioSpin Corporation, – 2001. – 380 p.
140. Jin-Hee, Y., Cheuk-Yin, W. Relativistic modification of the Gamow factor // *Phys. Rev. C*, – 2000, 61, – p. 044905.
141. Jinlong, Z. Recovery of silicon from sewage sludge for production of high-purity nano-SiO₂ / Z. Jinlong, D. Ying, P. Kai [et al.] // *Chemosphere*, – 2013, 90, – p. 2332–2339.
142. Jiyang, F. Silicon Carbide Nanostructures, Fabrication, Structure, and Properties / F. Jiyang, K. Paul – Switzerland: Springer, – 2014. – 336 p.
143. Johan, B. SEM analysis of ion implanted SiC / B. Johan, A. Malherbe, N.G. Berg [et al.] // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, – 2013, 315, – p. 136–141.
144. Johansson, L., Owman, F., Mårtensson, P. High-resolution core-level study of 6HSiC(0001) // *Phys Rev B*, – 1996, 53, – p. 13793–13802.
145. Johansson, L., Owman, F., Mårtensson, P. Surface state on the SiC(0001)-(3x3) surface // *Surf Sci.*, – 1996, 360, – p. L478–L482.

146. Jonscher, A. K. The 'universal' dielectric response // *Nature*, – 1977, 267, – p. 673-679.
147. José-Luis, C. First principles band gap engineering of [1 1 0] oriented 3C-SiC nanowires / C. José-Luis, S. Franciscode, R. Jesús [et al.] // *Computational Materials Science*, – 2018, 142, – p. 268-276.
148. Juan, H. In situ E-SEM and TEM observations of the thermal annealing effects on ion-amorphized 6H-SiC single crystals and nanophased SiC fibers / H. Juan, J. Aurelien, M. Sandrine [et al.] // *Phys. Status Solidi B*, – 2015, 252, – p. 149–152.
149. Juan, H. Study of the Ion-Irradiation Behavior of Advanced SiC Fibers by Raman Spectroscopy and Transmission Electron Microscopy / H. Juan, J. Aurelien, M. Sandrine [et al.] // *Journal of the American Ceramic Society*, – 2015, 98, – p. 675–682.
150. Judit, S. *Hot Topics in Thermal Analysis and Calorimetry: – Switzerland*, Springer, – 2014. – 372 p.
151. Juliana, M., Gul, R. Role of vacancies in the magnetic and electronic properties of SiC nanoribbons: An ab initio study // *Phys. Rev. B*, – 2013, 87, – p. 115428.
152. Julie, R., Rosario, A. Electrical Properties of Boron Nitride Matrix Composites: II, Dielectric Relaxations in Boron Nitride–Silicon Carbide Composites // *J. Am. Ceram. Soc.*, – 2001, 84 (7), – p. 1490–1496.
153. Juneghani, M., Farzam, M., Zohdirad, H. Wear and corrosion resistance and electroplating characteristics of electrodeposited Cr–SiC nano-composite coatings // *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, – 2013, 23, – p. 1993-2001.
154. Junjie, N., Jian, S., Yujie, J. Tiny silicon nano-wires synthesis on silicon wafers // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, – 2004, 24, – p. 328–332.
155. Jure, B., Luka, S. On the calculation of angular neutron flux in MCNP // *Annals of Nuclear Energy*, – 2017, 100, – p. 128-149.
156. Kang, Y. Morphology modulation of SiC nano-additives for mechanical

- robust high thermoelectric performance $Mg_2Si_{1-x}Sn_x/SiC$ nano-composites / Y. Kang, S. Xianli, Y. Yonggao [et al.] // *Scripta Materialia*, – 2017, 126, – p. 1-5.
157. Kang-San, K., Gwi-Sang, C. Growth and characteristics of polycrystalline 3C-SiC films for extreme environment micro/nano-electromechanical systems // *Sensors and Actuators A: Physical*, – 2009, 155 (1), –p. 125–130.
158. Kassiba, A. Conduction and dielectric behaviour of SiC nano-sized materials / A. Kassiba, M. Tabellout, S. Charpentier [et al.] // *Solid State Communications*, – 2000, 115, – p. 389–393.
159. Katoh, Y., Kishimoto, H., Kohyama, A. The influences of irradiation temperature and helium production on the dimensional stability of silicon carbide // *Journal of Nuclear Materials*, – 2002, 307 (11), – p. 1221-1226.
160. Katoh, Y., Kondo, S., Snead, L.L. DC electrical conductivity of silicon carbide ceramics and composites for flow channel insert applications // *Journal of Nuclear Materials*, – 2009, 386–388, – p. 639–642.
161. Kazuya, S., Joon-Soo, P., Tatsuya, H. Influence of surface structure of SiC nano-sized powder analyzed by X-ray photoelectron spectroscopy on basic powder characteristics // *Applied Surface Science*, – 2007, 253, – p. 9450–9456.
162. Ken, Y., Kurt, T. Silicon carbide composite for light water reactor fuel assembly applications // *Journal of Nuclear Materials*, – 2014, 448, – p. 380-388.
163. Kenta, I. Atomistic structures of nano-engineered SiC and radiation-induced amorphization resistance / I. Kenta, I. Manabu, S. Kazuhisa [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2015, 465, – p. 433-437.
164. Khadhraoui, S. Impedance spectroscopy properties of $Pr_{0.67}A_{0.33}MnO_3$ ($A = Ba$ or Sr) perovskites / S. Khadhraoui, A. Triki, M. Boudard [et al.] // *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, – 2014, 27, – p. 195-201.
165. Khadhraoui, S. Structural and impedance spectroscopy properties of $Pr_{0.6}Sr_{0.4}Mn_{1-x}Ti_xO_{3\pm d}$ perovskites / S. Khadhraoui, A. Triki, S. Hcini [et al.] // *Journal of Alloys and Compounds*, – 2013, 574, – p. 290–298.
166. Khalifa, H.E. Fabrication and characterization of joined silicon carbide cylindrical components for nuclear applications / H.E. Khalifa, C.P. Deck, O.

- Gutierrez [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2015, 457, – p. 227-240.
167. Kishimoto, H., Ozawa, K., Hashitomi, O. Microstructural evolution analysis of NITE SiC/SiC composite using TEM examination and dual-ion irradiation // *Journal of Nuclear Materials*, – 2007, 367–370, – p. 748–752.
168. Koji, A. Characterization of heterogeneous systems by dielectric spectroscopy // *Progress in Polymer Science*, – 2002, 27, – p. 1617-1659.
169. Kolsek, A., Radulovic, V., Snoj L. Using TRIGA Mark II research reactor for irradiation with thermal neutrons // *Nuclear Engineering and Design*, – 2015, 283, – p. 155–161.
170. Kong, H.S., Palmour, J.W., Davis R.F. Temperature dependence of the current-voltage characteristics of metal-semiconductor field-effect transistors in n-type β -SiC grown via chemical vapor deposition // *Applied Physics Letters*, – 1987, 51, – p. 442.
171. Konstantinov, A. O., Wahab, Q., Nordell, N. Ionization rates and critical fields in 4H silicon carbide // *Appl. Phys. Lett.*, – 1997, 71, – p. 90-92.
172. Koyanagi, T. Irradiation resistance of silicon carbide joint at light water reactor–relevant temperature / T. Koyanagi, Y. Katoh, J.O. Kiggans [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2017, 488, – p. 150-159.
173. Kozlovski, V.V., Lebedev, A.A., Bogdanova, E.V. Effect of Irradiation with MeV Protons and Electrons on the Conductivity Compensation and Photoluminescence of Moderately Doped p-4H-SiC (CVD) // *Semiconductors*, – 2015, 49 (9), –p. 1163–1165.
174. Kulakov, M., Henn, G., Bullemer, B. SiC(0001) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Si surface reconstruction—a new insight with a STM // *Surf Sci.*, – 1996, 346, – p. 49–54.
175. Kumar, R., Kushwaha, A., Srivastava, S. One-dimensional nano layered SiC/TiO₂ based photonic band gap materials as temperature sensor // *Optik - International Journal for Light and Electron Optics*, – 2015, 126 (14), –p. 1324-1330.
176. Kurt, A., Caen, A., Lance, L. Irradiation stability and thermo-mechanical properties of NITE-SiC irradiated to 10 dpa // *Journal of Nuclear Materials*, – 2018, 499, – p. 242-247.

177. Kyung-Han, K., Taihee, E., Myong-Chul, J. Governing factors for the formation of 4H or 6H-SiC polytype during SiC crystal growth: An atomistic computational approach // *Journal of Crystal Growth*, – 2014, 389, – p. 120-133.
178. Laar, J. Deposition of SiC/Si coatings in a microwave plasma-assisted spouted bed reactor / J. Laar, H. Bissett, J. Barry [et al.] // *Journal of the European Ceramic Society*, – 2018, 38, – p. 1197-1209.
179. Lance, L.S. Handbook of SiC properties for fuel performance modeling / L.S. Lance, N. Takashi, K. Yutai [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2007, 371, – p. 329–377.
180. Lance, L.S. Dimensional isotropy of 6H and 3C SiC under neutron irradiation / L.S. Lance, K. Yutai, K. Takaaki [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2016, 471, – p. 92–96.
181. Lane, A.M., Lynn, J.E. Fast Neutron Capture below 1 MeV: The Cross Sections for ^{238}U and ^{232}Th // *Proc. Phys. Soc. A*, – 1957, 70, – p. 557.
182. Lee, S. Near Surface Electrical Characterization of Hydraulic Conductivity: From Petrophysical Properties to Aquifer Geometries—A Review // *Surveys in Geophysics*, – 2007, 28, – p. 169–197.
183. Lei, W. Fast neutron detection at near-core location of a research reactor with a SiC detector / W. Lei, J. Josh, X. Sha [et al.] // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, – 2018, 888, – p. 126-131.
184. Leon, V.H. Correlations in Space and Time and Born Approximation Scattering in Systems of Interacting Particles // *Phys. Rev.*, – 1954, 95, – p. 249.
185. Li, L., Tsong I. Atomic structures of 6H-SiC (0001) and (0001-) surfaces. *Surf Sci.*, – 1996, 351, – p. 141–148.
186. Lillo, T.M., Rooyen, I.J., Aguiar, J.A. Silicon carbide grain boundary distributions, irradiation conditions, and silver retention in irradiated AGR-1 TRISO fuel particles // *Nuclear Engineering and Design*, – 2018, 329, – p. 46-52.
187. Liu, C. Evolution of small defect clusters in ion-irradiated 3C-SiC: Combined cluster dynamics modeling and experimental study / C. Liu, L. He, Y.

- Zhai [et al.] // *Acta Materialia*, – 2017, 125, – p. 377–389.
188. Liu, C., Szlufarska, I. Distribution of defect clusters in the primary damage of ion irradiated 3C-SiC // *Journal of Nuclear Materials*, – 2018, 509, – p. 392-400.
189. Liu, Q.P., Gao, L.X., Gao, Z.W. Preparation and characterization of polyimide/silica nanocomposite spheres // *Mater. Lett.*, – 2007, 61, – p. 4456–4458.
190. Long, P., Bermudez, M., Ramaker, E. Structural determination of b-SiC(100)-c(2 9 2) from C-1s surface-core-exciton and Si-2p absorption // *Phys Rev Lett*, – 1996, 76, – p. 991–994.
191. Lu, H., Schmidt, W., Kiefer, W. High surface area mesoporous SiC synthesized via nanocasting and carbothermal reduction process // *J Mater Sci.*, – 2005, 40, – p. 5091–5093.
192. Lua, A.C., Su, J.C. Isothermal and non-isothermal pyrolysis kinetics of Kapton polyimide”. *Polym. Degrad. Stab.*, – 2006, 91, – p. 144-153.
193. Luka, S., Gasper, Z., Andrej, T. Computational analysis of irradiation facilities at the JSI TRIGA reactor // *Applied Radiation and Isotopes*, – 2012, 70, – p. 483–488.
194. Luo, F. Measurement of leakage neutron spectra from silicon carbide cylinders with D–T neutrons and validation of evaluated nuclear data / F. Luo, R. Han, Y. Nie [et al.] // *Fusion Engineering and Design*, – 2016, 112, – p. 355-359.
195. Luo, M., Xu, Y., Song, Y. Band gap tuning of 1T-MoS₂/SiC bilayers with normal strain: A density functional study // *Optik - International Journal for Light and Electron Optics*, – 2017, 135, – p. 79-84.
196. Luo, M., Xu, Y., Song, Y. Modulation of band gap by normal strain in SiC-based heterostructures // *Optik*, – 2018, 154, – p. 634-639.
197. MacDonald, W.M. A unified nuclear reaction theory for phenomenological analyses // *Nuclear Physics*, – 1963, 54, – p. 393-404.
198. MacDonald, W.M. Antisymmetrization of a unified nuclear reaction theory // *Nuclear Physics*, – 1964, 56, – p. 636-646.
199. Madelung, O. Group IV Elements, IV-IV and III-V Compounds. Part b - Electronic, Transport, Optical and Other Properties. / O. Madelung, U. Rössler, M.

- Schulz – Berlin: Springer-Verlag, – 2002. – 610 p.
200. Malik, W., Benjamin, S., Jason, H. Fuel performance of chromium-coated zirconium alloy and silicon carbide accident tolerant fuel claddings // *Annals of Nuclear Energy*, – 2018, 120, – p. 304-318.
201. Manabu, I. Volume swelling of amorphous SiC during ion-beam irradiation / I. Manabu, B. In-Tae, H. Akihiko [et al.] // *Phys. Rev. B*, – 2005, 72, – p. 024116.
202. Manato, D. Enhancement of local electrical conductivities in SiC by femtosecond laser modification / D. Manato, I. Takuto, Y. Minoru [et al.] // *Applied Physics Letters*, – 2011, 98, – p. 133104.
203. Mansour, R. Production of Al₂O₃–SiC nano-composites by spark plasma sintering / R. Mansour, A. Farajipour, Z. Mohammad [et al.] // *Boletín de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio*, – 2017, 56 (4), – p. 186-194.
204. Marcelis de Bruin. Instrumental neutron activation analysis - a routine method. – Delft, The Netherlands: Delftse Universitaire Pers – 1983. 250 p.
205. Martins, R. Correlation between the carbon and hydrogen contents with the gas species and the plasma impedance of silicon carbide films produced by PECVD technique / R. Martins, V. Silva, H. Aguas [et al.] // *Applied Surface Science*, – 2001, 184, – p. 101–106.
206. Matavz, A. Enhanced electrical response in ferroelectric thin film capacitors with inkjet-printed LaNiO₃ electrodes / A. Matavz, J. Kovač, M. Čekada [et al.] // *Applied Physics Letters*, – 2018, 113, – p. 012904.
207. Mazerat, S., Pailler, R. Self-organized nano-scale multilayer coating on SiC fibers obtained by phosphating // *Journal of the European Ceramic Society*, – 2018, 38 (6), – p. 2486-2494.
208. Meese, J. M. Neutron transmutation doping of silicon. I. Electrical parameters versus fluence // *Journal of Applied Physics*, – 1980, 51, – p. 3672.
209. Megherbi, M.L. Analysis of different forward current–voltage behaviours of Al implanted 4H-SiC vertical p–i–n diodes / M.L. Megherbi, F. Pezzimenti, L. Dehimi [et al.] // *Solid-State Electronics*, – 2015, 109, – p. 12-16.
210. Michael, H., Günter, M., Ortwin, H. Nano-thermodynamics: On the minimal

length scale for the existence of temperature // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, – 2005, 29, – p. 66–73.

211. Miedema, P. Thermal evolution of the band edges of 6H-SiC: X-ray methods compared to the optical band gap / P. Miedema, M. Beye, R. Könnecke [et al.] // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, – 2014, 197, – p. 37-42.

212. Mike, R. *Modulated Temperature Differential Scanning Calorimetry, Theoretical and Practical Applications in Polymer Characterisation.* / R. Mike, J.H. Douglas – Amsterdam: Springer, – 2006. – 344 p.

213. Ming-Jie, Z., Narasimhan, S., Izabela S. Energy barriers for point-defect reactions in 3C-SiC // *Phys. Rev. B*, – 2013, 88, – p. 054105.

214. Mingming, L. The evolution of PL properties of hydrogenated Si-rich silicon carbide/amorphous carbon nano-multilayer films grown by PECVD / L. Mingming, J. Lihua, P. Yu [et al.] // *Optik*, – 2019, 176, – p. 401-409.

215. Mohammad, K. Sonication-assisted synthesis of a new rod-like metal-organic coordination polymer compound; novel precursor to produce pure phase nano-sized lead(II) oxide / K. Mohammad, H. Payam, J. Samira [et al.] // *Journal of Molecular Structure*, – 2019, 1176, – p. 434-446.

216. Mohammed, A.F. Ablation threshold measurements and surface modifications of 193 nm laser irradiated 4H-SiC / A.F. Mohammed, Q.A. Al-Jarwany, A.J. Clarke [et al.] // *Chemical Physics Letters*, – 2018, 713, – p. 194-202.

217. Mohd, I. Neutron Irradiation Swelling of SiC and SiCf/SiC for Advanced Nuclear Applications / I. Mohd, K. Hiroshi, I. Masamitsu [et al.] // *Energy Procedia*, – 2015, 71, –p. 328-336.

218. Mollick, P., Venugopalan, R., Srivastava, D. CFD coupled kinetic modeling and simulation of hot wall vertical tubular reactor for deposition of SiC crystal from MTS // *Journal of Crystal Growth*, – 2017, 475, – p. 97-109.

219. Monica, F. Joining of machined SiC/SiC composites for thermonuclear fusion reactors / F. Monica, S. Milena, C. Valentina [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2008, 375, – p. 410-415.

220. Motohiro, I. Silicon carbide: fundamentals // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, – 2001, 466 (2), – p. 406-411.
221. Mughabghab, S.F. Verification of the Lane-Lynn theory of direct neutron capture // Physics Letters B, – 1979, 81 (2), – p. 93-97.
222. Muthu, W. Silicon Carbide Microsystems for Harsh Environments / W. Muthu, A. Robert – London: Springer, – 2011. – 232 p.
223. Nadia, R., Ping, X. Evaluation of the mechanical performance of silicon carbide in TRISO fuel at high temperatures // Nuclear Engineering and Design, – 2016, 306, – p. 52-58.
224. Najmeh, D., Mahmoud, J. Electronic and optical properties of hydrogenated silicon carbide nanosheets: A DFT study // Solid State Communications, – 2018, 275, – p. 1-7.
225. Narendra, S., Kirandeep, S., Davinder, K. Electric field involved transport at elevated temperature in nanocrystalline silicon carbide nitride (nc-SiCN) thin films for harsh environment applications // Current Applied Physics, – 2018, 18 (2), – p. 220-225.
226. Nawaz, A., Mao, W., Lu, C., Shen, G. Nano-scale elastic-plastic properties and indentation-induced deformation of amorphous silicon carbide thin film // Ceramics International, – 2017, 43, – p. 385-391.
227. Nayak, B. B., Behera, D., Mishra, B. K. Nanorods of silicon carbide from silicon carbide powder by high temperature heat treatment // Journal of Materials Science, – 2011, 46, – p. 3052–3059.
228. Nghiep, N., Charles, H., Henager, Jr. Modeling thermal and irradiation-induced swelling effects on the integrity of Ti₃SiC₂/SiC joints // Journal of Nuclear Materials, – 2017, 495, – p. 504-515.
229. Nicolich, J., Lences, Z., Dressler, W. Phase quantification of β -Si₃N₄/ β -SiC mixtures by X-ray powder diffraction analysis // Journal of Materials Science, – 2000, 35, – p. 1427–1432.
230. Ning, L. Improved oxidation resistance of expanded graphite through nano

- SiC coating / L. Ning, L. Yawei, S. Jiangbo [et al.] // *Ceramics International*, – 2018, 44 (3), – p. 3319-3325.
231. Nogami, S., Hasegawa, A., Snead, L.L. Indentation fracture toughness of neutron irradiated silicon carbide // *Journal of Nuclear Materials*, – 2002, 307–311, – p. 1163–1167.
232. Northrup, J., Neugebauer, J. Theory of the adatom-induced reconstruction of the SiC(0001) 3x3 surface // *Phys Rev B*, – 1995, 52, – p. R17001–R17004.
233. Nozomi, Y. Extraction of interface state density at SiO₂/SiC interfaces based on impedance measurements with different temperatures / Y. Nozomi, W. Eiji, A. Manabu [et al.] // *Thin Solid Films*, – 2014, 557, – p. 237–240
234. Olesinski, R.W., Abbaschian, G.J. The C–Si (Carbon-Silicon) system // *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, – 1984, 5 (5), – p. 486–489.
235. Olivier, E.J., Neethling, J.H. TEM analysis of planar defects in β -SiC // *Int. Journal of Refractory Metals & Hard Materials*, – 2009, 27, – p. 443–448.
236. Orlinski, S.B., Schmidt, J. Silicon and carbon vacancies in neutron-irradiated SiC: A high-field electron paramagnetic resonance study // *Physical Review B*, – 2003, 67, – p. 125207.
237. Owman, F., Mårtensson, P. STM study of the SiC(0001) 3x3 surface // *Surf Sci.*, – 1995, 330, – p. L639–L645.
238. Pananakakis, G. Temperature dependence of the Fowler–Nordheim current in metaloxide degenerate semiconductor structures / G. Pananakakis, G. Ghibaudo, R. Kies [et al.] // *Journal of Applied Physics*, – 1995, 78, – p. 2635.
239. Panayiotis, A.V. Thermodynamics of point defects and their relation with bulk properties / A.V. Panayiotis, D.A. Kesslar – The Netherlands: North-Holland Physics Publishing, Elsevier – 1986. – 470 p.
240. Park, J.Y. SiCf/SiC composites as core materials for Generation IV nuclear reactors // *Structural Materials for Generation IV Nuclear Reactors*, – 2017, 17, – p. 441-470.
241. Pascal, F., Gilles, R., Jean-Luc, Z. Microstructure influence on the fragmentation properties of dense silicon carbides under impact // *Mechanics of*

Materials, – 2018, 123, – p. 59-76.

242. Patrick, E. Handbook of Sample Preparation for Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis – New York: Springer-Verlag US, – 2009. – 330 p.

243. Paul, G.M. Silicon carbide devices for radiation hard applications / G.M. Paul, L.B. Donovan, H.H. Richard [et al.] // AIP Conf. Proc., – 1993, 271, – p. 625-627.

244. Paweł, S. Insights into electrocatalytic activity of epitaxial graphene on SiC from cyclic voltammetry and ac impedance spectroscopy / S. Paweł, G.T. Nikos, W. Mariusz [et al.] // J Solid State Electrochem, – 2014, 18, – p. 2555–2562.

245. Peivaste, I., Alahyarizadeh, Gh., Minucheer, A. Comparative study on mechanical properties of three different SiC polytypes (3C, 4H and 6H) under high pressure: First-principle calculations // Vacuum, – 2018, 154, – p. 37-43.

246. Persson, C., Lindelfelt, U., Semelius, B. E. Doping-induced effects on the band structure in n-type 3C-, 2H-, 4H-, 6H-SiC and Si // Phys. Rev. B, – 1999, 60, – p. 16479.

247. Peter, A. Electric Dipole Ground-State Transition Width Strength Function and 7-Mev Photon Interactions // Phys. Rev., – 1962, 126, – p. 671.

248. Peter, F. Silicon Carbide Volume 1: Growth, defects, and novel applications / F. Peter, K. Tsunenobu, L. Lothar – New York: John Wiley & Sons, Inc., – 2010. – 528 p.

249. Peter, F. Silicon Carbide Volume 2: Power devices and sensors / F. Peter, K. Tsunenobu, L. Lothar – Frankfurt: Wiley-Vch Verlag, – 2010. – 508 p.

250. Pipit, F., Amit, S., Dang-Hyok, Y. Effects of sintering additives on the microstructural and mechanical properties of the ion-irradiated SiCf/SiC // Journal of Nuclear Materials, – 2018, 503, – p. 226-234.

251. Pol, G., Pol, S., Gedanken, A. Novel synthesis of high surface area silicon carbide by RAPET (reactions under autogenic pressure at elevated temperature) of organosilanes // Chem. Mater., – 2005, 17, – p. 1797–1802.

252. Polyakov, V.M., Schwierz, F. Formation of two-dimensional electron gases

in polytypic SiC heterostructures // *Journal of Applied Physics*, – 2005, 98, – p. 023709.

253. Popescu, C. Integral method to analyze the kinetics of heterogeneous reactions under non-isothermal conditions a variant on the Ozawa-Flynn-Wall method // *Thermochim. Acta*, – 1996, 285, – p. 309-323.

254. Powers, M. Structural analysis of the b-SiC(100)-c(2 9 2) surface reconstruction by automated tensor low-energy electron diffraction / M. Powers, A. Wander, J. Rous [et al.] // *Phys Rev B*, – 1991, 44, – p. 11159–11166.

255. Preble, E.A. Application of Nomarski interference contrast microscopy as a thickness monitor in the preparation of transparent, SiC-based, cross-sectional TEM samples / E.A. Preble, H.A. McLean, S.M. Kiesel [et al.] // *Ultramicroscopy*, – 2002, 92, – p. 265–271.

256. Price, D.L., Fernandez-Alonso F. An introduction to neutron scattering // *Experimental Methods in the Physical Sciences*, – 2013, 44, – p. 1-135.

257. Qazilbash, M.M. Infrared spectroscopy and nano-imaging of the insulator-to-metal transition in vanadium dioxide / M.M. Qazilbash, M. Brehm, G.O. Andreev [et al.] // *Phys. Rev. B*, – 2009, 79, – p. 075107.

258. Qingnan, Z., Aijie, Y., Zixiang, C. The effect of particle size on electrode reaction thermodynamics of nano-Bi₂O₃ electrode // *The Journal of Chemical Thermodynamics*, – 2019, 130, – p. 154-162.

259. Qteish, A., Volker, H., Needs, R.J. Polarization, band lineups, and stability of SiC polytypes // *Phys. Rev. B*, – 1992, 45, – p. 6534.

260. Rajput, M. Primary knock on atom spectra, gas production and displacement cross section for tungsten and chromium irradiated with neutrons at energies up to 14.1 MeV / M. Rajput, S. Vala, P.V. Subhash [et al.] // *Fusion Engineering and Design*, – 2018, 130, – p. 114-121.

261. Ralph, V.C. Critical behavior from Landau theory in nanothermodynamic equilibrium // *Physics Letters A*, – 2003, 315, – p. 313–318.

262. Ramachandran, V., Feenstra, R. Scanning tunneling spectroscopy of Mott-Hubbard states on the 6H-SiC(0001) 3x3 Surface // *Phys Rev Lett.*, – 1999, 82, – p.

1000–1003.

263. Rebaoui, Z. SiC polytypes and doping nature effects on electrical properties of ZnO-SiC Schottky diodes / Z. Rebaoui, W. Bachir, M. Abboun [et al.] // *Microelectronic Engineering*, – 2017, 171, – p. 11-19.
264. Rebecca, C. Silicon carbide microelectromechanical systems for harsh environments. – Singapore: World Scientific Publishing, – 2006. – 194 p.
265. Regnier, N., Guibe, C., Methodology for multistage degradation of polyimide polymer // *Polym. Degrad. Stab.*, – 1997, 55, – p. 165-172
266. Roberta N., Hussein, M., Bengt, G. Defects related to electrical doping of 4H-SiC by ion implantation // *Materials Science in Semiconductor Processing*, – 2018, 78, – p. 13-21.
267. Rochkhudson, B.F. Sensitivity analysis of a PWR fuel element using zircaloy and silicon carbide claddings / B.F. Rochkhudson, A.L. Patricia, E.V. Carlos [et al.] // *Nuclear Engineering and Design*, – 2017, 320, – p. 103-111.
268. Rooyena, I.J. The effect of grain size and phosphorous-doping of polycrystalline 3C-SiC on infrared reflectance spectra / I.J. Rooyena, J.A. Engelbrecht, A. Henry [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2012, 422, – p. 103–108.
269. Rudy, J.K. *Comprehensive Nuclear Materials, Radiation Effects in Structural and Functional Materials for Fission and Fusion Reactors*. – New York: Elsevier, – 2012. – 3560 p.
270. Rui, T., Qin, L., Yingying, L. First principles calculations for iodine atom diffusion in SiC with point defects // *Computational Materials Science*, – 2018, 142, – p. 427-436.
271. Sabisch, M., Krüger, P., Mazur, A. First-principles calculations of b-SiC(001) surfaces // *Phys Rev B*, – 1996, 53, – p. 13121–13132.
272. Sabisch, M., Krüger, P., Pollmann, J. Ab initio calculations of structural and electronic properties of 6H-SiC(0001) surfaces // *Phys Rev B*, – 1997, 55, – p. 10561–10570.
273. Saha, U., Devan, K. The computation of displacement damage cross sections

- of silicon, carbon and silicon carbide for high energy applications // *Materials Today: Proceedings*, – 2018, 5 (8), – p. 16501-16508.
274. Sanosh, K.P., Ehsan, U.H., Antonio L. Rapid synthesis and characterization of silicon substituted nano hydroxyapatite using microwave irradiation // *Current Applied Physics*, – 2014, 14, – p. 87–92.
275. Santhana, G.P. Kinetics of thermal degradation of 6FDA based copolyimides-I / G.P. Santhana, H.V. Rohit, S. Veeramanian [et al.] // *Polym. Degrad. Stab.*, – 2002, 75, – p. 273–285.
276. Saša, N., Katja, R., Katja, K. Electrophoretic deposition in the production of SiC/SiC composites for fusion reactor applications // *Journal of the European Ceramic Society*, – 2008, 28, – p. 2801-2807.
277. Satoh, Y. Defect clusters formed from large collision cascades in fcc metals irradiated with spallation neutrons / Y. Satoh, Y. Matsuda, T. Yoshiie [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2013, 442, – p. S768–S772.
278. Sawan, M.E., Katohb, Y., Snead, L.L. Transmutation of silicon carbide in fusion nuclear environment // *Journal of Nuclear Materials*, – 2013, 442, – p. S370-S375.
279. Schardt, J., Bernhardt, J., Starke, U. Crystallography of the (3 9 3) surface reconstruction of 3C-SiC(111), 4H-SiC(0001), and 6H-SiC(0001) surfaces retrieved by lowenergy electron diffraction // *Phys Rev B*, – 2000, 62, – p. 10335–10344.
280. Schick, C. Differential scanning calorimetry (DSC) of semicrystalline polymers // *Anal Bioanal Chem*, – 2009, 395, – p. 1589–1611.
281. Scholz, R., Gösele, U., Wischmeyer, F. Prevention of micropipes and voids at β -SiC=Si(100) interfaces // *Appl. Phys. A*, – 1998, 66, – p. 59–67.
282. Scholz, R., Santos, M.F., Riccardi, B. Electrical conductivity of silicon carbide composites and fibers // *Journal of Nuclear Materials*, – 2002, 307–311, – p. 1098–1101.
283. Schröder, Chr., Heiland, W., Held, R. Analysis of reverse current–voltage characteristics of Ti/6H–SiC Schottky diodes // *Appl. Phys. Lett.*, – 1996, 68, – p. 1957.

284. Semond, F. Atomic structure of the b-SiC(100)-(3 9 2) surface / F. Semond, P. Soukiassian, A. Mayne [et al.] // *Phys Rev Lett*, – 1996, 77, – p. 2013–2016.
285. Seong-Ho, C., BongSoo, K., Daniel, F.C. Electrical Resistance of Long Conjugated Molecular Wires // *Science*, – 2008, 320, – p. 1482-1486.
286. Shen, M.J. Characteristics and mechanical properties of magnesium matrix composites reinforced with micron/submicron/nano SiC particles / M.J. Shen, X.J. Wang, T. Ying [et al.] // *Journal of Alloys and Compounds*, – 2016, 686, – p. 831–840.
287. Sheng-Cheng, C., Yuan-Yao, L. SiC nanowires in large quantities: Synthesis, band gap characterization, and photoluminescence properties // *Journal of Crystal Growth*, – 2009, 311 (4), – p. 1036-1041.
288. Shigeyuki, S. Silicon carbide ceramics, Fundamental and solid reaction / S. Shigeyuki, I. Yoshizo – London: Elsevier, – 1991. – 298 p.
289. Shiramomo, T. Study of the effect of doped impurities on polytype stability during PVT growth of SiC using 2D nucleation theory / Shiramomo, T., Gao, B., Mercier, F. [et al.] // *Journal of Crystal Growth*, – 2014, 385, – p. 95-99.
290. Shiramomo, T. Thermodynamical analysis of polytype stability during PVT growth of SiC using 2D nucleation theory / T. Shiramomo, B. Gao, F. Mercier [et al.] // *Journal of Crystal Growth*, – 2012, 352, – p. 177-180.
291. Shuang, M.A., Mikkil, J.L. Performance of the electrode based on silicon carbide supported platinum catalyst for proton exchange membrane fuel cells // *Journal of Electroanalytical Chemistry*, – 2017, 791, – p. 175-184.
292. Siffert, P. Silicon, Evolution and Future of a Technology / P. Siffert, E. F. Krimmel – Berlin: Springer Verlag, – 2004. – 534 p.
293. Silvia, P., Bernhard, F., Guido, K. Effect of interparticle interactions on size determination of zirconia and silica based systems – A comparison of SAXS, DLS, BET, XRD and TEM // *Chemical Physics Letters*, – 2012, 521, – p. 91-97.
294. Simoen, E. High Purity Silicon 11 / E. Simoen, C. Claeys, R. Falster [et al.] // *The Electrochemical Society*, 65 South Main Street Pennington, New Jersey, USA, – 2010, 33 (11), – p.250

295. Singh, G. Evaluating the irradiation effects on the elastic properties of miniature monolithic SiC tubular specimens / G. Singh, T. Koyanagi, C. Petrie [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2018, 499, – p.107-110.
296. Skuratov, V.A., Connell, J. O., Sohatsky, A.S. TEM study of damage recovery in SiC by swift Xe ion irradiation // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, – 2014, 327, – p. 89–92.
297. Snead, L.L. Limits on irradiation-induced thermal conductivity and electrical resistivity in silicon carbide materials // *Journal of Nuclear Materials*, – 2004, 329–333, – p. 524–529.
298. Soltamov, V. A. Point Defects in Silicon Carbide as a Promising Basis for Spectroscopy of Single Defects with Controllable Quantum States at Room Temperature / V. A. Soltamov, D. O. Tolmachev, I. V. Il'in [et al.] // *Physics of the Solid State*, – 2015, 57 (5), – p. 891–899.
299. Soukiassian, P. Direct observation of a b-SiC(100)-c(4 9 2) surface reconstruction / P. Soukiassian, F. Semond, L. Douillard [et al.] // *Phys Rev Lett*, – 1997, 78, – p. 907–910.
300. Soukiassian, P., Semond, F., Mayne, A. Highly stable Si atomic line formation on the b-SiC(100) surface // *Phys Rev Lett*, – 1997, 79, – p. 2498–2501.
301. Sprouster, J. Reprint of: Microstructural evolution of neutron irradiated 3C-SiC / J. Sprouster, T. Koyanagi, E. Dooryhee [et al.] // *Scripta Materialia*, – 2018, 143, – p. 176-180.
302. Squires, G.L. *Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering* – Boston: Cambridge University Press, – 2012. – 260 p.
303. Starke, U. The (0001)-surface of 6H-SiC: morphology, composition and structure / U. Starke, Ch. Bram, P. Steiner [et al.] // *Appl Surf Sci.*, – 1995, 89, – p. 175–185.
304. Starke, U. Novel reconstruction mechanism for dangling-bond minimization: combined method surface structure determination of SiC(111)-(3 9 3) / U. Starke, J. Schardt, J. Bernhardt [et al.] // *Phys Rev Lett*, – 1998, 80, – p. 758–761

305. Steinnes, E. Some Neutron Activation Methods for the Determination of Minor and Trace Elements in Rocks. – Kjeller-Norway: Kjeller publish, – 1972. – 134 p.
306. Stéphane, M. Improvement of silicon carbide fibers mechanical properties by Cl₂ etching / M. Stéphane, D. Adrien, P. René [et al.] // Journal of the European Ceramic Society, – 2018, 38 (16), – p. 5301-5310.
307. Stephen, S. Advances in silicon carbide processing and applications, Artech House semiconductor materials and devices library / S. Stephen, A. Anant – Boston: Artech House Publishers, – 2004. – 218 p.
308. Stephen, S. Silicon carbide biotechnology a biocompatible semiconductor for advanced biomedical devices and applications. – Massachusetts: Elsevier, – 2012. – 482 p.
309. Stephen, W.L. Theory of Neutron Scattering from Condensed Matter. – Washington: Clarendon Press, – 1986. – 360 p.
310. Strokan, N.B., Ivanov, A.M., Lebedev, A.A. Transport of the charge carriers in SiC-detector structures after extreme radiation fluences // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, – 2006, 569, – p. 758-763.
311. Subhash, S., Keerti, R., Kaushik, P. Synthesis, characterization of graphene oxide wrapped silicon carbide for excellent mechanical and damping performance for aerospace application // Journal of Alloys and Compounds, – 2018, 740, – p. 436-445.
312. Sugawara, K. Enhancement of band gap and evolution of in-gap states in hydrogen-adsorbed monolayer graphene on SiC(0001) / K. Sugawara, K. Suzuki, M. Sato [et al.] // Carbon, – 2017, 124, – p. 584-587.
313. Summonte, C. A ternary-3D analysis of the optical properties of amorphous hydrogenated silicon-rich carbide / C. Summonte, F. Gaspari, S. Quaranta [et al.] // Materials Chemistry and Physics, – 2019, 221, – p. 301-310.
314. Sun, C. Synthesis of porous silicon nano-wires and the emission of red luminescence / C. Sun, H. Hu, H. Feng [et al.] // Applied Surface Science, – 2013,

282, – p. 259–263.

315. Sun, J.T., Huang, Y.D., Cao, H.L. Effects of ambient-temperature curing agents on the thermal stability of poly(methyl phenylsiloxane) // *Polym. Degrad. Stab.*, – 2004, 85, – p. 725–731.

316. Tabellout, M. Dielectric and EPR investigations of stoichiometry and interface effects in silicon carbide nanoparticles / M. Tabellout, A. Kassiba, S. Tkaczyk [et al.] // *J. Phys.: Condens. Matter*, – 2006, 18, – p. 1143–1155.

317. Takaaki, K., Sosuke, K., Tatsuya, H. Effect of differential swelling between fiber and matrix on the strength of irradiated SiC/SiC composites // *Journal of Nuclear Materials*, – 2013, 442, – p. S380-S383.

318. Takaaki, K., Yutai, K. Mechanical properties of SiC composites neutron irradiated under light water reactor relevant temperature and dose conditions // *Journal of Nuclear Materials*, – 2017, 494, – p. 46-54.

319. Tanja, G. Evaluation of neutron flux and fission rate distributions inside the JSI TRIGA Mark II reactor using multiple in-core fission chambers / G. Tanja, A. Jazbec, L. Snoj [et al.] // *Annals of Nuclear Energy*, – 2018, 111, – p. 407-440.

320. Tanja, K. Validation of neutron flux redistribution factors in JSI TRIGA reactor due to control rod movements / K. Tanja, Z. Gasper, A. Jazbec [et al.] // *Applied Radiation and Isotopes*, – 2015, 104, – p. 34–42.

321. Tehrani, S. Observation of single-carrier space-charge-limited flow in nitrogen-doped α -silicon carbide. I. I-V characteristics and impedance / S. Tehrani, J. S. Kim, L. L. Hench [et al.] // *Journal of Applied Physics*, – 1985, 58, – p. 1562.

322. Thakore, B.Y. Thermodynamic properties of 3C—SiC / B.Y. Thakore, S.G. Khambholja, A.Y. Vahora [et al.] // *Chinese Physics B*, – 2013, 22, – p. 106401.

323. Thomas, L., John, T., Kenneth, B. Neutron Scattering - Magnetic and Quantum Phenomena // *Experimental Methods in the Physical Sciences*, – 2015, 48, – p. 26-56.

324. Thu, L.M., Chiu, W.T., Voskoboynikov, O. Effects of geometrical shape dispersion on inhomogeneous broadening of excitonic peaks of semiconductor nano-objects // *Phys. Rev. B*, – 2011, 83, – p. 125301.

325. Tiskumara, R. Analysis of high field effects on the steady-state current-voltage response of semi-insulating 4H-SiC for photoconductive switch applications / R. Tiskumara, R. Joshi, D. Mauch [et al.] // *Journal of Applied Physics*, – 2015, 118, – p. 095701
326. Toshihiro, I. High-strength alkali-resistant sintered SiC fibre stable to 2,200 °C / I. Toshihiro, K. Yasuhiko, K. Kiyoshi [et al.] // *Nature*, – 1998, 391, – p. 773–775.
327. Tsunenobu, K. Fundamentals of silicon carbide technology, growth, characterization, devices, and applications / K. Tsunenobu, C. James – Solaris South Tower-Singapore: John Wiley & Sons Singapore, – 2014, – 554 p.
328. Tyburska-Püschel, B., Zhai, Y., He, L. Size distribution of black spot defects and their contribution to swelling in irradiated SiC // *Journal of Nuclear Materials*, – 2016, 476, – p. 132-139.
329. Valentina, A. High-temperature tests of silicon carbide composite cladding under GFR conditions / A. Valentina, F. Kerr, S. Daniel [et al.] // *Energy Procedia*, – 2017, 127, – p. 320-328.
330. Vasiliauskas, R. Polytype transformation and structural characteristics of 3C-SiC on 6H-SiC substrates / R. Vasiliauskas, M. Marinova, M. Syväjärvi [et al.] // *Journal of Crystal Growth*, – 2014, 395, – p. 109-115.
331. Vikram, S.Y. Frequency and Temperature Dependence of Dielectric Properties of Pure Poly Vinylidene Fluoride (PVDF) Thin Films / S.Y. Vikram, K.S. Devendra, S. Yashpal [et al.] // *AIP Conference Proceedings*, – 2010, 267, – p. 1285.
332. Vladimir, G., Javier, C., Julio, P. Correct thermodynamic forces in Tsallis thermodynamics: connection with Hill nanothermodynamics // *Physics Letters A*, – 2005, 336, – p. 82–88.
333. Vladimir, R. Qualification of heavy water based irradiation device in the JSI TRIGA reactor for irradiations of FT-TIMS samples for nuclear safeguards / R. Vladimir, K. Aljaž, F. Anne-Laure [et al.] // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, – 2018, 885, – p. 139-144.

334. Vladimir, R., Žiga, Š., Snoj, L. Validation of absolute axial neutron flux distribution calculations with MCNP with $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$ reaction rate distribution measurements at the JSI TRIGA Mark II reactor // *Applied Radiation and Isotopes*, – 2014, 84, – p. 57-65.
335. Wang, X., Xiao, P. Nondestructive characterisation of alumina/silicon carbide nanocomposites using impedance spectroscopy // *Journal of the European Ceramic Society*, – 2000, 20, – p. 2591-2599.
336. Warriar, M. Statistical study of defects caused by primary knock-on atoms in fcc Cu and bcc W using molecular dynamics / M. Warriar, U. Bhardwaj, H. Hemani [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2015, 467, – p. 457-464.
337. Wei, Z. Silicon carbide nano-fibers in-situ grown on carbon fibers for enhanced microwave absorption properties / Z. Wei, L. Lan, X. Peng [et al.] // *Ceramics International*, – 2017, 43, – p. 5628-5634.
338. Weichao, B. Structural evolution in ZrC-SiC composite irradiated by 4 MeV Au ions / B. Weichao, L. Ji-Xuan, W. Xingang [et al.] // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, – 2018, 434, – p. 23-28.
339. Weiqian, Z., Fenglei, N., Yungan, Z. Hermeticity and tensile experiment of small plate-type SiC ceramic composites for advanced reactor applications // *Annals of Nuclear Energy*, – 2017, 110, – p. 1098-1106.
340. Wei-Wei, X. High-temperature mechanical and thermodynamic properties of silicon carbide polytypes / X. Wei-Wei, X. Fangfang, C. Lijie [et al.] // *Journal of Alloys and Compounds*, – 2018, 768, – p. 722-732.
341. Wellenhofer, G., Rössler, U. Valence band dispersion of hexagonal SiC // *Diamond and Related Materials*, – 1997, 6 (10), – p. 1342-1345.
342. Wojciech, Z. Theory of Calorimetry: Hot Topics in Thermal Analysis and Calorimetry / Z. Wojciech, M. Eugeniusz – New York: Kluwer Academic Publishers, – 2004. – 198 p.
343. Xi, W. Numerical simulation of effects of reactor dimensions on isothermal CVI process of C/SiC composites / W. Xi, C. Laifei, Z. Litong [et al.] //

Computational Materials Science, – 2008, 44, – p. 670-677.

344. Xiangyang, D., Yung, S. Predictions of thermal conductivity and degradation of irradiated SiC/SiC composites by materials-genome-based multiscale modeling // Journal of Nuclear Materials, – 2018, 512, – p. 268-275.

345. Xiangyu, T. Composite Structures Comparison of cutting mechanism when machining micro and nano-particles reinforced SiC/Al metal matrix composites / T. Xiangyu, C. Wanqun, H. Dehong [et al.] // Composite Structures, – 2018, 203, – p. 636-647.

346. Xu, J., Zhou, G., Yang, B. Effect of deposition temperature on the properties of pyrolytic SiC // Journal of Nuclear Materials, – 1995, 224 (1), – p. 12-16.

347. Xunxiang, H. Microstructural evolution of 3C-SiC exposed to simultaneous neutron irradiation and helium implantation / H. Xunxiang, K. Takaaki, Z. Jiangtao [et al.] // Journal of Nuclear Materials, – 2018, 509, – p. 366-376.

348. Xunxiang, H., Takaaki, K., Yutai, K. Positron annihilation spectroscopy investigation of vacancy defects in neutron-irradiated 3C-SiC / H. Xunxiang, K. Takaaki, K. Yutai [et al.] // Phys. Rev. B, – 2017, 95, – p. 104103.

349. Yajima, S., Hayashi, J., Omori, M. Development of a silicon carbide fibre with high tensile strength // Nature volume, – 1976, 261, – p. 683–685.

350. Yako, K. Determination of the Gamow–Teller quenching factor from charge exchange reactions on ^{90}Zr / K. Yako, H. Sakai, M.B. Greenfield [et al.] // Physics Letters B, – 2005, 615 (3–4), – p. 193-199.

351. Yali, Q., Chunyan, L., Xingwang, Z. Enhancing the quantum yield and Cu^{2+} sensing sensitivity of carbon dots based on the nano-space confinement effect of silica matrix // Sensors and Actuators B: Chemical, – 2018, 259, – p. 211-218.

352. Yan, H., Smith, P., Jónsson, H. Atomic structure of b-SiC(100) surfaces: an ab initio study // Surf Sci, – 1995, 330, – p. 265–275.

353. Yang, M. High-temperature dielectric and electromagnetic interference shielding properties of SiCf/SiC composites using Ti_3SiC_2 as inert filler / M. Yang, Z. Wancheng, W. Feng [et al.] // Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, – 2015, 77, – p. 195–203.

354. Yan-Kun, D. The enhanced polarization relaxation and excellent high-temperature dielectric properties of N-doped SiC / D. Yan-Kun, L. Jing-Bo, F. Xiao-Yong [et al.] // *Appl. Phys. Lett.*, – 2014, 104, – p. 052102.
355. Yan-Ru, L. Irradiation-induced microstructural evolution and swelling of 3C-SiC / L. Yan-Ru, K. Ching-Shun, H. Chun-Yu [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2015, – 459, – p. 276-283.
356. Yan-Ru, L. Swelling of ion-irradiated 3C-SiC characterized by synchrotron radiation based XRD and TEM / L. Yan-Ru, H. Chun-Yu, C. Wei-Tsung [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2014, 455, – p. 292–296
357. Yan-Ru, L. Atomic structure of nano voids in irradiated 3C-SiC / L. Yan-Ru, C. Liu-Gu, H. Cheng-Yo [et al.] // *Journal of Nuclear Materials*, – 2018, 498, – p. 71-75.
358. Yaswanth, K.P., Ganapathi, A. Redox synergistic Mn-Al-Fe and Cu-Al-Fe ternary metal oxide nano adsorbents for arsenic remediation with environmentally stable As(0) formation // *Journal of Hazardous Materials*, – 2019, 364, – p. 519-530.
359. Yeom, W. Atomic and electronic-band structures of anomalous carbon dimers on 3C-SiC(001)-c(2 9 2) / W. Yeom, M. Shimomura, J. Kitamura [et al.] // *Phys Rev Lett*, – 1999, 83, – p. 1640–1643.
360. Yingying, L., Wei, X., Huailin, L. Molecular dynamics simulation of C/Si ratio effect on the irradiation swelling of β -SiC // *Journal of Nuclear Materials*, – 2016, 480, – p. 75-79.
361. Yong, C., Xiaozhong, H., Zuojuan, D. Effect of sputtering power on the structure and optical band gap of SiC thin films // *Optical Materials*, – 2017, 73, – p. 723-728.
362. Young-Wook, K., Seung-Hoon, J., Toshiyuki, N. Microstructure and high-temperature strength of silicon carbide with 2000 ppm yttria // *Journal of the European Ceramic Society*, – 2017, 37 (15), – p. 4449-4455.
363. Yu, D.P. Synthesis of nano-scale silicon wires by excimer laser ablation at high temperature / D.P. Yu, C.S. Lee, I. Bello [et al.] // *Solid State Communications*, – 1998, 105, – p. 403–407.

364. Yuchuan, Z. Performance of Fe/SiC catalysts for cracking of toluene under microwave irradiation / Z. Yuchuan, S. Zhanlong, Y. Yecheng [et al.] // *International Journal of Hydrogen Energy*, – 2018, 43, – p. 7227-7236.
365. Yuki, M. Irradiation-induced point defects enhance the electrochemical activity of 3C-SiC: An origin of SiC corrosion / M. Yuki, F. Kazuhiro, K. Sosuke [et al.] // *Electrochemistry Communications*, – 2018, 91, – p. 15-18.
366. Yuko, A., Koki, O., Atsushi, H. Surface modification of single-crystalline silicon carbide by laser irradiation for microtribological applications // *Precision Engineering*, – 2018, 54, – p. 198-205.
367. Yuting, F. Effects of Ni doping and structural defects on magnetic properties of annealed SiC films / F. Yuting, J. Xin, S. Ning [et al.] // *Superlattices and Microstructures*, – 2016, 96, – p. 267-272.
368. Yuxin, C., Huayu, Z., Xingui, Z. Effects of silicon ion irradiation on the interface properties of SiCf/SiC composites // *Ceramics International*, – 2018, 44, – p. 2165-2169.
369. Yuying, Z. Microstructural and thermal property evolution of reaction bonded silicon carbide (RBSC) / Z. Yuying, H. Chun-Yen, A. Steven [et al.] // *Journal of Alloys and Compounds*, – 2018, 764, – p. 107-111.
370. Zahra, P., Zeinab, M., Abdeljalil, A. Ultrasonic assisted synthesis, crystallographic, spectroscopic studies and biological activity of three new Zn(II), Co(II) and Ni(II) thiosemicarbazone complexes as precursors for nano-metal oxides // *Inorganica Chimica Acta*, – 2019, 484, – p. 338-346.
371. Zamani, N., Keshavarz, A., Nadgaran, H. The effect of metal nano particle on optical absorption coefficient of multi-layer spherical quantum dot // *Physica B: Condensed Matter*, – 2016, 490, – p. 57-62.
372. Zhang, Y. Damage accumulation and defect relaxation in 4H-SiC / Y. Zhang, F. Gao, W. Jiang [et al.] // *Phys. Rev. B*, – 2004, 70, – p. 125203.
373. Zhenbao, L. Enhanced irradiation resistance and thermal conductivity of SiC induced by the addition of carbon under Au²⁺ ion irradiation / L. Zhenbao, C. Yejie, L. Wen [et al.] // *Ceramics International*, – 2018, 44, – p. 8521-8527.

374. Zhenglong, L. Preparation of in situ grown silicon carbide whiskers onto graphite for application in Al₂O₃-C refractories / L. Zhenglong, D. Chengji, Y. Chao [et al.] // *Ceramics International*, – 2018, 44 (12), – p. 13944-13950.
375. Ziga, S. Computational validation of the fission rate distribution experimental benchmark at the JSI TRIGA Mark II research reactor using the Monte Carlo method / S. Ziga, B. Loïc, D. Christophe [et al.] // *Annals of Nuclear Energy*, – 2018, 112, – p. 94-108.
376. Ziga, S., Snoj, L. An improved thermal power calibration method at the TRIGA Mark II research reactor // *Nuclear Engineering and Design*, – 2017, 325, – p. 78-89.
377. Zih-Yao, S., Chi-Yao, C., Maw-Tien, L. Recovery of cutting fluids and silicon carbide from slurry waste // *Journal of Hazardous Materials*, – 2019, 362, – p. 115-123.

İXTİSARLARIN SİYAHISI

A1 – Mərkəzi Şüalandırma Kanalı

CC – Mərkəzi Kanal

CF – Dairəvi avtomatik şüalandırma portu

CS – Şüalanmadan Öncəki Nümunə

DSC – Differensial Skanedicı Kalorometr

DTA – Differensial Termoqravometriya

EDP – Elektron Difraksiya Mənzərəsi

EPR – Elektron Paramaqnit Rezonans

FESEM – Sahə Emissiyalı Skanedicı Elektron Mikroskop

HPGe – Yüksək təmizlikli Ge

HRTEM – Yüksək Həssaslıqda Transmissiya Elektron Mikroskop

JSİ – Jozef Stefan İnstitutu

k_0 -INAA – k_0 əsaslı Instrumental Neytron Aktivləşmə Analizi

LEED – Aşağı Enerjili Elektron Difraksiyası

RBP – Slindirik radial şüa portu

RIC – Radiasiya Səbəbindən Elektrik Keçiriciliyi

RPP – Radial boru portu

SAED – Seçilmiş sahədən elektron difraksiyası

SEM – Skanedicı Elektron Mikroskop

SSA – Xüsusi səth sahəsi

STA – Eyni zamanda Termal Analiz

STM – Skanedici Tunel Mikroskopu

TangCh – Silindrik horizontal tangensial şüalandırma kanalı

TEM – Transmissiya Elektron Mikroskop

TG – Termoqravometriya

TGA – Termoqravometrik Analiz

ThCol – Termalizing sütunlu şüalandırma kanalı

TMS – Metal – Yarımqeçirici keçidi temperaturu

VA – Volt – Amper

VAX – Volt – Amper Xarakteristikası

WD – İş Məsafəsi