

AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI

Əlyazması hüququnda

**BOR ƏSASLI BİRLƏŞMƏLƏRİN STRUKTUR ÇEVRİLMƏLƏRİNƏ VƏ
TERMOFİZİKİ XASSƏLƏRİNƏ AĞIR İON, NEYTRON VƏ İONLAŞDIRICI
ŞÜALARIN TƏSİRİ**

İxtisas: 2225.01.-Radiasiya materialşünaslığı

Elm sahəsi: Fizika

Fizika üzrə elmlər doktoru elmi dərəcəsi almaq üçün təqdim edilmiş

DİSSERTASIYA

İddiaçı: _____ F.ü.f.d, dosent, M.N. Mirzəyev

Elmi rəhbər: _____ F-r.e.d, professor, O.Ə. Səmədov

BAKI-2022

M Ü N D Ə R İ C A T

İXTİSARLARIN SİYAHISI.....	5
GİRİŞ.....	7
I FƏSİL. MÜXTƏLİF NÖV ŞÜLARIN TƏSİRİ ALTINDA BOR ƏSASLI BİRLƏŞMƏLƏRDƏ BAŞ VERƏN PROSESLƏRİN ƏDƏBİYYAT İCMALI.....	30
1.1 Bor əsaslı binar, hidrat və kompozit birləşmələrin alınması və kristallik strukturları haqqında ümumi məlumat.....	30
1.1.1 B ₄ C kristalında kristallik quruluşun formalaşma mexanizmi.....	34
1.1.2 Bor nitrid kristalının kristallik strukturu müxtəlif tədqiqat metodlarında.....	41
1.1.3 Si-B qarşılıqlı təsirində quruluş əmələgəlmə formaları.....	46
1.1.4 Müxtəlif fəza quruluşlu B ₂ O ₃ kristalları haqqında məlumat.....	50
1.2 Tədqiqat kristallarında termofiziki xassələrin dəyişmə qanunauyğunluqları....	52
1.3 Kristalların struktur quruluşunda müxtəlif növ şüaların təsiri altında radiasiya defekt əmələgəlmə, migrasiya və rekombinasiya mexanizmləri.....	62
1.4 Ədəbiyyat xülasəsindən alınan mühüm nəticələr, açıq sualların elmi və praktiki qiymətləndirilməsi və dissertasiya işinin əsaslandırılması.....	70
II FƏSİL. TƏDQIQAT KRİSTALLARI, STRUKTUR ANALİZLƏR, ŞÜALANMA VƏ TERMOFİZİKİ XASSƏLƏRİN ÖYRƏNİLMƏ METODİKALARI.....	74
2.1 Tədqiqat kristalları haqqında ümumi məlumat.....	74
2.2 Kristallarda struktur analizləri üçün istifadə olunan metodlar.....	76
2.3 Səth morfologiyasının tədqiq metodları.....	82
2.4 Qamma şüalanma mənbəyi haqqında.....	84
2.5 Sürətli ağır ionlarla şüalanma metodu və SRIM kod analizi.....	86
2.6 Nüvə Reaktoru: Neytron mənbəyi və materialların radiasiya dayanıqlığının tədqiqi üçün şüalanma qurğusu.....	94
2.7 Xətti elektron sürətləndiricidə şüalanma metodu.....	99
2.8 Termofiziki xassələrin öyrənilmə metodu.....	102
2.9 Xətlərin təyin edilməsi.....	109

III FƏSİL. SÜRƏTLİ NEYTRONLARLA ŞÜALANDIRILMIŞ KRİSTALLARIN OPTİK VƏ TERMOFİZİKİ XASSƏLƏRİ.....	110
3.1 Sürətli neytron selinin tədqiqat kristallarının atomları ilə qarşılıqlı təsiri və enerji ötürmə mexanizmi.....	110
3.2 Sürətli neytron selinin təsiri altında defekt əmələgəlmə mexanizminin optik əsasları.....	119
3.3 Termofiziki parametrlərin sürətli neytron selinin təsiri altında dəyişməsi.....	128
3.4 Kristalların termodinamik funksiyaları sürətli neytron selinin təsiri altında.....	150
IV FƏSİL. YÜKSƏK ELEKTRON SELİ İLƏ ŞÜALANDIRILMIŞ B₄C, BN, B₆Si VƏ B₂O₃ KRİSTALLARININ TERMOFİZİKİ XASSƏLƏRİNİN ÖYRƏNİLMƏSİ.....	156
4.1 Elektron selinin tədqiqat kristalları ilə qarşılıqlı təsirinin nəzəri əsasları.	156
4.2 Yüksək elektron selinin təsir altında yaranan radiasiya defektlərinin təbiəti.....	161
4.3 Elektron selinin təsiri altında tədqiqat kristallarında istilik selinin və istilik tutumunun öyrənilməsi.....	171
V FƏSİL. SÜRƏTLİ AĞIR İONLARLA ŞÜALANDIRILMIŞ B₄C, BN, B₆Si VƏ B₂O₃ KRİSTALLARININ SƏTH MORFOLOGİYASI, TERMOFİZİKİ VƏ TERMODİNAMİK KİNETİKASI.....	183
5.1 Sürətli ağır ionların təsiri altında kristalların səth morfologiyasında qabarma mexanizmi.....	183
5.2 $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında ağır ionların təsirinə məruz qalmış kristallarda istilik seli və istilik tutumunun dəyişməsi.....	189
5.2.1. B ₂ O ₃ və BN kristallarında ağır ionların təsiri altında istilik seli və istilik tutumunun dəyişməsi.....	189
5.2.2. B ₆ Si və B ₄ C kristallarında ağır ionların təsiri altında istilik seli və istilik tutumunun dəyişməsi.....	194

5.3	Termodinamik funksiyaların ağır ionların təsiri altında dəyişmə kinetikasi.....	201
VI FƏSİL. QAMMA ŞÜALARI İLƏ ŞÜALANDIRILMIŞ KRİSTALLARDA RƏNG MƏRKƏZLƏRİ VƏ TERMOFİZİKİ XASSƏLƏRİN ÖYRƏNİLMƏSİ...		
6.1	Bor əsaslı kristalların qamma kvantlara qarşı dayanıqlı xüsusiyyətləri haqqında.....	217
6.2	Qamma şüaların təsiri altında səth morfologiyası və kristallik parametirlərin dəyişməsi.....	223
6.3	Qamma şüaların təsiri altında rəng mərkəzlərin formalaşması.....	240
6.4	Yüksək temperaturda qamma kvantları ilə şüalandırılmış kristallarda oksidləşmə mexanizmi.....	246
6.5	Termofiziki xassələrin qamma şüaların təsiri ilə dəyişməsi.....	262
VII FƏSİL. DEFEKT ƏMƏLƏGƏLMƏ MEXANİZMİNİN RİYAZİ ƏSASLARI VƏ MOLEKULYAR DİNAMİKA.....		
7.1	Kristallik struktura enerji ötürmə mexaniziminin riyazi əsasları.....	271
7.2	Formalaşan defektlərin termodinamik funksiyalarını riyazi qanunauyğunluqlarla təyin edilməsi.....	274
7.3	Riyazi modelləşdirilmə əsasında molekulyar dinamika.....	277
7.4	Təcrübi nəticələrin müzakirəsi.....	283
ƏSAS NƏTİCƏLƏR.....		290
DİSSERTASIYA İŞİNDƏ ƏSAS NƏTİCƏLƏRİ ÜZRƏ ÇAP OLUNMUŞ ELMİ İŞLƏRİN SİYAHISI		294
İSTİFADƏ OLUNMUŞ ƏDƏBİYYAT SİYAHISI.....		299

İXTİSARLARIN SİYAHISI

AFM- Atom Qüvvət Mikroskopu

c – kubik fəza quruluş

DSC – Differensial Skanedic Kalorimetr

DTA – Differensial Termoqravometriya

DFT-Sıxlıq Funksiyasının Nəzəriyyəsi

DOS-Hal Sıxlığı

DPA- Atom Sayına Görə Yerdəyişmə

EDP – Elektron Difraksiya Mənzərəsi

EPR – Elektron Paramaqnit Rezonans

EELS-Elektron Enerjisinin İtirmə Spektroskopiya

h – hexaqonal fəza quruluş

HRTEM – Yüksək Ayırdetməyə Malik Transmissiya Elektron Mikroskop

IC-İon Sürətləndirici

keV-Kilo Elektron Volt

m – monoklinik fəza quruluş

MeV – Meqa Elektron Volt

MLS-Çox Qatlı Nümunə

NMRS-Nüvə Maqnit Rezonans Spektroskopiya

o-oktoedrik fəza quruluş

OS-Optik Sıxlıq

PDA-Proton Dopinq Analiz

PPM- Vahid Milyonda Say

SEM – Skanedici Elektron Mikroskop

SS – Spin Spektroskopiya

SSA – Xüsusi Səth Sahəsi

STA – Eyni Zamanda Termal Analiz

SRIM- Maddədə İonların Dayanması və Diapazonu

t - triqonal fəza quruluş

TEM – Transmissiya Elektron Mikroskop

TG – Termoqravometriya

TGA – Termoqravometrik Analiz

WD – İşçi Məsafə

0D-atomlar arası düyün defektlər

1D-xətti defektlər

2D-müstəvi defektlər

3D-qabarmalar, defekt paketlər və tetraqonal defektlər paketi

GİRİŞ

Mövzunun aktuallığı. Radiasiya materilaşunalığının prioritet istiqaməti, kristallik strukturda formalaşan radiasiya defektlərinin öyrənilməsi, müxtəlif növ hissəciklərlə daşınan kinetik enerjinin kristal quruluşa ötürülməsi, enerjinin strukturun həcmi boyu paylanma kinetikasının tədqiqi və yekun prosesləri ümumi hadisələr fonunda analiz olunmasına əsaslanmışdır. Radiasiya proseslərinin təməl prinsipləri hadisələrin zəncirvari ardıcılıqlarına əsaslanır. Proseslərin eyni zamanda baş vermə ehtimalı və sönmüş prosesin xarici təsirlər vasitəsi ilə yeni mexanizmə keçməsi təhlil olunur. Yüksək enerjili hissəciklərin kristallik quruluşa yerləşən atomlarla qarşılıqlı təsiri, kinetik enerjinin kristallik qəfəsin düyünlərində yerləşən atomlara ötürməsi, ilk təsirə məruz qalmış atomlar kaskadının yaranması, kristallik strukturda atomların koordinat və istiqamət yerdəyişməsi, vakansiyaların, atomlar arası düyünlərin, nöqtəvi defektlərin formalaşması və atomlar arası yaxın və uzaq nizamlılığın pozulması kimi mürəkkəb bir mexanizmlə baş verən proseslərin kinetikasından asılıdır.

Bərk cisimlər fizikasının fundamental tədqiqat istiqamətlərindən biri, radiasiyaya davamlı, yüksək entropiyaya malik yeni birləşmələrin və kristalların alınması, müxtəlif ionlaşdırıcı və aqressiv kimyəvi mühütlərə dayanıqlılığının öyrənilməsi mühüm problemlərdən biri kimi araşdırılmaqdadır. Nüvə texnologiyasının ən müasir səviyyədə inkişaf etdiyi bir zamanda daha effektiv radiasiyaya davamlı materialların, birləşmələrin yüksək təmizlik dərəcəsi ilə alınmasının elmi əsaslarının hazırlanması və mühəndis tələblərindən olan “çox funksiyalı” birləşmələrin sintezinə üstünlüyün verilməsidir. Son illərdə radiasiya materialşünaslığında “çox funksiyalı” materiallar kimi istifadə olunan bor əsaslı karbidlərin, silikatların, nitridlərin, oksidlərin və onların çoxlaylı birləşmələrinin müxtəlif şüaların təsiri altında fiziki və kimyəvi xassələrinin öyrənilməsi və radiasiya defektlərinin tədqiqindən alınan yüksək effektiv nəticələr həmin birləşmələrə böyük maraq yaratmışdır. Tətbiq sahəsinə görə “sirli materiallar” adlanan borlu birləşmələr ionlaşdırıcı şüaların təsiri altında yüksək effektiv detektor xassələrinə malikdir. Bu materiallar nüvə reaktorlarında və hərbi sənayedə müxtəlif qoruyucu avadanlıqlarının hazırlanmasında geniş tətbiq tapmışdır.

Son on illikdə yüksək analitik dəqiqliyə malik termofiziki qurğuların əsas tərkib hissələrini təşkil edən elementlər bor əsaslı kristalların yüksək molekulu polimer nümunələrlə əmələ gətirdiyi kompozitlər əsasında hazırlanmaqdadır. Nüvə reaktorlarında neytron uducuların, optik qurğularda, müxtəlif enerjili neytronlar üçün detektorların hazırlanmasında geniş istifadə olunur. Borlu birləşmələr üçün sadalanan bütün xüsusiyyətlər və yaxın illərdə çap olunan tədqiqat işlərindən alınan elmi nəticələrə əsaslanaraq dissertasiya işinin mövzusu dörd əsas mikro B_4C , BN, B_6Si kristalları və nano B_2O_3 kristalı üzərində qurulmuşdur.

Tədqiqat işində geniş araşdırılmış bor karbid (B_4C) kristalı dayanıqlı kimyəvi, fiziki və mexaniki xüsusiyyətləri onun müasir nüvə texnologiyalarında tətbiqinə geniş imkanlar yaratmışdır. Termofiziki xassələrin dəyişməsinə görə bor karbid yüksək temperaturlarda dayanıqlı materiallardan (ərimə temperaturu $2350^\circ C$, buxarlanma temperaturu $3500^\circ C$) hesab olunur. Unikal kristal quruluşa malik bor karbid (kiçik sıxlıqda 2.52 q/sm^3 yüksək mexaniki dayanıqlılıq) nüvə reaktorlarında “yanacaq materiallarının kinetikasını idarə edən çubuqlar” kimi geniş istifadə olunur. B_4C müxtəlif aqressiv mühitlərdə yüksək kimyəvi aşınmaya dayanıqlı və hərbi sənayedə qoruyucu təbəqələrin hazırlanmasında tətbiq tapmışdır.

BN və B_6Si kristalları neytron və qamma şüalarının “qeyd etmə” xüsusiyyətlərinə və yüksək oksidləşmə temperaturuna malik olduğunu nəzərə alaraq geniş temperatur intervalında detektor kimi istifadəsi böyük maraq doğurmuşdur. Bor nitrid kristalının SiC, ZrB, AlN kristalları ilə əmələ gətirdiyi kompozit birləşmələrin termofiziki parametrlərinin (istilik tutumu, istilik keçiriciliyi, termodiffuziya əmsalı) effektiv idarə olunması onların tətbiq sahəsini daha da genişləndirir. Məsələli quruluş strukturu formalaşdıran bor nitrid kristalının bor karbid kristalı ilə əmələ gətirdiyi materialların oksidləşmə müqaviməti təmiz bor karbid kristalı ilə müqayisədə on dəfə çoxdur. Bütün bunlar kristalların mikrostruktur quruluşunu və xassələrini mühəndis tələbləri üçün olduqca əlverişli edir. Qamma şüaları heksaqonal bor nitrid strukturunda kubik BN kristalının faza izlərinin formalaşmasına, kristal quruluşun hibridləşmə formasını dəyişməyə və yüksək temperaturlarda mürəkkən termodinamik

mexanizminin baş verdiyini göstərmişdir. Bor silikatın kristal quruluşda vakansiyaların, sərbəst bor və silisium atomlarının yerdəyişməsi üçün hesablanan aktivləşmə və Gibbs enerjisi, entolpiya və entropiyası mürəkkəb qanunauyğunluqla dəyişməsi həmin kristalların geniş temperatur intervalında istifadəsinə zəmin yaratmışdır.

Tədqiqat obyektlərindən olan triqonal fəza quruluşlu nano B_2O_3 kristalı nüvə texnologiyasında, günəş enerjisinin emal olunmasında, elektron qurğularda və akustik-optik cihazlarda tətbiq sahələri mövcuddur. Bor oksid kristalının yüksək optik xassələri və baza matrisası kimi SiO_2 və Si ilə əmələ gətirdiyi mürəkkəb kompozit birləşmələrin optik parametirlərində və siqnal ötürmə effektivliyində yüksək nəticələr əldə olunmuşdur.

Elektron selinin fokuslanma prosesində bor oksidi nano kristal hissəciklərindən və yüksək ötürmə xüsusiyyətlərinə malik optik liflərin hazırlanmasında geniş istifadə olunmaqdadır. B_2O_3 nano kristallarının bor silikat kristalları ilə müxtəlif molyar konsentrasiyalarda yartadığı strukturlar yüksək refraktiv indeksə və aşağı dağılma xüsusiyyətlərinə malik optik linzaların hazırlanması üçün geniş istifadə edilməkdədir. Optik parametrlərində, yüksək intensivlikli neytron seli ilə şüalanma şəraitində bor oksid kristallarında yeni funksional qruplar haqqında məlumat verən bir sıra araşdırmalar göstərir ki, temperaturun təsiri altında termodinamik xassələrin dəyişməsinin öyrənilməsinə böyük ehtiyac yaranmışdır. Göstərilən aspektləri və qarşıya qoyulan problemlərin həll edilməsi üçün borlu kristallarda temperaturdan asılı olaraq baş verən fəza keçidlərinin təcrübi tədqiqinin yerinə yetirilməsi, müxtəlif şüalanmaların təsiri altında termofiziki effektlərin mexanizminin öyrənilməsi dissertasiya işinin əsas tərkib hissəsini təşkil edir.

Dissertasiya işinin orjinallığı seçilmiş kristallar üzərində fərqli şüalanma (müxtəlif intensivlikli sel sıxlıqlarında və dəyişən enerjilərdə) təsirlərindən sonra geniş temperatur intervallarında termofiziki xassələrin müqayisəli təhlili yerinə yetirilmiş və fəsillər üzrə şüalanma təsirləri altında model təcrübələrin qurulmasından ibarətdir.

Dissertasiya işində göstərilmiş təcrübələr Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Radiasiya Problemləri İnstitutu, Beynəlxalq Hökumətlərarası Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutu, Özbəkistan Elmlər Akademiyası Nüvə Fizikası İnstitutu və İstanbul Texniki Universitetində yerinə yetirilmişdir.

Dissertasiya işinin məqsədi – sürətli neytronlar, yüksək enerjili sürətli ağır ionlar, elektron seli və qamma şüalarının təsiri altında bor əsaslı kristallarda baş verən struktur çevrilmələri, istilik funksiyasının dəyişmə mexanizmi, termodinamik funksiyalar, oksidləşmə kinetikasi və riyazi modelləşdirilmənin tədqiq edilməsindən ibarətdir.

Tədqiqat işində göstərilmiş məqsədlərə nail olmaq üçün aşağıdakı məsələlərin həlli qarşıya qoyulmuşdur:

- Yüksək təmizlik dərəcəsinə malik tədqiqat materiallarının əldə edilməsi (US Research Nanomaterial, Inc., TX, USA və Sky Spring Nanomaterials, USA, Sigma–Aldrich);
- Tədqiqat kristallarında struktur analizlərin yerinə yetirilməsi;
- Enerjisi $E < 1$ MeV olan sürətli neytronlarla kristalları otaq temperaturunda 4.0×10^{12} n/(sm²×san), 8.0×10^{12} n/(sm²×san), 1.37×10^{13} n/(sm²×san), 4.0×10^{14} n/(sm²×san) və 1.0×10^{15} n/(sm²×san) sel sıxlığında şüalandırmaq;
- 2.5 MeV enerjili xətti elektron sürətləndiricidə 4.16×10^{16} sm², 1.20×10^{17} sm² və 1.03×10^{18} sm² elektron seli ilə şüalandırmaq;
- 167 MeV enerjili ¹³²Xe²⁶⁺ ağır ionlarla 5.0×10^{12} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² sel sıxlığında şüalandırmaq;
- 1.173 MeV və 1.332 MeV enerji xəttinə malik ⁶⁰Co mənbəyi ilə 9.7 kQr, 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr udulma dozalarında şüalandırmaq;
- Şüalandırılmış kristalların quruluş analizlərinin yerinə yetirilməsi;
- B₄C, BN, B₆Si və B₂O₃ kristallarını Raman və İQ spektroskopik metodlarla öyrənilməsi;
- Tədqiqat kristallarının sürətli ağır ionlarla şüalanmadan sonra atom qüvvə mikroskopu ilə səth morfologiyasının analizi;

- 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ionları ilə şüalandırılmış B_4C , BN , B_6Si və B_2O_3 kristallarının “SRIM-kod” analizi;
- 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ionları ilə şüalandırılmış B_4C və BN , kristallarının molekulyar dinamikasının nəzəri əsasları;
- B_4C , BN , B_6Si və B_2O_3 kristallarında qamma şüaların, neytron, sürətli ağır ion və elektron selinin təsiri altında termofiziki parametirlərin tədqiqi;

Tədqiqat obyektləri;

- Təmizlik dərəcəsi 99.9 %, xüsusi səth sahəsi $28 \text{ m}^2/\text{q}$, hissəciklərin ölçüsü 1-3 mkm, toz halında sıxlığı $1.8 \text{ q}/\text{sm}^3$ olan romboedrik fəza quruluşlu (r- B_4C) bor karbid mikro kristalları;
- Təmizlik dərəcəsi 99.8%, xüsusi səth sahəsi $76\text{-}120 \text{ m}^2/\text{q}$, hissəciklərin ölçüsü 3-8 mkm, toz halında sıxlığı $2.29 \text{ q}/\text{sm}^3$ olan heksaqonal fəza quruluşlu (h- BN) bor nitrid mikro kristalları;
- Təmizlik dərəcəsi 99.5 %, xüsusi səth sahəsi $68 \text{ m}^2/\text{q}$, hissəciklərin ölçüsü 40 mkm, toz halında sıxlığı $2.43 \text{ q}/\text{sm}^3$ olan heksaqonal fəza quruluşlu (h- B_6Si) bor silikat mikro kristalları;
- Təmizlik dərəcəsi 99.99 %, xüsusi səth sahəsi $32 \text{ m}^2/\text{q}$, hissəciklərin ölçüsü 80 nm, toz halında sıxlığı $2.6 \text{ q}/\text{sm}^3$ olan tetraqonal fəza quruluşlu (t- B_2O_3) bor oksid nano kristalları istifadə olunmuşdur.

İşin elmi yenilikləri aşağıdakılardan ibarətdir: Təqdim olunan dissertasiya işində ilk dəfə:

- Sürətli neytron sellinin təsiri ilə nano bor oksid kristal təbəqəsi üzərində atmosferdən absorbsiya olunmuş su molekullarının parçalanma mexanizminin əsasları verilmişdir;
- Sürətli neytron sellinin təsiri altında nano B_2O_3 kristallarında kristallik ölçüsünün dəyişməsi müəyyən olunmuşdur;
- Nano B_2O_3 kristallarında fərqli sürətli neytron seli ilə şüalanmadan sonra baş verən termofiziki keçidlərin mexanizmi təyin olunmuşdur;
- Bor nitrid mikro kristallarında $300 \leq T \leq 1300 \text{ K}$ temperatur intervalında

sürətli neytronların təsiri altında Vigner enerjisinin qiyməti müəyyən olunmuşdur;

- Elektron selinin təsiri altında bor karbid və bor silikat kristallarında qəfəs parametirlərinin və həcmnin dəyişməsi aşkar olunmuşdur;
- $100 \leq T \leq 300 \text{K}$ temperatur intervalında elektron selinin təsiri altında B_4C və B_6Si kristallarında istilik keçiriciliyi və termodiffuziyanın qiymətləri müəyyən olunmuşdur;
- 167 MeV enerjili sürətli ağır $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ionları ilə şüalandırılmış kristalların səth morfologiyasında qabarmaların paylanması öyrənilmişdir;
- $100 \leq T \leq 300 \text{K}$ temperatur intervalında tədqiqat kristallarında termofiziki parametrlər və termodinamik funksiyaların dəyişməsi müəyyən olunmuşdur;
- Sürətli ağır ionların təsiri altında tədqiqat kristallarında struktur defektlərin riyazi əsaslarla molekulyar dinamikası hazırlanmışdır;
- 167 MeV enerjili sürətli ağır $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ionları ilə şüalandırılmış B_4C , BN, B_6Si və B_2O_3 kristallarında $300 \leq T \leq 1300 \text{K}$ temperatur intervalında termodinamik funksiyaların qiymətləri təyin olunmuşdur;
- B_4C kristalında qamma kvantların təsiri altında formalaşan rəng mərkəzlərinin təbiəti və enerjisi hesablanmışdır;
- Qamma şüalanmanın təsiri altında B_4C və B_6Si kristallarında temperaturdan asılı oksidləşmə mexanizmi və oksid təbəqəsinin dərinliyi müəyyən olunmuşdur;
- Qamma şüalanmanın təsiri altında element və amorflaşma xəritəsi, atomlar arası məsafə və qəfəs parametrlərinin qiymətləri müəyyən olunmuşdur;

İşin praktiki əhmiyyəti: Dissertasiya işinin praktik əhəmiyyəti borun keramik və oksid əsaslı kristallarında müxtəlif enerjili və dəyişən sel sıxlığında şüalanmalardan sonra termofiziki parametrləri, səth morfologiyasının quruluşu, struktur və optik parametrlərinin müqayisəli şəkildə tədqiq edilməsindən ibarətdir. Tədqiq olunan kristallar üzərində müxtəlif şüalanmaların təsiri ilə yerinə yetirilən model təcrübələrdən (quruluş, Raman və İQ spektroskopik analizlər, Atom Qüvvət Mikroskopu (AFM) və Skanedicci Elektron Mikroskopdan) aydın olur ki, bor kristalları

şüalanma növlərində asılı olmayaraq kifayət qədər radiasiyaya davamlı və praktik olaraq prespektivlidir.

Dissertasiya işində qarşıya qoyulan məsələlərin həlli zamanı müəyyən olunmuşdur ki, temperaturdan asılı olaraq fərqli şüalanma şərtlərində B_4C , BN və B_6Si kristallarının səthində qabarma mexanizmi zəif xarakterlidir. Geniş temperatur intervalında borun keramik birləşmələrində oksidləşmə kinetikasi və oksid təbəqəsinin qalınlığı üçün termofiziki şərtlər müəyyən olunmuşdur. Təyin olunmuş termofiziki parametirlərə əsasən kristalların praktik temperatur intervalında işləmə qabiliyyəti, faydalı iş əmsalı və modernizasiya dövrünün tarixini öncədən təyin etməyə imkan yaradır. Alınan nəticələr əsaslanaraq nüvə qurğularında, eyni zamanda qeyd olunan şüalanma şərtlərində çalışan avadanlıqlarda oksidləşmə mexanizminin təbiəti, detektor və uducu materialların istismar müddəti haqqında məlumat hazırlanır.

Müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar:

- Tədqiqat kristallarında struktur defektlərinin təbiəti və defektəmələgəlmə mexanizmi müxtəlif metodlarla öyrənilmişdir;
- Müxtəlif şüalanma şərtlərində otaq temperaturundan aşağı temperaturlarda termofiziki parametirlərin dəyişmə qanunauyğunluqları;
- Kristallik ölçünün şüalanma təsirləri altında dəyişməsi;
- Vigner enerjisinin təbiəti və temperaturdan asılılığı kinetikasi;
- Sürətli ağır ionlarla şüalanma zamanı səth morfolojiyasında “qabarma” mexanizminin öyrənilməsi;
- Qamma kvantların təsiri altında formalaşan rəng mərkəzlərinin təbiətinin öyrənilməsi;
- Qamma kvantlar və yüksək temperaturda oksidləşmə mexanizmi və oksid təbəqəsinin qalınlığı;
- Sürətli ağır ion şüalanmanın təsiri altında amorflaşma mexanizminin dəyişməsi və kristallik ölçünün qiyməti tədqiq edilmişdir.

İşin aprobasiyası:

Dissertasiya işi müxtəlif materiallar üzrə beynəlxalq və ölkədaxili konfranslarda məruzə və müzakirə edilmişdir. Alınmış nəticələr beynəlxalq və ölkədaxili elmi seminar və konfranslarda aşağıda qeyd olunan məruzələr şəklində təqdim olunmuşdur.

- Radiation Processes and Their Applications, 68-89/, November 13-15, 2018, Baku, Azerbaijan
- 18th International Conference on Radiation Physics and Chemistry of Condensed Matter, EFRE – 2018, 528/, 2018, September 16-22, Tomsk, Russia
- Modern Trends in Condensed Matter Physics, MTCMP – 2018, 118/, 2018, September 24-26, Baku, Azerbaijan
- The Ninth International Conference "Modern Problems of Nuclear Physics and Nuclear Technologies", 262/, 2019, September 24-27, Tashkent, Uzbekistan
- 7th International Conference on Energy Fluxes and Radiation Effects, EFRE – 2020, 459/, 2020, September 14-25, Tomsk, Russia
- Радиационная Физика Твёрдого Тела, 313-315/?, 2021, 05-10 июля, Севастополь, Россия.
- Natural disasters and human life safety, 2017, Baku, Azerbaijan
- 3rd International Regional Development and The Role of Universities Symposium, November 21-22, 2019, Bandırma, Balıkesir, Turkey
- Journal of Physics: Conference Series 1492 (1), 012054, 2020.
- Second International Scientific Conference of Young Scientists on “Multidisciplinary approaches in solving modern problems of fundamental and applied sciences, 03–06 March 2020, Baku, Azerbaijan.

Nəşrlər: Dissertasiya işinin əsas məzmunu dünyanın nüfuzlu elmi jurnallarında nəşr edilmiş 16 məqalə və 8 beynəlxalq konfransda tezis, həmçinin ölkədaxili jurnallarda nəşr edilmiş 6 məqalə və 3 konfransda tezis kimi öz əksini tapmışdır. Dissertasiya işinin əsas nəticələri 21 məqalə və 12 tezis olmaqla ümumilikdə 33 elmi əsərdə dərc olunmuşdur.

Dissertasiya işinin quruluşu və həcmi. Dissertasiya işi giriş, yeddi fəsil, nəticə və ədəbiyyat siyahısından ibarətdir. Təqdim olunan iş 333 səhifə, 145 şəkil və 42 cədvəldən və 413515 işarədən ibarətdir. İstifadə olunmuş ədəbiyyat siyahısı müəllifin məqalələri də daxili olmaqla 308 saydadır.

Giriş hissəsi dissertasiya işinin əsaslandırılması və aktuallığı, tədqiqat materiallarının çox funksiyalı xüsusiyyətləri, texnoloji olaraq praktik əhmiyyəti və müdafiyyə olunacaq mövzunun əsas müddəalarından ibarətdir.

Birinci fəsildə borun keramik və oksidlərində kristallik quruluşun formalaşma mexanizmi, müxtəlif tərkibli strukturların alınması və borun atom konsentrasiyasından asılı olaraq fərqli fəza modifikasiyalarının qısa icmalına diqqət yönəlmişdir. Müxtəlif enerji və sel sıxlıqlı şüalanma qurğuları ilə aparılan təcrübələrdə, həmçinin fərqli ion selinin borlu birləşmələrin atomlarına ötürdüyü kinetik enerjinin strukturda paylanma qanunauyğunluqları öyrənilmişdir.

Fəsildə radiasiya təsirindən yaranan xarakterik hadisələrin təbiətini öyrənmək üçün tələb olunan biliklər, qarşılıqlı təsir mexanizminin əsaslandırılması, radiasiya təsirindən sonra kristallarda quruluşun amorflaşma mərhələləri və proseslərdən alınan nəticələrə görə qiymətləndirilmə göstərilmişdir. Sadə modellərdən başlayaraq, temperatur və təzyiqlərdə kristallik strukturda enerji keçidləri, atomların quruluşda yerdəyişməsi, ionlaşdırıcı şüaların təsiri ilə atomların kristallik həcmdə hərəkətinin ədəbiyyat icmalına nəzər salınmışdır. Kristallik quruluşdan enerjinin şüalanma selindən asılılığı, struktura ötürülən kinetik enerjinin effektiv qiyməti, qarşılıqlı təsirin ehtimalı və ilk təsirə məruz qalmış atomların sayının fərqli enerjilərdə yerini dəyişən atomların sayına olan nisbətinin təyin edilməsinə baxılmışdır. Şüalanmış bor tərkibli kristallarda defektlərin əmələgəlməsinin zaman, proses və mexanizm nöqtəyi nəzərdən analizi aparılmışdır. Şüalanma zamanından asılı olaraq kristal strukturda enerji, atomların yerdəyişməsi, spontan rekombinasiya, klasterlərin formalaşması, defekt reaksiyası və termik miqrasiya kimi mürəkkəb proseslər araşdırılmışdır. Atomlar kaskadının yerdəyişməsi, stabil Frenkel və klaster defektlərinin rekombinasiya tutulması və miqrasiyası öyrənilmişdir.

Fəsilin sonunda B_2O_3 , B_4C , B_6Si və BN kristallarında fərqli temperaturlarda termofiziki parametrlər, birləşmələrin ionlaşdırıcı mühitlərdə tətbiqi və radiasiyon defektəmələgəlmənin ədəbiyyat xülasəsi, qarşılıqlı müqayisəsi və dissertasiya işinin əsaslandırılması verilmişdir.

İkinci fəsildə tədqiqat üçün seçilmiş kristalların nano və mikro halda sıxlığı, təmizlik dərəcəsi, hissəciyin ölçüsü, xüsusi səthin sahəsi, kristal birləşmədə kütlə nisbəti, ərimə və buxarlanma temperaturu, kimyəvi sərtliyi və müxtəlif şüalanma metodları haqqında geniş məlumat verilmişdir. Quruluş analizi, fəza quruluşlarının təyini, kristal qəfəsdə atomlar arasındakı məsafənin dəyişməsi, qəfəs parametrləri, səth morfologiyası (SEM), səthdə və həcmdə defektlərin təbiəti, şüalanmadan sonra səthdə formalaşan qabarmaların və amorflaşma prosesinin öyrənilməsi məqsədi ilə infraqırmızı, Raman spektroskopik və atom qüvvət mikroskopu (AFM) analizləri haqqında məlumat verilmişdir.

Qamma kvantlarla şüalanma Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Radiasiya Problemləri İnstitutunun, Yüksək Texnologiyalar Parkında yerləşən K-25 nömrəli Co^{60} qamma izotop mənbəyindən istifadə olunaraq yerinə yetirilmişdir. Riyazi modelləşdirmədən alınan qiymətlər əsasında qamma şüalanmanın udulan dozası üçün metodologiya hazırlanmışdır. Paralel şüalandırılmış Fe_3O_4 birləşməsində elektron buludunun sıxlıq dəyişməsinə görə qamma şüaların udulma dozasının qiymətlər üçün müqayisəli təhlili aparılmışdır. 1.17 MeV və 1.33 MeV enerji xəttinə malik, qamma kvantlar buraxan ^{60}Co izotopu ilə nümunələr (doza gücü $D=0.27$ Qr/san) 9.7 kQr, 48.6 kQr, 97.2 kQr, 145.8 kQr və 194.4 kQr udulma dozalarında otaq temperaturunda şüalandırılmışdır.

Sürətli ağır ionlarla nümunələrin şüalandırılması Rusiya Federasiyasının Dubna şəhərində yerləşən Beynəlxalq Hökumətlərarası Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutunun Nüvə Reaksiyaları laboratoriyasının “Nano texnologiyada ion implantasiya və radiasiya materialşünaslığı” sektorunda yerləşən “IC-100” ion sürətləndiricidə yerinə yetirilmişdir. Təcrübələr cərəyan şiddəti 2 mka olan $^{132}Xe^{26+}$ ionları ilə yerinə yetirilmişdir. Təcrübələrin məqsədindən asılı olaraq $^{40}Ar^{7+}$ (cərəyan

şiddəti >2 mkA), $^{56}\text{Fe}^{10+}$ (cərəyan şiddəti >0.3 mkA), $^{127}\text{I}^{22+}$ (cərəyan şiddəti >0.25 mkA), $^{132}\text{Xe}^{24+}$ (cərəyan şiddəti >0.6 mkA) və $^{182}\text{W}^{32+}$ (cərəyan şiddəti >2 mkA) ionlarından istifadə etmək mümkündür.

Təcrübi xətalardan aradan qaldırılması məqsədi ilə yüksək maqnit sahəsi ion selinin fokuslanmasına imkan yaradır və orta maqnit sahəsində mövcud xətalardan azaldır. Polimer təbəqələrin şüalandırılması üçün məxsusi izolə olunmuş ötürücü kanal seli yaradılmışdır. Göstərilən kanalda böyük səth sahəsinə malik materialların ağır ionlarla şüalandırılması həyata keçirilir. Əlavə olunmuş iki ədəd yüksək tezlikli generatorlar vasitəsi ilə selin xassəsini dəyişmək, parametrlərin idarə olunması, çıxışda optimal sıxlıqda selin alınması və sabit elektirik cərəyanının uzun müddət saxlanması təmin olunur. Tədqiqat üçün seçilmiş nümunələr otaq temperaturunda 5.0×10^{12} ion/sm², 1.0×10^{13} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² sel sıxlıqlarında 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ionları ilə şüalandırılması həyata keçirilmişdir. Şüalanma zamanı nümunələrin temperaturu maksimum qiyməti 50 °C ətrafında dəyişir. 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ionları üçün DPA və SRIM kod analizləri yerinə yetirilmişdir.

Rusiya Federasiyasının Dubna şəhərində yerləşən Beynəlxalq Hökumətlərarası Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutunun Frank adına Neytron Fizikası laboratoriyasında yerləşən, implus rejimində çalışan nüvə reaktoru müxtəlif elmi və praktiki tədqiqatların həyata keçirilməsi üçün geniş istifadə olunan, kompakt aktiv zonaya malik və hal hazırda dünyada mövcud olan nadir tədqiqat nüvə reaktorlarından biri hesab olunur. Müxtəlif rejimlərdə işləyən tədqiqat nüvə reaktorlarında neytron selinin fərqli sıxlıq və rejimlərdə alınması həyata keçirilməkdədir. Kristalların neytronlarla şüalandırılması implus rejimində, üç nömrəli üfqü kanalında, neytron selinin differensial energetik sıxlığı və qamma şüalanmanın udulan dozası məlum olan, enerjisi 1 MeV, maksimum neytron sıxlığı 40 mm məsafədə 10^{18} n/(sm²×san), 0.3 m məsafədə 4.0×10^{17} n/(sm²×san) bərabər olan kanalında yerinə yetirilmişdir. Qamma şüalanma hesabına udulan doza 40 mm məsafədə 100 MQr (10^8 C/kq), 0.3 m məsafədə 40 MQr ekvivalentdir. Təcrübənin tələblərinə uyğun olaraq kristallar 10 mq kütlələr

şəklində hazırlanmış və alminium qablara yerləşdirilmiş, otaq temperaturunda 15 gün müddətində 4.0×10^{12} n/(sm²×san), 8.0×10^{12} n/(sm²×san), 1.37×10^{13} n/(sm²×san), 4.0×10^{14} n/(sm²×san) və 1.0×10^{15} n/(sm²×san) sürətli neytron seli ilə şüalanması həyata keçirilmişdir. Şüalanma bitdikdən sonra on dörd gün qamma aktivləşmə analizi aparılmış, nümunələrin radiasiya aktivliyi normativ qaydalara uyğun olduğundan sonra onlar üzərində müxtəlif təcrübi tədqiqatlar icra olunmuşdur.

Tədqiqat işi üçün seçilmiş kristallar elektron seli ilə şüalandırılması Özbəkistan Respublikasının Elmlər Akademiyasının Nüvə Fizikası İnstitutunda yerləşən “Elektronika Y-003” xətti elektron sürətləndiricidə yerinə yetirilmişdir. Kristallar otaq temperaturunda 2.5 MeV enerjili 4.16×10^{16} sm², 1.20×10^{17} sm², 1.03×10^{18} sm² elektron seli ilə şüalandırılmışdır.

Aşağı və yüksək temperaturlarda termofiziki xassələr, istilik sel funksiyası, istilik tutumu, istilik keçiriciliyi, termodiffuziyanın qiymətləri, termodinamik funksiyaların təyini aparılmışdır. Termofiziki parametrlər “Perkin Elmer” STA 6000, DSC3 STAR^e Systems METTLER TOLEDO və NETSCHE DSC 204 F1 Phoenix cihazlarında yerinə yetirilmişdir. İşçi oblast $100 \leq T \leq 1300$ K, termik işləmə sürəti 5 °C/min, PolyScience analizatoru və “digital temperature controller” soyuducu sistemlər, “Pyris Manger” proqram təminatından istifadə olunaraq termofiziki parametrlərin təyini və dəyişməsi tədqiq edilmişdir.

Üçüncü fəsilə B₄C, B₆Si, BN və B₂O₃ kristalları implus rejimdə, E<1 MeV enerjili, 4.0×10^{12} n/(sm²×san), 8.0×10^{12} n/(sm²×san), 1.37×10^{13} n/(sm²×san), 4.0×10^{14} n/(sm²×san), 1.0×10^{15} n/(sm²×san) sürətli neytron selində şüalanmadan sonra tədqiqat kristallarının atom nüvələri ilə baş verən mümkün elastiki və qeyri elastiki qarşılıqlı təsirin təbiəti, defekt əmələgəlmə mexanizmi, neytron selinin qəfəsin düyün nöqtələrində yerləşən atomlarla qarşılıqlı təsir ehtimalı və atoma ötürülən kinetik enerjinin qiymətində yaranan məhdudiyyətlər haqqında geniş məlumat verilmişdir.

Neytron şüalanmanın təsiri altında formalaşan defektlərin tədqiqi, qarşılıqlı təsire məruz qalan atomlar kaskadının formalaşması, ötürülən enerjinin çarpaz en kəsiyi, məlum kütləli atomdan başlanğıc enerjili sürətli neytronların səpilmə bucağının

ehtimalı və qarşılıqlı təsirdə olan atomlara ötürülən enerjinin qiyməti əsasında yaranan proses haqqında məlumat verilmişdir. Neytron selinin kristal strukturda yolu və atom nüvəsi ilə səpilmənin əvvəl və sonra laborator rejimində yaxınlaşmalarına baxılmışdır. Neytronun atom ilə qeyri elastiki səpilməsi zamanı baş verən nüvə reaksiyaları, yeni izotopların alınması, neytronun udulma və buraxma prosesində itirilən kinetik enerji, və atom nüvəsinin həyəcanlaşması ilə nəticələnən proseslər ardıcılığına baxılmışdır.

Qeyri elastiki toqquşma zamanı neytronun nüvə tərəfindən udulması, yeni həyəcanlaşma nəticəsində neytron və qamma şüaların buraxılması ilə yekunlaşan proseslər, ardıcıl reaksiyalarda qamma şüaların buraxılması və qarşılıqlı təsir prosesinin kinetikasi, sürətli neytronlarla şüalandırılmış tədqiqat kristallarında əlavə qamma təsirlərin nəzərə alınması vacib faktorlardan (nümunələr sırasında ən mürəkkəb nüvə çevrilməsi B atomu ilə baş verir) hesab olunmuşdur. Tədqiqat kristallarının struktur düyünlərində yerləşən atomlarla neytron selinin elastiki və qeyri elastiki qarşılıqlı təsir mexanizmi göstərilmişdir.

Otaq temperaturunda nano B_2O_3 kristallarının səthində zəif kimyəvi qarşılıqlı təsir nəticəsində absorbsiya olunmuş su molekullarının sürətli neytron selindən asılı olaraq parçalanma mexanizmi infraqırmızı və Raman spektrometrik analizlər vasitəsi ilə geniş tədqiq edilmişdir. Raman və infraqırmızı spektroskopik tədqiqatlar kristal strukturlarında (sp^2 və sp^3 karbon birləşmələri üçün hibridləşmə reaksiyaları daxil olmaqla), amorflaşma və oksidləşmə mexanizminin kinetikasi əsaslı şəkildə izah etmək mümkündür.

Tədqiqat məqsədindən asılı olaraq seçilmiş lazerin dalğa uzunluğu və enerjisinin dəyişməsi şüalanma təsiri altında amorflaşma kinetikasını və hissəciyin kristallik ölçüsü haqqında məlumat verir. Geniş temperatur intervalından (aşağı və yüksək temperaturalarda) termofiziki xassələr tədqiq edilmiş, istilik seli və istilik tutumunun eksperimental qiymətləri qarşılıqlı analiz olunmuş, effektlərin sahə və Viqner enerjisinin qiymətləri təyin olunmuşdur. Fəslin sonunda temperatur və neytron selinin təsiri altında (şüalanma faktorundan asılı olaraq) oksidləşmə və amorflaşma kinetikasi öyrənilmişdir.

Dördüncü fəsildə göstərilən tədqiqatlarda istifadə olunan kristallar 2.5 MeV enerjili $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$ və $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron seli ilə otaq temperaturunda şüalandırılmışdır. Elektron selinin kristalın atomları ilə mümkün elastiki və qeyri elastiki qarşılıqlı təsirin nəzəri və təcrübi əsasları araşdırılmış və kristallik həcmə ötürülən enerjinin mexanizmi verilmişdir. Qarşılıqlı təsiri xarakterizə edən vacib parametrlərin elastiki səpilmə zamanı elektronun hərəkət trayektoriyası və enerji dəyişməsi təhlil olunmuşdur. Yüksək enerjili elektronların yarımkeçirici, seqnotoelektirik, nazik təbəqəli materiallarla qarşılıqlı təsir mexanizmi əsasında baş verən hadisələrlə müqayisəli təhlili aparılmışdır. Tədqiqat materiallarının fiziki xassələrindən, sıxlığından və həndəsi parametrlərindən asılılıq kinetikasi qurulmuş, nazik təbəqələr fizikasında yüksək enerjili elektronların hərəkət kinetikasi və yaratdığı təsirlərin ehtimalları analiz edilmişdir. Şüalandırılmış kristalların quruluş strukturunda baş verən radiasiya effektlərinin analizi Raman spektrometrik tədqiqatlarla yerinə yetirilmişdir. Elektron şüaların bor karbid kristalının struktur parametrlərinə təsiri rentgen difraksiyası metodu ilə aparılmış tədqiqatlardan məlum olmuşdur. Normal şəraitdə və otaq temperaturunda $(B_{12})CBC$ kristal quruluşun R-3m fəza qruplu romboedrik simmetriyaya uyğun gəlidiyi müəyyən olunmuş, alınmış nəticələrə əsaslanaraq $4.16 \times 10^{16} - 1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ intervalında elektron selinin təsiri ilə şüalandırılmış bor karbid kristallarının quruluşunda faza keçidi yaranmır. Şüalanma seli artdıqca qəfəs parametrlərinin qiymətlərində azalma müşahidə olunmuşdur. Elektron selinin təsiri ilə kristal daxilindəki defektlərin rekombinasiyası, rabitələrin yerdəyişməsi nəticəsində rabitələrin möhkəmlənməsi baş verir. Raman spektrlərində $(B_{12})CBC$ quruluşlu strukturda intensiv və dublet modaların müxtəlif elektron sellərdən asılı olaraq təhlili aparılmış və Raman aktivlərində pozulmuş rabitələrin meydana gəlməsi müəyyən olunmuşdur.

Aşağı temperaturlarda kristalların temperaturdan asılı olaraq istilik seli funksiyasının dəyişməsi, istilik tutumunun qiyməti, termodinamik funksiyaların təyin edilməsinin analizləri aparılmışdır. Müəyyən olunmuşdur ki, elektron selinin sıxlığından asılı olmayaraq nümunələrdə xüsusi istilik tutumunun dəyişmə kinetikasi

istilik selinin dəyişməsi ilə eyni mexanizmə malikdir. İstilik tutumunun temperatur asılılığından müəyyən olunmuşdur ki, şüalanma selindən asılı olmayaraq nümunələr üçün xüsusi istilik tutumunun qiyməti artan qanuna uyğunluqla dəyişir.

Şüalanmamış B_4C kristalında 100K-də istilik keçiriciliyinin qiyməti $0.0247 \text{ Vt/sm} \times K$, $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron selində $0.02401 \text{ Vt /sm} \times K$, 300 K qiymətindən B_4C istilik selinin qiymətində dəyişmə müşahidə olunmuşdur. B_6Si kristalında 120-300 K temperatur intervalında istilik keçiriciliyinin qiyməti $0.0175-0.035 \text{ Vt/sm} \times K$ intervalında, $4.16 \times 10^{16}-1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron selinin aralığında $0.015-0.0335 \text{ Vt/sm} \times K$ təyin olunmuşdur. Yüksək enerjili elektronlarla şüalanmış B_4C və B_6Si kristallarının termik diffuziya qiyməti 100-300K temperatur intervalında aşağıdakı kimi dəyişir. Şüalanmamış B_4C kristalı üçün $0.791-0.806 \text{ sm}^2/\text{san}$, 4.16×10^{16} , 1.20×10^{17} , $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron selində $0.808-0.794 \text{ sm}^2/\text{san}$, $0.798-0.716 \text{ sm}^2/\text{san}$, $0.767-0.690 \text{ sm}^2/\text{san}$ və B_6Si kristalı üçün termik diffuziyanın qiyməti $0.576-0.591 \text{ sm}^2/\text{san}$, 4.16×10^{16} , 1.20×10^{17} , $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron selində $0.577-0.579 \text{ sm}^2/\text{san}$, $0.54-0.559 \text{ sm}^2/\text{san}$, $0.44-0.566 \text{ sm}^2/\text{san}$ olması müəyyən olunmuşdur.

Beşinci fəsilə müxtəlif nano və mikro ölçülərə malik kristallar sürətli ağır ion şüalanma üçün həndəsi formalar şəklində hazırlanmış və səth morfologiyasının cilalanması yerinə yetirilmiş, 167 MeV enerjili sürətli ağır $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ionları ilə müxtəlif $5.0 \times 10^{12} \text{ ion/sm}^2$, $5.0 \times 10^{13} \text{ ion/sm}^2$, $1.0 \times 10^{13} \text{ ion/sm}^2$ və $3.83 \times 10^{14} \text{ ion/sm}^2$ sel sıxlıqlarında otaq temperaturunda yüksək vakuüm şəraitində B_4C , B_6Si , BN və B_2O_3 kristalları şüalandırılmışdır.

İon şüalanması zaman mikrostrukturda yeni fazanın formalaşması, səth morfologiyasının dəqredasiyası və səthdə baş verən unikal proseslərə diqqət yetirilmişdir. Şüalanma zamanı kristalların səthində radiasiya təsirlərinin yaranması, radiasiya eroziyasının formalaşması və radiasiya eroziyası baş verir. Eroziya sürətinin ionlar üçün səpilmə əmsalı və səthdən buraxılan amtomların orta sayı ilə xarakteristikasına baxılmışdır. Eroziya əmsalı strukturdan, nümunənin tərkibindən, qarşılıqlı təsirdə olan ionların enerjisindən, parametrlərindən və geometriyasından asılıdır. İonların orta kütləsi və enerjisi üçün eroziya əmsalının $0.5 \leq Y \leq 20$ intervalında

dəyişməsi öyrənilmişdir. Səpilmə prosesi zamanı səthdən sürətli ionların təsirinə məruz qalmış atomların buraxılması, qarşılıqlı təsirdə olan atomlara enerjinin ötürülməsi və atomların sıçrayışlı yerdəyişmə kinetikasi tədqiq olunmuşdur. Həmçinin, ionların intensivliyindən və enerjisindən asılı olaraq nümunələrin mikrostrukturda yeni qabarmaların formalaşmasının əsaslandırılması yerinə yetirilmişdir.

Yüksək enerjili təsirsiz qazların ionları ilə baş verən şüalanmanın effektivliyi, real olaraq nüvə reaktorlarının divarlarında yaranan təcrübələrə ekvivalentliyi saxlamaq şərti ilə laborator şəraitdə həyata keçirilmişdir. Tədqiqat kristallarının səthində ağır ionların nüfuz etmə dərinliyinin riyazi modelləşdirilməsi aparılmış və səth morfologiyasının struktur mexanizmi atom qüvvət mikroskopu ilə ətraflı araşdırılmışdır. $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında arqon mühitində istilik selinin funksiyası, istilik tutumunun kinetikasi və termodinamik funksiyaların analizi və alınmış termofiziki parametrlərin qiymətləri üçün müqayisəli təhlil aparılmışdır.

İstilik selinin funksiyası BN və B_2O_3 kristalları üçün şüalanmamış və müxtəlif sel sıxlığında şüalandırılmış hallarda təhlil olunmuş, istilik selinin termik kinetikasi analiz edilmiş və istilik funksiyasının temperaturdan asılı olaraq $100 \leq T \leq 300$ K intervalda təhlili aparılmışdır. Hər iki tədqiqat kristalında istilik selinin qiyməti -2 mVt ilə maksimum 2 mVt arasında dəyişir. İstilik selinin başlanğıc və son qiymətləri, istilik sürəti (nümunənin argon mühütündə qızma sürəti), kütləsi və kalibirləşmə faktorlarını nəzərə almaqla istilik kinetikasının mexanizmi haqqında məlumat verilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, BN və B_2O_3 kristallarının müxtəlif sel sıxlıqlarında malik sürətli $^{132}Xe^{26+}$ ağır ionları ilə şüalandırdıqdan sonra DSC əyriyə region hissələrə bölünmüşdür.

Şüalanmamış BN kristalında mərkəzi piki 217 K uyğun olan effekt müşahidə olunmuş, uyğun faza keçidinin termofiziki parametrləri (xüsusi istilik tutumu $3.02 C/q \times K$, aktivləşmə enerjisi $0.23 C \times mol$ və entolpiyası $0.0213 C/q$) təyin olunmuşdur. Şüalanmadan sonra mərkəzi piki 217 K olan effektin termofiziki parametrlərinin qarşılıqlı müqayisəsi göstərir ki, sürətli ağır ionların təsiri altında baş verən keçid qeyd olunmur. BN kristalında istilik selinin ötürülməsi və selinin dəyişməsi, B_2O_3

kristalından fərqli olaraq $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında fərqli fazalarda dəyişir.

$100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında 5.0×10^{12} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² sel sıxlığında şüalanmış BN və B₂O₃ kristallarının xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığı tədqiq olunmuşdur. Ağır ionlarla şüalanmadan əvvəl kristalların xüsusi istilik tutumunun qiyməti $0.0053 \text{ C/q} \times \text{K}$ qədər artır və 200 K başlayaraq 300 K olan temperatur intervalında sabit qiymət alır. 5.0×10^{12} ion/sm² və 5.0×10^{13} ion/sm² seldə istilik tutumunun qiymətinin dəyişməsi baş vermir və qeyd olunmuş temperatur intervalında xüsusi istilik tutumu $0.0127 \text{ C/q} \times \text{K}$ və $0.0153 \text{ C/q} \times \text{K}$ intervalında artır. 3.83×10^{14} ion/sm² şüalanma selində istilik tutumunun qiyməti 0.0165 - $0.0515 \text{ C/q} \times \text{K}$ aralığında dəyişir.

Ancaq yüksək sel sıxlığında şüalanmış nümunələrdə xüsusi istilik tutumunun artması səth morfologiyasında ionlarla şüalanma zamanı dəyişən morfologiyanın quruluşu ilə bağlıdır. Qeyd etmək lazımdır ki, həm bor nitridə həm də bor oksid kristallarında istilik tutumunun qiymətinin artması ağır ionun seli ilə düz mütənasibdir. İstilik tutumunun bor oksid kristalı üçün $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında dəyişmə kinetikasi müxtəlif riyazi tənliklərlə ifadəsi müəyyən olunmuşdur. Fəsilin sonunda tədqiqat kristalları müxtəlif sel sıxlıqlarında şüalanmadan sonra istilik keçiriciliyinin, termodiffuziyanın qiyməti və termodinamik funksiyalar təyin olunmuşdur. 120 - 300 K temperatur aralığında şüalanmamış B₄C kristalı üçün istilik keçiriciliyinin qiyməti 0.0206 - $0.0674 \text{ Vt/sm} \times \text{K}$, 5.0×10^{12} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² sel sıxlıqlarında istilik keçiriciliyi 0.0193 - $0.0659 \text{ Vt/sm} \times \text{K}$, 0.0188 - $0.0645 \text{ Vt/sm} \times \text{K}$ və 0.0181 - $0.0619 \text{ Vt/sm} \times \text{K}$ arasında dəyişir. B₄C kristalı üçün istilik keçiriciliyi 120 K-dən 300 K-ə qədər olan temperatur intervalında 0.014 - $0.026 \text{ Vt/sm} \times \text{K}$, 3.83×10^{14} ion/sm² intensivliyə qədər 0.0112 - $0.022 \text{ Vt/sm} \times \text{K}$ qiymətlərinə malik olmuşdur. Şüalanmadan sonra B₄C və B₆Si kristallarında istilik keçiriciliyi artır, istilik selinin daşınmasında şüalanmadan sonra karbon və silisium atomları ətrafında yaranan radikallar iştirak edir. Təcrübələr göstərdi ki, aşağı temperaturda $T \leq 300$ K istilik keçiriciliyi və termodiffuziya strukturda yerləşən atomların qəfəs

dinamikasından asılıdır. Aşağı temperaturda B_4C və B_4C kristallarında termofiziki xassələr sürətli ağır ionların təsiri altında kiçik qiymətlərdə dəyişir. Termodinamik funksiyaların kinetikasi 300-1200 K temperatur intervalında B_4C , B_6Si və BN geniş araşdırılmışdır. Sürətli ağır ionlarla şüalanma zamanı kristalların termodinamik davranışı, istilik axını və istilik ötürülmə mexanizminin izahı verilmişdir.

Altıncı fəsilə B_2O_3 , B_4C , B_6Si və BN kristalları 1.25 MeV enerji xəttinə malik, doza gücü $D=0.27$ Qr/san ^{60}Co qamma izotop mənbəyi ilə 9.7 kQr, 48.6 kQr, 97.2 kQr, 145.8 kQr və 194.4 kQr udulma dozalarında şüalandırılmış, qamma şüaların borlu birləşmələrlə qarşılıqlı təsirin təbiəti, səth morfologiyasının dəyişməsi, element xəritələnmə, rəng mərkəzləri, oksidləşmə mexanizmi və DSC metodu ilə termofiziki xassələr öyrənilmişdir. Qamma şüalanma faza növündən asılı olaraq qarşılıqlı təsirdə olduğu birləşmələrdə defektlərin yaranma mexanizmi, yaranmış defektlərin energetik səviyyələr üzrə fərqli miqراسiyası və strukturda mövcud ana defektlərin sonradan yaranan defektlərlə qarşılıqlı təsirinə riyazi modelləşmə səviyyəsində nəzəri əsasları öyrənilmişdir.

Yüksək təmizlik dərəcəsinə malik kristalların səth morfologiyası laboratoriya şəraitində nazik karbon təbəqələr üzərinə 1-3 mkm qalınlığında bircins paylanması təmin edilmiş, yüksək vakum səviyyəsi şəraitində SEM mikraskopunda eksperimental SE2 detektoru vasitəsi ilə tədqiq olunmuşdur. B_4C kristalları 5-7 mkm intervalında, şüalanma dozasından asılı olaraq kristalların səthində amorflaşma izlərinə rast gəlinir. B_6Si kristallarının səth morfologiyası B_4C kristalından fərqli olaraq 48.5 kQr qamma udulma dozasından başlayaraq amorflaşır. B_6Si -də qamma şüaların təsiri altında amorflaşma mexanizmi B_4C birləşməsindən fərqli olaraq zəif fazada baş verməsi aşkar olunmuşdur. Böyüdülmüş sahədə, seçilmiş nöqtələrdə aparılan ölçü təyini göstərir ki, B_6Si kristallarında hissəciklər eyni ölçüdə olmayıb müxtəlif ölçülərdə səth boyu paylanmış, mikro kristalların ölçü 5-80 mkm intervalında dəyişir. BN birləşməsində səth morfologiyası B_4C və B_6Si kristalları ilə eynilik təşkil edib, kristalların ölçüsünün $52 \div 120$ mkm intervalında olması müəyyən edilmişdir. B_2O_3 kristalının səth morfologiyası qamma şüalanma dozasından asılı olaraq 500 nm intervalında tədqiq

olunmuş sahədə 9.7-48.5 kQr udulma doza intervalında kristalların səthində nəzərə çarpaçaq dəyişiklik baş vermir, 97 kQr udulma dozasından başlayaraq 194 kQr maksimum udulma dozasında səthin deqredasiya mexanizmi atomar səviyyədə laylı pozulmuş strukturun formalaşmasını göstərir.

Birləşmələrdə aparılan element xəritələnmə analizi kiçik konsentrasiyalarda qatışıq elementlərin olduğunu göstərir. B₄C mikro kristallarında 100 mkm seçilmiş sahədə kimyəvi elementlərin paylanması və xəritələnmə analizi hissəçiklərin paylanmasının homogen struktura yaxın olmasına baxmayaraq şüalandırılmış nümunələrdə elementlərin xəritələnməsi fərqlidir. Şüalanmadan sonra elementlərin xəritələnməsində C, Si, Ca və O elementlərinin mobilləşməsi bir hissə üzrə və yaxud müxtəlif hissələrdə toplanması aşkar olunmuşdur. Kristallarda şüalanmadan sonra kristal quruluşun difraksiyası spektrləri, qəfəs parametirləri, atomlar arasındakı məsafə və kristalın həcmi alınmış, B₄C kristal quruluşu *R-3m* fəza qruplu romboedrik simmetriyaya malik olması göstərilmişdir. B₆Si kristalı müxtəlif udma dozalarında alınmış struktur spektrləri aydın olur ki, birləşmə kristallik struktura malikdir. Şüalanmamış nümunə üçün qəfəs parametrlərinin qiymətləri, $a = 14.0605(5) \text{ \AA}$, $b = 18.0279(2) \text{ \AA}$ və $c = 9.2692(7) \text{ \AA}$, *Pnmm* fəza qrupuna, ortorombik kristal quruluş simmetriyasına malikdir.

Yüksək udulma dozalarında kristallik quruluşun və rəng mərkəzlərinin formalaşma mexanizminin geniş təhlili aparılmışdır. 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr udulma dozalarında şüalanmış B₄C kristalları üzərində udulma spektrləri 200 nm-dən 800 nm-ə qədər dalğa uzunluğunun F tip rəng mərkəzlərinin udulma zolaqlarının, 460 nm və M rəng mərkəzlərinin 700 nm müşahidə olunmuşdur. Defektlərin həcmi konsentrasiyası Smakula yaxınlaşmasından istifadə etməklə hesablanmışdır. Qamma şüalanmanın kiçik və yüksək udulma dozalarından asılı olaraq termodinamik funksiyaların və energetik səviyyələrin artması kristallik quruluşdan amorflaşmaya keçid, qamma kvantların hesabına kristalda yaranmış aktiv mərkəz və radikalların hesabına yaranan defektlərin kinetikasının əsaslandırılması aparılmışdır. Tədqiqatlarda keramik materialların yüksək temperaturlarda oksidləşmə

mexanizminin kinetikasının öyrənilməsi, xüsusi səth sahəsinin, təmizlik dərəcəsi və mikro kristallik ölçü vahidindən asılılıq faktorları nəzərə alınmışdır.

Temperaturun təsiri altında qamma kvantlarla şüalandırılmış B_6Si və B_4C mikro kristallarında oksidləşmə mexanizmi izah olunmuşdur. Qamma şüalarının yaratdığı oksidləşmə ilə yüksək temperaturlarda yaranan oksidləşmə mexanizminin cəmləşmiş halı ətraflı tədqiq olunmuşdur. B_6Si mikro kristallarında B_2O_3 və SiO_2 reaksiya məhsullarının alınması, hissəciyin ölçüsü və xüsusi səth sahəsi sabit kimi götürülmüşdür. Qamma şüalanmadan sonra termodinamik funksiyaların təyini, istilik sel funksiyası və xüsusi istilik tutumunun hesablanması aparılmışdır.

Yeddinci fəsilə şüalanma növündən asılı olaraq tədqiqat kristallarında defektəmələgəlmə mexanizminin riyazi əsasları, molekulyar dinamikanın kinetikasi yerinə yetirilmişdir. İntensivlikdən və enerjisindən asılı olaraq kristal strukturda atomların yerdəyişmə mexanizmləri, vakansiya və defektlərin termodinamik halı və rekombinasiya kimi mühüm proseslərin kinetikasına diqqət ayrılmışdır. Kristallar üçün alınmış termofiziki parametrlərin qarşılıqlı müqayisəsi və termodinamik əsaslandırılması yerinə yetirilmişdir. Həmçinin yerinə yetirilən təcrübələrin qarşılıqlı, müqayisə analizi, istilik selinin termofiziki kinetikasi, sürətli ağır ionlarla şüalanma və digər şüalanma növündən asılı olaraq nano və mikro kristal strukturda atomların yerdəyişməsi, qəfəs parametrləri, qəfəsin həcmi və müstəvilər arasındakı degradasiya mexanizmləri öyrənilmişdir.

Ağır ionların təsirində tədqiqat nümunələrdə termofiziki parametrlərin istilik tutumu, entropiya, entalpiya və sərbəst enerjinin geniş temperatur intervalında öyrənilmişdir. Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları Laboratoriyasında yerləşən "QOVORUN" superkompüter şəbəkəsindən və yüksək informasiya email etmə qabiliyyətinə malik avadanlıqlardan istifadə edərək B_4C və BN nümunələri üçün molekulyar dinamika analizləri aparılmış, səth effektlərin degradasiya model, molekulyar dinamikanın riyazi modelləşdirilməsi aparılmış və sürətli ağır ionların təsiri altında səth morfolojiyasında baş verən mühüm proseslərin mexanizmi verilmişdir.

Molekulyar-dinamikanın riyazi simulyasiyası nümunələr ilə qarşılıqlı təsirdə

olan müxtəlif yüklü və neytral hissəciklərin kinetik enerjinin ötürməsi əsasında qurulmuşdur. Səth morfologiyasının dəyişmə mexanizmi hissəciklər ilə daşınan kinetik enerjinin yaradığı krater effekti nəticəsində baş verir. Modelləşdirilmə “Las Palmeras Molecular Dynamics” proqram paketi əsasında yerinə yetirilmişdir. Riyazi simulyasiyanın fiziki əsasları kvant mexanikasının qanunları, atomların strukturda hərəkət trayektoriyası və hissəciklərin qarşılıqlı təsiri ilə hesablanır. Atomlar arası qarşılıqlı təsir qüvvəsinin potensialı, hissəciyin dəqiq hərəkət trayektoriyası və makroskopik ilkin şərtlər daxilindədir. Strukturun potensial molekulyar dinamikasının doğru modelləşdirilməsinin təməl prinsiplərindəndir. 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ sürətli ağır ion seli ilə 20 ps zamanında şüalanmış B_4C hədəfinin kristal strukturunun səth morfologiyasının 80 Å ölçüdə, 45° bucaq altında molekulyar dinamikası, elektron-fonon qarşılıqlı təsir əmsalının qiyməti $g=8.1 \times 10^{12} \text{ Vt}/(\text{sm}^3 \times \text{K})$ müəyyən olunmuşdur. B_4C hədəfinin kristal strukturunun səth morfologiyasında qarşılıqlı təsir zamanı istilik sahəsinin formalaşması, zamandan asılı olaraq istiliyin strukturun həcmi boyu paylanması, elektron-fonon qarşılıqlı təsir əmsalının istilik sahəsi üçün $g=4.05 \times 10^{12} \text{ Vt}/(\text{sm}^3 \times \text{K})$ və enerji paylanma parametrinin 3 nm olması aşkar olunmuşdur. $3.8 \times 3.8 \times 30 \text{ nm}$ sahədə 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ sürətli ağır ionlarının struktura ötürdüyü kinetik enerji dalğasının strukturun həcmi boyu paylanması, təyin olunmuş ölçüdə struktur deqredasiya mexanizmi, 30 nm ölçüdə enerji ötürmə kinetikasının ən yüksək səviyyədə olduğu təyin olunmuşdur.

Sürətli ağır ion selinin təsiri olmadan BN kristal quruluşunun 600°C temperaturda hərəkət dinamikası, strukturun temperatur təsiri altında əlavə rəqsləri molekulyar dinamikasının istifadə olunan potensialın təyininə əlavə təsir yaradır. Molekulyar dinamikasının BN kristalında 0.5 ps, 1 ps, 2 ps, 5 ps, 10 ps və 20 ps 167 MeV enerjili ^{132}Xe ağır ionları ilə şüalanmış qarşılıqlı təsiri, zamandan asılı olaraq nöqtələrində enerjisi ötürülməsi ilə hədəfdə kristalda kraterlərin yaranmasının dinamikasının baş verdiyi göstərilmişdir. İon seli ilə şüalanmış BN kristalının atomları strukturun səth morfologiyasında qarşılıqlı təsir zamanı istilik sahəsinin formalaşması, zamandan asılı olaraq istiliyin strukturun dərinliyi boyu paylanması, dalğa enerjisinin

mexanizmi, elektron-fonon qarşılıqlı təsir əmsalının istilik sahəsi üçün $g=3.15 \times 10^{12}$ $Vt/(sm^3 \times K)$ və enerji paylanma parametrinin 1.50 nm təyin edilmişdir. İstilik dinamikasının kraterin mərkəzində 1000 K ətrafında olması, temperatur təsiri nəticəsində iynə dəliklərin formalaşması məhz bir başa yüksək kinetik enerjiyə malik hissəciyin struktura verilməsi əsasında izahının verilməsi təcrübələrlə ən yaxın uyğunluğ göstərmişdir.

I FƏSİL

MÜXTƏLİF NÖV ŞÜALARIN TƏSİRİ ALTINDA BOR ƏSASLI BİRLƏŞMƏLƏRDƏ BAŞ VERƏN PROSESLEƏRİN ƏDƏBİYYAT İCMALI

Bor elementinin C, N, O, Si, Y, Zr, W, F, Cl, Br və S kimyəvi elementlərlə əmələ gətirdiyi nano və mikro ölçülü kristalları çox funksiyalı xassələrinə görə tədqiqatçılar tərəfindən geniş araşdırılmaqdadır. Mono və binar tərkibli bor kristalları digər keramik tipli kristallardan fiziki və kimyəvi xassələrinə görə əhəmiyyətli dərəcədə fərqlənir. Müxtəlif kristallik fəza quruluşu formalaşdıran borlu nümunələr bor elementinin atom konsentrasiyasından asılı olaraq tətbiq sahələrini dəqiq müəyyənləşdirmək olur. Borun karbid, nitrid və silikat kristallik strukturlarında B atomunun konsentrasiyasının azalması mexaniki xassələri və radiasiyaya davamlılığı artırır. Təqdim olunan fəsildə bor karbid, nitrid, silikat və oksid kristallarının kristallik quruluşu və strukturun dayanıqlı formalaşma mexanizmi haqqında ətraflı məlumat verilmişdir. İonlaşdırıcı mühitlərdə istifadə olunan borun keramik birləşmələrində struktur çevrilmələri, amorflaşma, defekt əmələgəlmə, miqrasiya və rekombinasiya mexanizmi, atomlararası məsafə və qəfəs parametrlərinin dəyişməsi geniş təhlil edilmişdir. Ədəbiyyat icmalının yekununda, alınmış nəticələrin qarşılıqlı müqayisəsi, açıq sualların tədqiqat işi ilə bağlılığının əsaslandırılması, dissertasiya işinin elmi və praktiki məqsədi göstərilmişdir.

1.1 Bor əsaslı binar, hidrat, kompozit birləşmələrin alınması və kristallik strukturu haqqında ümumi məlumat

Keçən əsrin 50-ci illərdən başlayaraq yüngül sənayedə materialların müxtəlif növ həşərat və gəmiricilərdən qorunması üçün istifadə olunan bor elementinin təbiətdə tapılan müxtəlif üzvi qarışıqları, müasir dövrün ən dəqiq mühəndis qurğuları olan nüvə texnologiyalarına, nüvə texnologiyalarının dinc məqsədlərlə istifadəsi üçün nəzərdə tutulan qurğuların əsas elementlərində, radiasiya detektorların hazırlanmasına qədər inkişaf yolu keçmiş və geniş miqyaslı tətbiq sahələri yaratmışdır [8, 32, 135, 145,

150,157, 168, 177, 179, 181]. Təbiətdə və müasir analitik sintez metodları ilə bor elementinin oksid, metal və qeyri-metal kimi çoxlu sayda birləşmələrini (B_2O -bor monoksid; B_2O_3 -bor trioksid; B_6O -bor subksid; B_xC -bor karbid; B_xSi -bor silikat; BF -bor monoflorid; BN -bor nitrid; B_2S_3 -bor sulfid; BBr_3 -bor triboromid; BCl_3 -bor trixlorid; BF_3 -bor triflorid; ZrB_2 -sirkonium diborid; BCN -nano boru; BPO_4 -bor fosfat və s.) sadalamaq mümkündür [6, 16, 17, 24, 52]. Eyni zamanda borlu birləşmələrin ikili, üçlü və çox saylı laylı, yüksək entropiyaya malik keramik qarışıqlarını (B_4C -VC; B_4C -TiC; B_4C - Cr_3C_2 ; B_4C -WC-Co; B_4C - Al_2O_3 ; BN -C; BN -CuNi; BN - Fe_2B ; BN -W; B_6Si -SiC; B_6Si - ZrB_2 və s.) qeyd etmək mümkündür [45, 51, 53, 54, 80, 94, 111, 162].

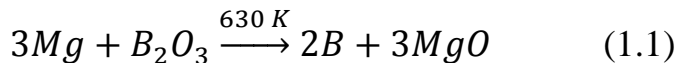
İmplus rejimində işləyən NMRS (Nüvə Maqnit Rezonans Spektroskopiya) və “maqnit-bucaq” spin metodundan istifadə etməklə bir sıra kristallarda borun izotop konsentrasiyası və borat minerallarında ^{10}B və ^{11}B izotopunun spektrlərinin aydın şəkildə təyin olunması növbəti tədqiqatlar üçün yeni üfüqlər açmışdır [55, 269]. Məlumdur ki, bor elementi kristal və yaxud amorf quruluşlarda iki izotopun (^{10}B və ^{11}B) cəmi şəklində mövcuddur [272]. Kristofer və başqaları tərəfindən sintez olunmuş super möhkəm WB_4 birləşməsində bor izotoplarının (^{10}B və ^{11}B) paylanma qanunauyğunluğunu öyrənmək məqsədi ilə nüvə maqnit rezonans spektroskopiyası (NMRS) metodundan istifadə etmiş, WB_4 kristalında ^{11}B spektrinin tam maqnit həssaslığı 680 kHz intervalda maqnit qütblərinin dörd bucaqlı tezlikləri, ikinci dərəcəli dörd bucaqlı xətti formaları və ^{10}B izotopunun spektrləri 142 kHz intervalında aşkar olunmuşdur [269]. BO_3 və BO_4 oksid birləşmələrində izotop nisbətinin dəqiq vahidlərini ayırmaq üçün kristal və şüşələşmiş bor birləşmələrində ^{11}B və ^{10}B izotopunun spektrləri NMRS metodu ilə geniş xəttli, fasiləsiz dalğa üsulu metodundan istifadə olunaraq öyrənilmişdir [37]. ^{11}B - 1H diployar qarşılıqlı təsirin araşdırılması məqsədi ilə təbii hidratlarda proton dopinq və spin spektroskopiya metodu ilə bor-bor və bor-hidrogen dipol qarşılıqlı təsiri 1-2 kHz intervalında müşahidə olunmuşdur. Sadalanan bütün birləşmələrdə bor kimyəvi elementinin konsentrasiyası fəza qruplarından asılı olaraq kubik, monoklinik, heksaqonal, romboedrik və ortorombik quruluşlarda rast gəlmək mümkündür [55]. Cədvəl 1.1-də borlu birləşmələrin bir sıra

komponentlərində ^{11}B izotopunun nüvə maqnit rezonans spektroskopiya metodu ilə konsentrasiyası haqqında ətraflı ədəbiyyat analiz verilmişdir.

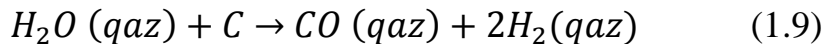
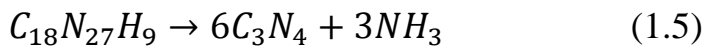
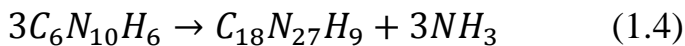
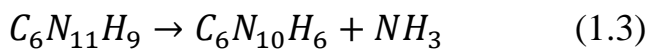
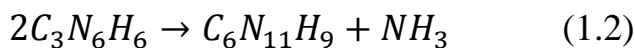
Cədvəl 1.1. ^{11}B izotopunun nüvə maqnit rezonans spektroskopiya metodu ilə müxtəlif tərkibli birləşmələrində konsentrasiyası.

Birləşmələr	$\Delta_{\text{izo}}(\text{ppm})$	$X_{\text{Q}}(\text{MHz})$	Ədəbiyyat
$\text{B}(\text{OH})_3$	18.8	2.55	[55, 269]
$\text{Na}_2\text{B}_2\text{O}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$	19.0 və 2.0	2.4 və 0.3	[55, 269]
$\text{PbB}_4\text{O}_7 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	19.2 və 0.9	2.55	[55, 269]
$\text{MgB}_3\text{O}_3(\text{OH})_5 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	18.1 və 1.0	2.4 və 0.2	[269]
$\text{CaB}_3\text{O}_3(\text{OH})_5 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	17.4 və 1.5	2.3 və 0.2	[269]
$\text{Na}_2\text{B}_2\text{O}_6(\text{OH})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	18.5 və 0.9	2.4 və 0.2	[269]
$\text{CaB}_3\text{O}_4(\text{OH})_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	17.4 və 1.4	2.4 və 0.3	[269]
NaBSi_3O_8	1.9	-	[269]
$\text{CaB}_2\text{Si}_2\text{O}_8$	0.7	-	[269]
$\text{CaB}(\text{SiO}_4)(\text{OH})$	1.0	-	[269]
$\text{Mg}_3\text{B}_7\text{O}_{13}\text{Cl}$	16.0 və 1.0	2.6 və 0.3	[269]
LiB_2O_7	17.9 və 1.7	2.5 və 0.2	[269]
SrB_4O_7	1.0	-	[269]
CaB_2O_4	-	2.57	[55, 269]
BPO_4	3.3	-	[55, 269]
B_{13}C_2	4.6 və 130	5.58	[55, 269]
BN	1.6		[55, 269]
$\text{Si}_3\text{B}_3\text{N}_7$	30.2		[55, 269]
SiBN_3C	29.8	1.55	[55, 269]

Ədəbiyyatlarda sərbəst bor elementinin alınması üçün $\text{C}_3\text{N}_6\text{H}_6$ katalizatorunun iştirakı ilə 10.16% B_2O_3 və 23% Mg kütlə nisbətərində baş verən steoxiometrik kimyəvi reaksiyanın məhsulu kimi əldə olunmuşdur [131]. Sxematik olaraq kimyəvi reaksiyanı aşağıdakı kimi təsvir etmək olar.

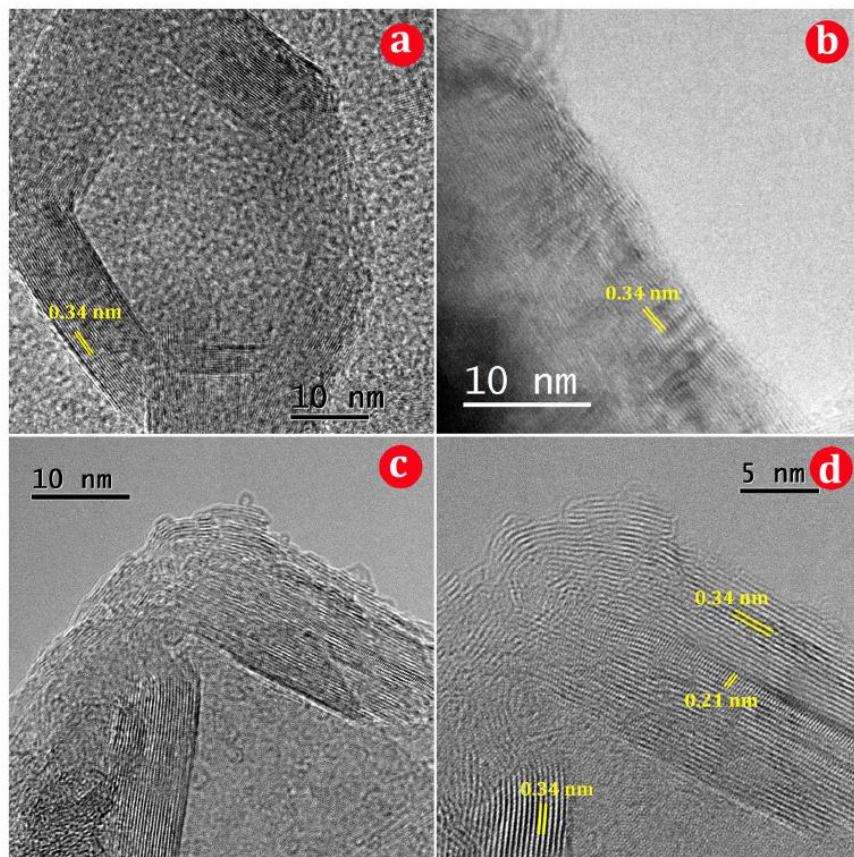


Kimyəvi reaksiyanın Gibbs sərbəst enerjisi -515 kC/mol, entolpiya - 532 kC/mol və reaksiyanın işçi temperaturu 630 K götürülmüşdür. Eyni həmmüliflər tərəfindən yüksək təmizlik dərəcəsi ilə nano ölçülü BN və B₄C kristalların alınması üçün aşağıdakı ardıcıl mexanizimlərlə verilmiş reaksiyaları göstərmək mümkündür [223, 242].



Şəkil 1.1-də borun üçlü nano müstəvi kompozit birləşmələrinin B-C-N alınması, HRTEM (yüksək ayırdetmə qabiliyyətinə malik elektron mikroskop) ilə 10 nm işçi məsafədə səth morfolojiyasının analizi yerinə yetirilmiş, nano müstəvinin heksaqonal struktur formalaşdırdığı sahədə (a), müxtəlif vəziyyətlərdə və nano müstəvinin kənar hissələrindən götürülmüş ölçülərin 0.34 nm bərabər olması aşkar olunmuşdur [291]. Şəkil 1.1(a)-da yüksək enerjili elektronların təsiri nəticəsində səthdə formalaşan deqredasiya morfolojiyası aydın göstərilmişdir. Həmçinin şəkil 1.1-də altıbucaqlı bor karbonitrid kristalın strukturu aydın şəkildə müşahidə olunur. Nano müstəvilər yüksək

dəqiqliklə aydınlaşdırılmış və qəfəs strukturunda kristallaşma fazasının baş verdiyi aydın olmuşdur [291].



Şəkil 1.1. B-C-N nano müstəvisinin 10 nm işçi məsafəsində, yüksək ayırdetmə qabiliyyətinə malik elektron mikroskopla analiz edilmiş səth morfologiyası.

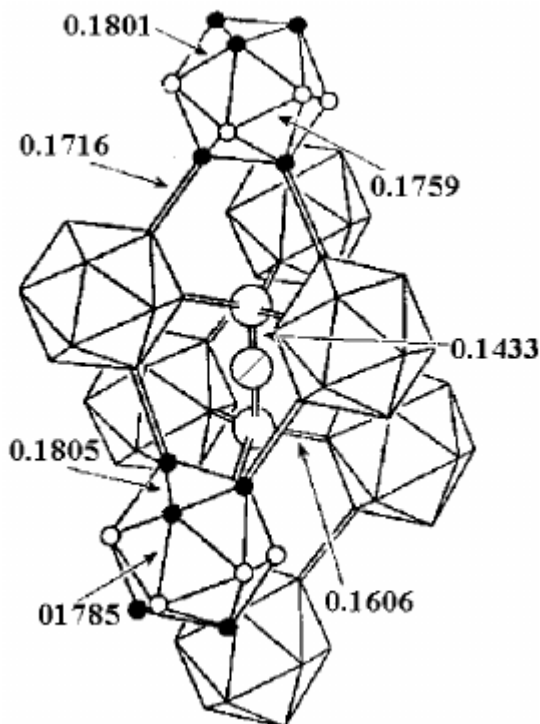
Alınmış HRTEM şəkillərindən nano müstəvilərin laylı xüsusiyyəti, zolaqlar arası məsafə 0.34 nm, (002) kristallik göstərici, struktur analizləri və (d) atomlar arası məsafə ideal strukturun formalaşdığını təsdiq edir. Künc vəziyyətlərdə təbəqələrin zəif formada qatlanması səbəbindən əyilmiş kənarların 0.21 nm aralığında və (101) fəza qrupunda olması müşahidə olunmuşdur [291].

1.1.1 B₄C kristalında kristallik quruluşun formalaşma mexanizmi

İonlaşdırıcı şüaların qeyd edilməsi üçün müxtəlif bərk cisimlərdən və yarımkəçirici kristallardan geniş istifadə olunur [3, 28, 29, 33, 81, 86, 89, 114, 219, 245]. Detektor texnologiyasında kiçik sıxlığa və yüksək mexaniki dayanıqlığa malik və neytron şüaların qeyd edilməsi üçün yüksək həssaslığa malik B₄C kristalı ən

perspektivli materiallardan hesab olunur [14, 31, 61, 112]. Dieletiriklər sinfinə daxil olan B_4C kristalının müxtəlif fazaları texnologiyanın müxtəlif istiqamətlərində tətbiq imkanlarına malikdir [32, 137, 173, 257]. Bu materiallar sırasında olan bor karbid kristalı kiçik sıxlığa ($1.8\text{--}2.52\text{ g/cm}^3$) malik olmasına baxmayaraq böyük sərtliyə (49 GPa), yüksək elastiklik moduluna (450 GPa), ərimə temperaturuna (2620 K) və zərbəyə davamlı materiallardandır [207, 227, 233]. Bor karbid kristalı texnologiyada tətbiqinə görə geniş istifadəyə malik materiallardan biridir [169-170, 172]. Hərbi sənayedə yüngül və ağır zirehlərin, aşındırıcı və kəsici deşici alətlərin hazırlanmasında tətbiq olunmaqdadır [78, 203]. Elektrik izolyator materialların, mikroelektronikada müxtəlif detalların və kiçik müqavimətə malik avadanlıqların düzəldilməsində və yüksək termoelektirik xassələrə malik olmasına görə geniş istifadə olunmaqdadır [82,184]. Yüksək texnologiyalarda, atom elektrik stansiyalarında və tədqiqat nüvə reaktorlarında neytron detektorların və absorbent materialların hazırlanmasında geniş istifadə olunur [42, 57, 93, 103, 211]. Son dövrlərdə borlu birləşmələr və onların əsasında alınmış kompozit materiallar tədqiqi və onların bu şəkildə maraqlı doğurmasının əsas səbəbi radiasiyaya qarşı davamlı material olmasıdır [123-124, 232]. Nüvə reaktorlarında təhlükəsizliyin artırılması məqsədi ilə B_4C əsasında 3D elektrodlar və ultra-nazik PİN diodlar ilə soyuq, isti və sürətli neytronları qeyd edilməsi məqsədi ilə detektorların hazırlanması istiqamətində elmi tədqiqat işləri yerinə yetirilir [67, 93, 103, 179, 180,181]. B_4C kristalının dayanıqlı struktur quruluşu, termik sabilliyi, yüksək təzyiqlərdə istifadəyə malik olması mühəndis texnologiyasında bu birləşməyə böyük maraqlı yaratmışdır [42, 141, 155, 221, 231, 232, 266, 273, 282]. Bütün mükəmməl fiziki və kimyəvi xassələrin təməlinə komponenti, birləşməni və strukturu təşkil edən atomların yarada biləcəyi uzaq nizamlılığa malik ardıcı kombinasiya dayanmaqdadır. Bor karbid kristalında B və C atomlarının birlikdə yaratdığı kombinasiyaların sayı olduqca müxtəlif və fəza qrupları dəyişkən olan quruluş strukturları yartmaqdadır [156, 248]. Şəkil 1.1.1-də B və C atomunun dəyişən konsentrasiyalarında formalaşdırdıqları romboedrik kristallik quruluş göstərilmişdir [143]. Bor və karbon atomların dörd qeyri-bərabər vəziyyətdə quruluşu və mövcud

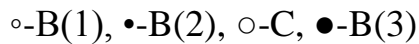
atomlar arası məsafənin dəyişməsi göstərilmişdir.



Şəkil 1.1.1 Romboedrik $B_{1-x}C_x$ (\circ -C, \bullet -B) ($0.1 \leq x \leq 0.2$) birləşməsində quruluş strukturu.

Müəyyən olunmuşdur ki, birinci fəza qrupu üzrə B-C atomlar arası məsafə 0.1801 nm, C-C atomlar arası məsafə 0.1759 nm, B-B atomları arası məsafə 0.1716 nm; ikinci fəza qrupu üzrə C-C atomları arası məsafə 0.1433 nm; üçüncü fəza qrupu üzrə B-B atomlar arası məsafə 0.1805 nm, B-C atomlar arası məsafə 0.1785 nm və dördüncü fəza qrupu üzrə B-C atomlar arası məsafə 0.1606 nm olması tədqiqatlar ilə müəyyən edilmişdir [143]. Qonşu romboedrik formalar bir sütün boyunca ardıcıl bağlı üç C atomundan ibarət fəza forması meydana gətirir. Uzanmış üç atomlu zəncirlər vasitəsilə romboedrik formalar üçüncü ox boyunca formalaşır. Bor və karbon atomları verilmiş strukturda mövcuddur və qəfəsin tərkib hissəsi olan quruluş B və C konsentrasiyalarının ardıcılığından ibarətdir. Ümumi yanaşmada karbonla zəngin olan strukturda (B_4C) 20 % həddindən, bor ilə zəngin bir vəziyyətdə isə təxminən 9 % konsentrasiyada ($B_{10}C$) formalaşır [207]. Müəyyən olunmuşdur ki, bor və karbon atomları konsentrasiyadan asılı olaraq yaranan struktur quruluşunda on beş vəziyyətdə

dörd ekvivalent olmayan kristalloqrafik fəza üzrə paylanır. Şəkil 1.1.1-də atomların müxtəlif vəziyyətdə dəyərləndirilməsini aşağıdakı kimi qiymətləndirmək mümkündür.

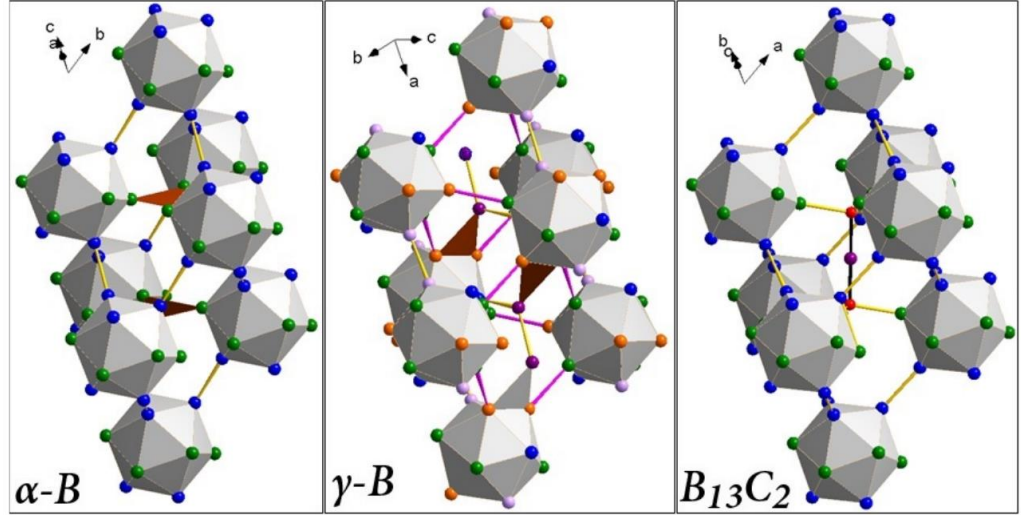


$\circ\text{-B}(1)$ ekvatorial fəza üzrə 12 izoedral bor atomuna 6 ekvivalent karbon atomunun uyğun gəlməsi;

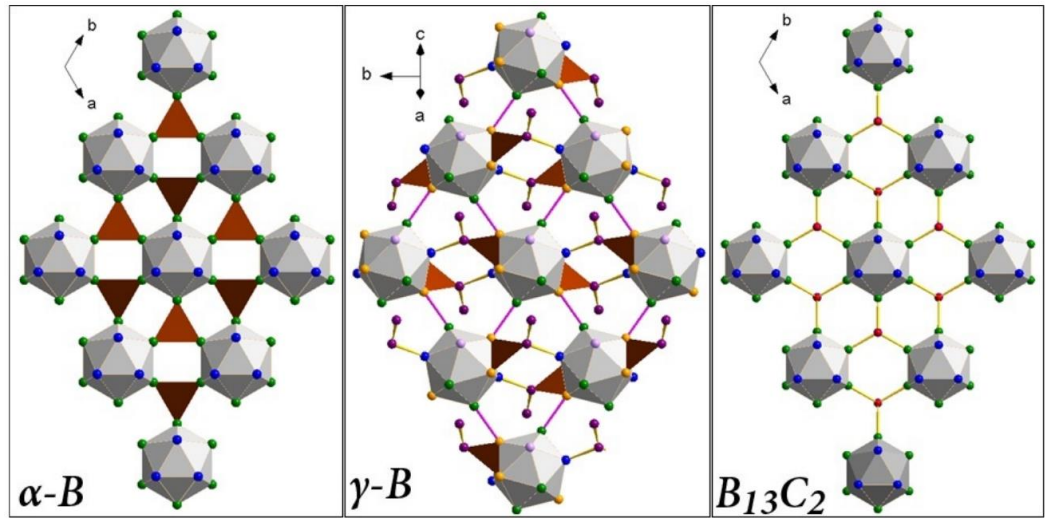
$\bullet\text{-B}(2)$ ekvatorial fəza üzrə 6 izoedral bor atomuna 6 ekvivalent karbon atomunun uyğun gəlməsi;



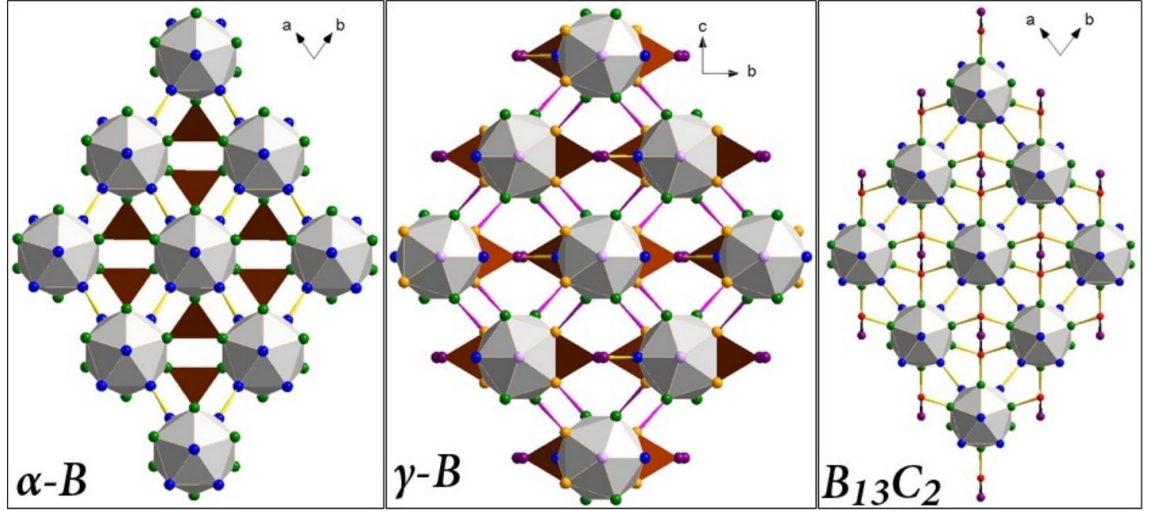
Geniş fazalı bor karbid kristalında fəzalar üzrə karbon və bor atomlarının qarşılıqlı yerdəyişməsi, B_{12}C , B_{11}C , B_{10}C_2 “icosahedra”-sının mümkün ehtimalları və ayrıca C-B-B, C-B-C, C-C-C zəncirlər ardıcılığının ehtimallarını göstərir. “İcosahedra”da B_{11}C və C-B-C zəncirlərinin olması B_4C struktur tərkibinə daha uyğundur. Nüvə maqnit rezonans spektroskopiyasından alınan məlumatlar göstərir ki, $\circ\text{-B}(1)$, $\bullet\text{-B}(2)$, $\circ\text{-C}$ sahələrində yerləşən karbon atomlarının müəyyən edilmiş xətlərinin nisbi intensivliyi müvafiq olaraq 66.9 %, 31.4 % və 1.7 %-ə bərabərdir [207]. Digər tərəfdən karbon atomlarının konsentrasiyasının azalması ilə B_4C kristal strukturunda C-B-C zəncirləri B_{11}C icosahedra strukturunu saxlayan C-B-B zəncirləri ilə əvəz olunur [226]. Müəyyən kənara çıxmalar nəzərə alınmaqla C-B-C zəncirlərinin B_{13}C_2 tərkib strukturu ilə əvəzlənmələrinə, bəzi hallarda isə B_{11}C icosahedrada B_{12} əvəz olunmalarına rast gəlinir. Şəkil 1.1.2-1.1.5-də müxtəlif modifikasiyalar üzrə bor karbidin struktur dinamikasının dəyişməsi göstərilmişdir.



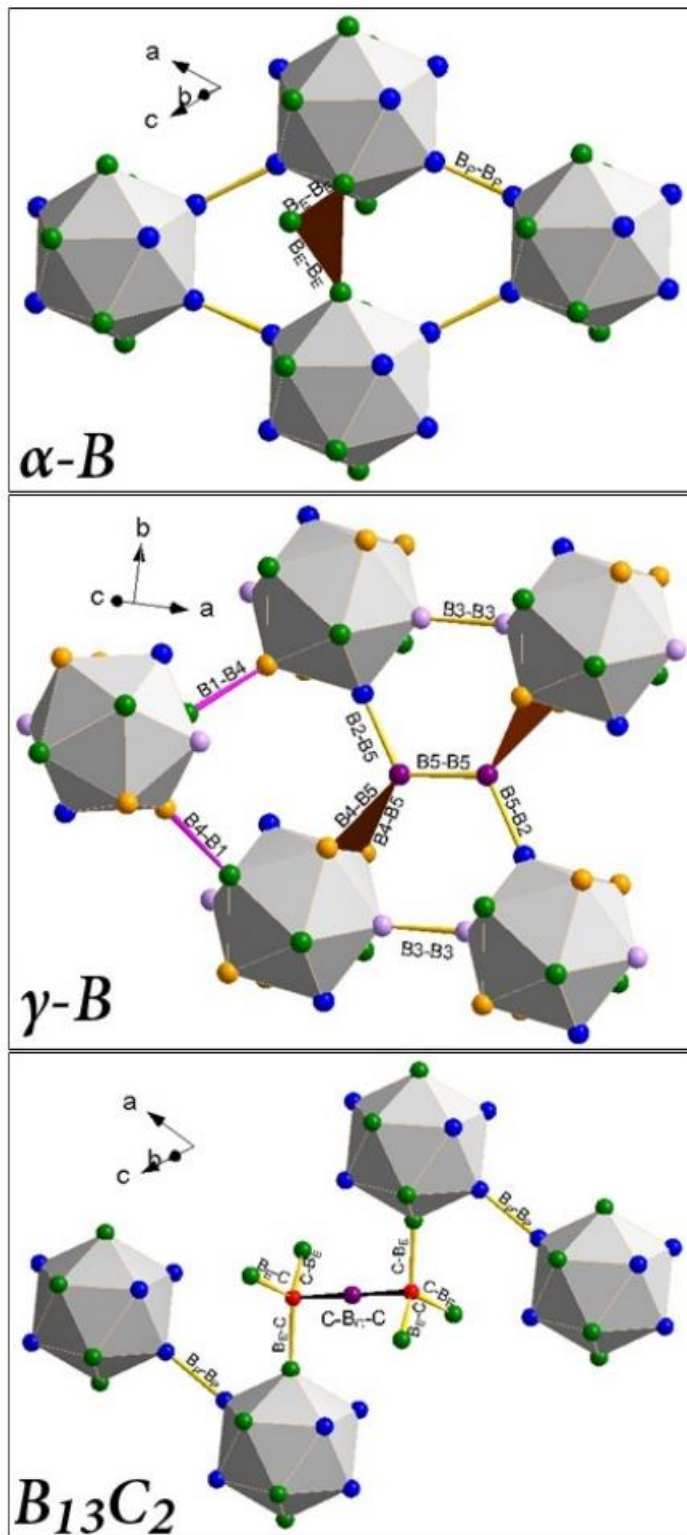
Şəkil 1.1.2. α -B, γ -B və $B_{13}C_2$ kristallarının strukturu: γ -B strukturu əsasında seçilmiş elementar romboedrik struktur [226].



Şəkil 1.1.3. α -B, γ -B və $B_{13}C_2$ kristallarının strukturu: Bir laylı kubik struktur əsasında formalaşan bor karbid [226].



Şəkil 1.1.4. α -B, γ -B və $B_{13}C_2$ kristallarının strukturu: Bir laylı fərqli qəfəs parametrləri ilə kubik struktur əsasında formalaşan bor karbid [226].



Şəkil 1.1.5. $\alpha\text{-B}$, $\gamma\text{-B}$ və $B_{13}C_2$ kristallarının strukturu: Bir laylı fərqli bucaqlarda və kubik struktur əsasında formalaşan bor karbid [226].

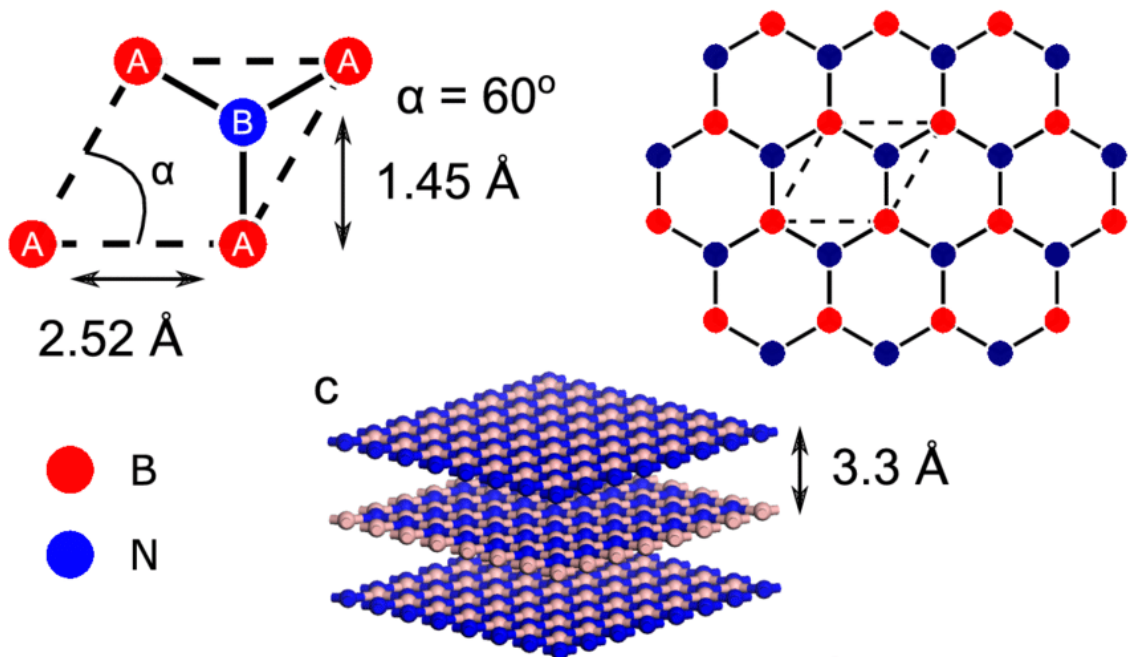
Funksional materialların müxtəlif fiziki xassələri onların kristal quruluşları ilə bağlı olduğu üçün həmin materialların kristal quruluşlarının dəqiq öyrənilməsi vacib faktorlardan hesab olunur. Məhz bu aspektdən son zamanlar təzyiqli və temperatur kimi

xarici amillərin təsiri ilə dielektirik, yarımkeçirici, seqnetoelektrik, heksoferrit ferromaqnit və s. xassələrə malik olan funksional materialların quruluş xassələri geniş tədqiq edilir [4, 9, 98, 105, 129, 130, 258, 267-268, 307]. Müəyyən edilmişdir ki, təzyiq və temperaturda olduğu kimi qamma şüaların təsiri altında birləşmələrin kristal quruluşlarında dəyişikliklər və amorflaşma kimi fiziki proseslər müşahidə olunur [142, 196, 199, 216]. Əvvəlki tədqiqatlardan məlumdur ki, bor karbid reaktor materialı kimi müasir nüvə texnologiyaları sahəsində geniş tətbiq edilir [252, 255]. B_4C -ə qamma şüaların təsiri uzun müddətdir tədqiq edilir, şüalandırılmış tədqiqat kristallarının müxtəlif fiziki xassələrində ciddi dəyişikliklər müşahidə olunur [186]. Qamma kvantlarla şüalandırılmış bor karbid kristalının termodinamik parametrlərinin təyin edilməsi zamanı müəyyən edilmişdir ki, kristallik struktur şüalanmanın udulma dozasından kəskin şəkildə asılıdır [191]. Optik xassələrin tədqiqi zamanı məlum olmuşdur ki, qamma udulma dozası bor karbid kristallarda nöqtəvi defektlər yaradır və defektlərin hesabına rəng mərkəzləri formalaşır [192]. Göründüyü kimi, B_4C kristalının quruluşu və müxtəlif fiziki xassələri qamma şüaların təsirindən asılıdır. Qamma şüaların təsiri ilə bor karbiddə baş verən müxtəlif dəyişikliklər geniş tədqiq edilsə də, onlara elektron şüalarının təsiri kifayət qədər öyrənilməmişdir. 2-3 MeV enerjili elektron şüaları ilə müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış bor karbid birləşməsinin qəfəs parametrləri, amorfizasiya və udulma dozasından asılı olaraq bütün qanuna uyğunluqlar tədqiqat işində qarşıya qoyulmuş əsas məsələlərdən biri hesab olunur [127, 227]. İntensiv elektron seli şüaları ilə şüalandırılmış, qəfəs müstəvilərinin və qəfəs parametrlərinin dəyişmə dinamikası və “solid-state amorphization” mexanizmi dissertasiya işində araşdırılmışdır.

1.1.2 Bor nitrid kristalının kristallik strukturu müxtəlif tədqiqat metodlarında

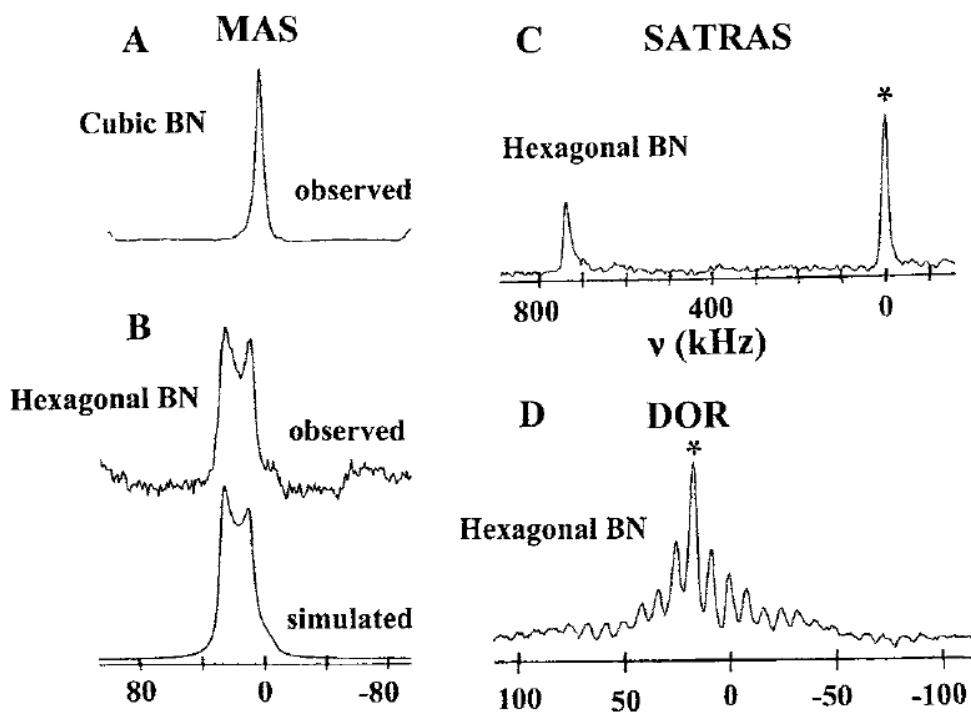
Yarımkeçirici materiallar sinfinə məxsus heksaqonal bor nitrid (h-BN) nümunəsi 6.5 eV qadağan olunmuş zolağının eninə malik olması yarımkeçirici neytron detektorlarının hazırlanmasında və kristalların optik xassələrin öyrənilməsində geniş

istifadə olunan ən prespektivli kristallardan hesab etmək olar [5, 11, 12, 25, 66, 84, 216, 218]. Sırlı material kimi daha çox ədəbiyyatada [171, 176, 178, 221] məlum olan heksaqonal bor nitrid kristalının quruluş formalaşma mexanizmi şəkil 1.1.2.1-də verilmişdir [299].



Şəkil 1.1.2.1. Laylı quruluşlu heksaqonal bor nitrid (h-BN) kristalının strukturu.

Laylı quruluşa malik h-BN kristalı kubik və heksaqonal formaya malik kristal qəfəs strukturu formalaşdırır. Heksaqonal modifikasiyasında, şəkil 1.1.2.1-dən görüldüyü kimi B-N atomlar arası məsafə 0.145 nm, B-B atomlar arası məsafə 0.252 nm və laylar arası məsafə isə 0.33 nm tərtibindədir [134, 183, 213, 263-264]. Eyni və fərqli növəyə malik atomlar arası dipol-dipol qarşılıqlı təsir [279], B elementinin simmetriyasına görə kubik fəza quruluşuna malik BN birləşməsində ^{11}B izotopunun miqdarı 1.66 ppm və maqnit sahəsinin 2.6 MHz tezlikdə müşahidə etmək mümkündür (şəkil 1.1.2.2). Sıxlıq funksiyası nəzəriyyəsi əsasında aparılmış hesablamalardan və “PAW” potensialından istifadə olunmaqla bor nitrid birləşməsinin elektron strukturu [138], spin və qeyri-spin poliyarizasiyası geniş tədqiq olunmuşdur.



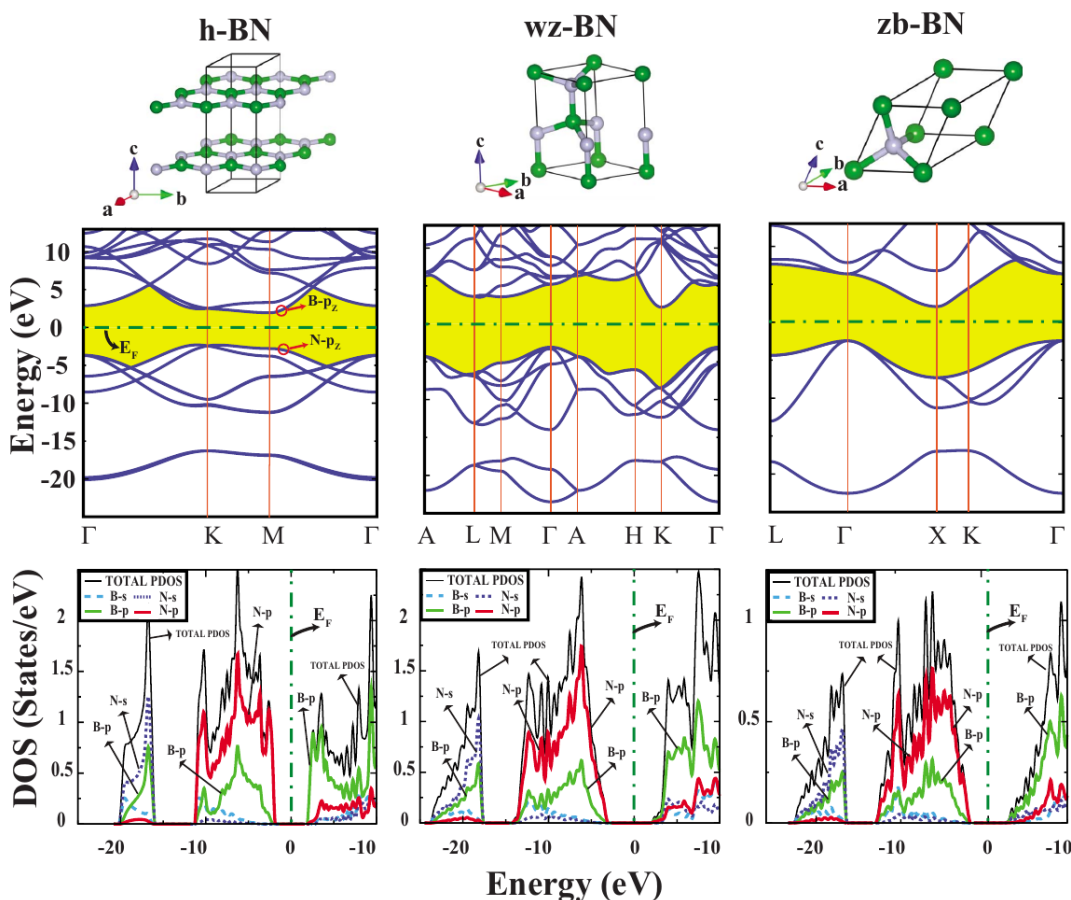
Şəkil 1.1.2.2. Kubik (A) və heksaqonal (B) bor nitriddə ^{11}B izotopunun NMR spektri.

BN kristallarında polyarizasiyasının tədqiqi üçün atomların kristal strukturda yerləşməsi, atomların potensial enerjisi və atomlar arası qüvvənin qiyməti minimum nəzərə alınmaqla hesablanmışdır. Potensial enerji üçün 10^{-5} eV, Hellmann-Feynman qüvvəsi hər bir atom üçün 0.02 eV/Å qəbul edilmişdir [102]. Şəkil 1.1.2.3-də nəzəri hesablamalarla 3D və 1D bir laylı bor nitrid kristali üçün atomların konfigurasiyası göstərilmişdir. h-BN, wz-BN və zb-BN kristal strukturlarında E_c bağlı enerjinin təyin olunması üçün aşağıdakı riyazi yaxınlaşma təklif edilmişdir.

$$E_c = E[\text{BN}] - E[\text{B}] - E[\text{N}] \quad (1.10)$$

$E[\text{BN}]$ -BN strukturda hər bir B-N cütü üçün, $E[\text{B}]$ və $E[\text{N}]$ sərbəst B və N atomları üçün götürülmüş enerjinin qiyməti və B-N cütü üçün enerjinin qiyməti 17.65 eV təyin olunmuşdur. Qəfəs parametrləri optimallaşmış strukturda $a=2.511$ Å, $c/a=2.66$ qəbul olunmuşdur [215]. Qonşu B və N atomları arasında məsafə $d=1.450$ Å (laylı strukturlar arasında) bərabərdir [148]. Göstərilən bütün nəzəri hesablamalar təcrübələrdən alınan qiymətlərlə uyğunluq təşkil edir və təcrübələrin xətası $\sim 1\%$

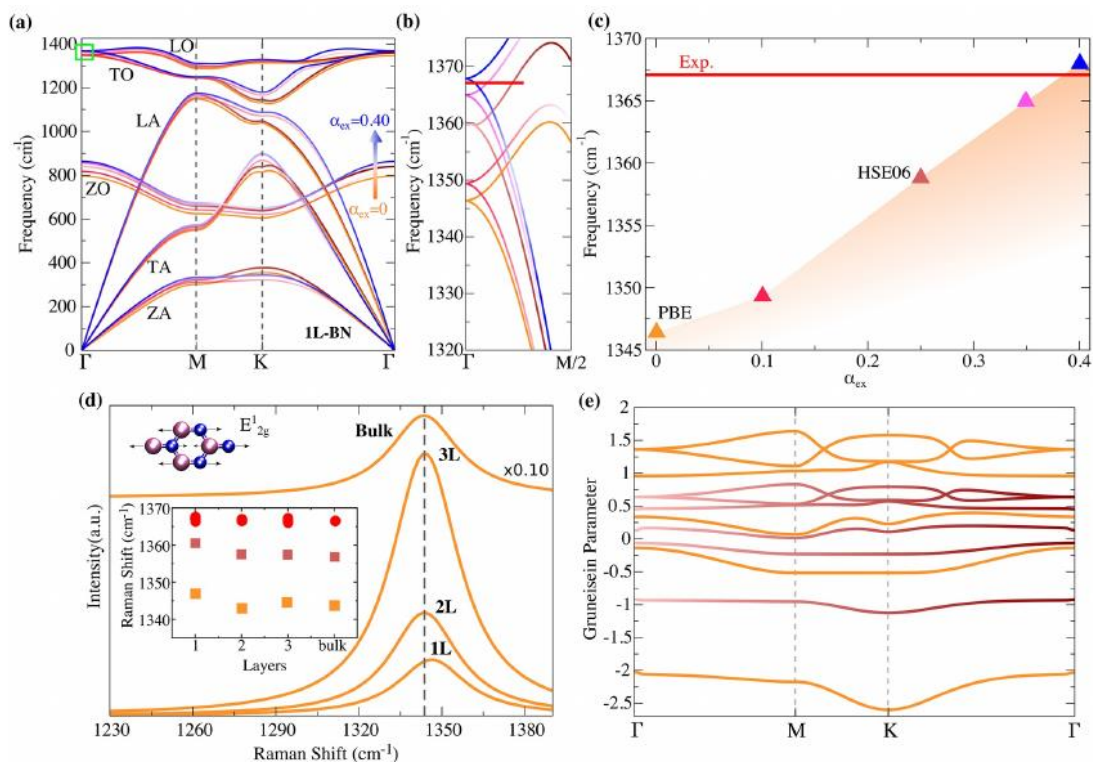
ətrafında dəyişir. Şəkil 1.1.2.3-də elektron rəbitə strukturu və DOS (halın sıxlığı) 3D struktur üçün qadağan olunmuş zolağın eni 4.47 eV müəyyən olunmuşdur.



Şəkil 1.1.2.3. 3D və 1D bir laylı h-BN kristal üçün DFT funksiyası əsasında atomların konfuqrasiyası.

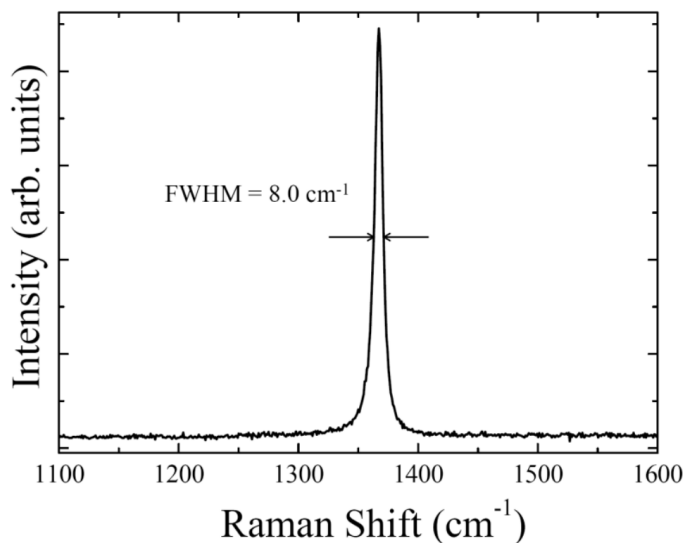
Bor nitrid nümunəsi üçün 2D fəzasında (x,y) atomlar təbəqəsi üçün hesablanmış zolaq strukturu kristalı bir daha heksaqonal fəza quruluş formalaşdırdığını göstərir. Digər tərəfdən kristal üçün yüksək valentlik qrupu N-p_z, B-p_z xarakterik olduğu müəyyən olunmuşdur [106-107]. Həmçinin bir sıra ədəbiyyat məlumatlarında optimallaşdırılmış h-BN strukturu üçün bağlı enerjinin qiyməti 16.04 eV, B-N cütü üçün müstəvilər arasında məsafə $d=1.307 \text{ \AA}$, qadağan olunmuş zolağın enerjisi 3.99 eV, yük keçiriciliyi 0.511 elektron müəyyən olunmuşdur [10, 32, 43, 47]. Əlavə olaraq, B-N arasında kimyəvi rəbitənin ion təbiətli, “honeycomb” pətək struktur şəkilli olması, yerinə yetirilmiş təcrübi analiz nəticələri ilə müqayisəli təhlilin aparılması strukturun heksaqonal olmasını təsdiq etmiş olur [83]. Lakin bir sıra araşdırmaların nəticələrinə

görə borun periodik cədvəlin III və IV qrup elementləri ilə əmələ gətirdiyi strukturlar “pətək” strukturundan fərqlənir. Strukturun formalaşması zamanı ən yaxın B və N atomlar arasında rabitə B-sp² və N-sp² orbitlərinin bağlanma kombinasiyasından ibarət olur [119,151]. Nəticə olaraq, ən ideal pətək modeli qrafikin strukturunda mövcud kovalent rabitədən fərqli olaraq, bor nitriddə atomlar arasında ion rabitəsini meydana gətirir və pətək strukturundan fərqlənir. Bor nitridin strukturunun analizində növbəti ən dəqiq analitik metodlardan sayılan Raman spektroskopik analiz metodundan istifadə olunmuşdur. Şəkil 1.1.2.4(a)-də h-BN strukturunda mövcud bütün fonon-fonon qarşılıqlı təsirlərin mexanizmi araşdırılmışdır [10, 138]. DFT funksiyasına əsaslanaraq bor nitrid kristalında mövcud akustik (ZA, TA və LA) və optik (ZO, TO, və LO) modların səpilməsi göstərilmiş, hissələrə ayrılmış hibrid funksiyasından HSE06 və qarşılaşdırma faktorunun müxtəlif qiymətlərindən istifadə olunaraq fonon-fonon səpilməsi müəyyən olunmuşdur. Şəkil 1.1.2.4 (b)-də fərqli rənglərlə göstərildiyi kimi fonon-fonon qarşılıqlı təsiri artan qarşılaşdırma funksiyası ilə artır və hibrid funksiyasının E_{2g} modları üçün xüsusi böyüdülmüş hissəsi verilmişdir.



Şəkil 1.1.2.4. DFT funksiyasına əsaslanaraq BN kristalında mövcud akustik (ZA, TA və LA) və optik (ZO, TO, və LO) modların səpilməsi.

Şəkil 1.1.2.4 (c)-də BN sistemi üçün α_{ex} funksiyasından asılı olaraq E_{2g} tezlikləri üçün hesablanmış Raman dəyişiklikləri verilmişdir.



Şəkil 1.1.2.5. Qrafit strukturlu BN birləşməsinin Raman spektri.

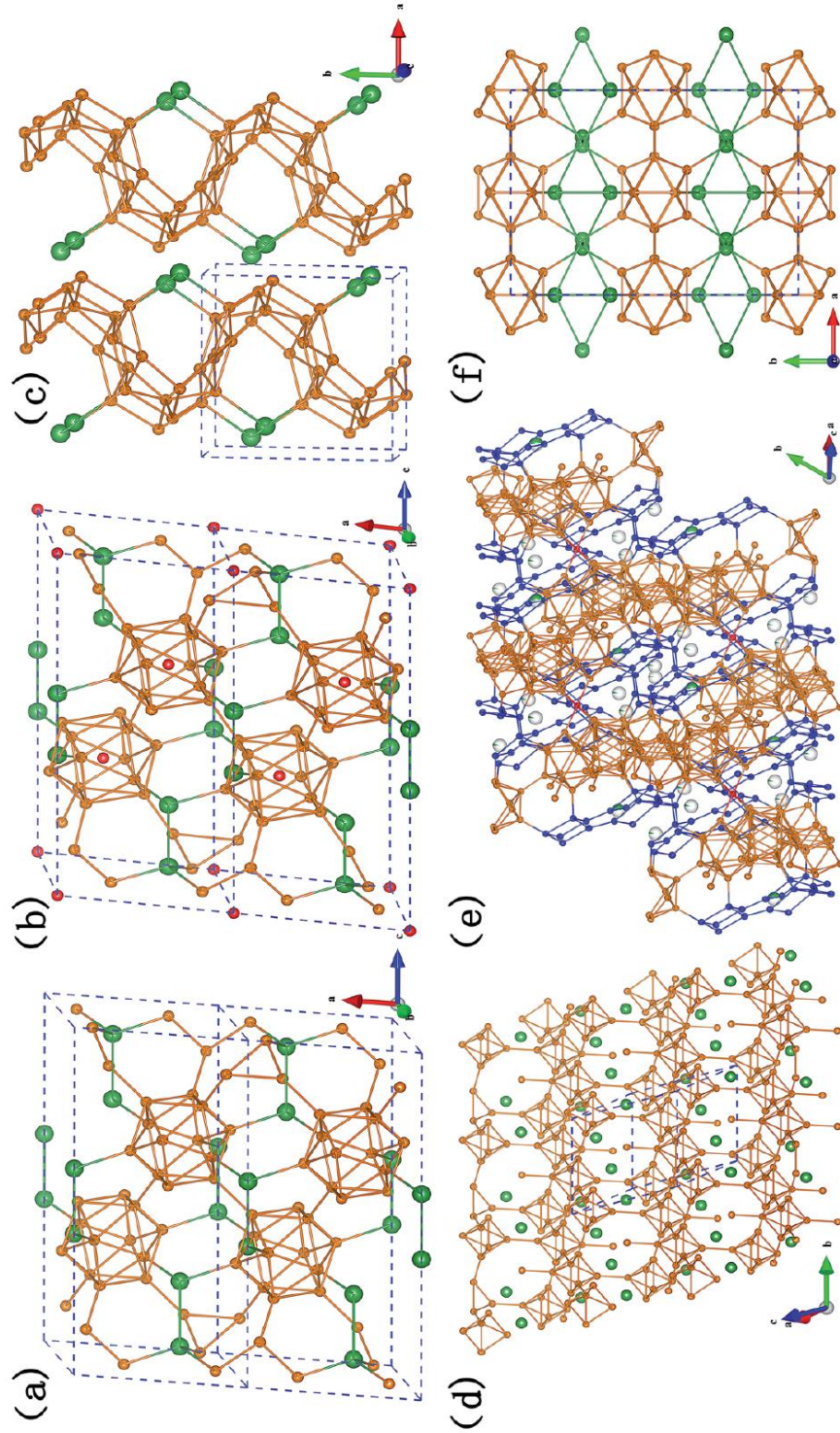
Həmçinin müxtəlif təzyiqlərdə yerinə yetirilən Raman tədqiqatları E_{2g} optik modlarının dəyişməməsini və qrafit strukturlu bor nitridin olması bir daha təcrübi təsdiq olunmuşdur (şəkil 1.1.2.5). 30 kBar təzyiqdə bor nitridin strukturunun Raman analizləri yarım dalğa uzunluğu 8 cm^{-1} olan 1367 cm^{-1} tezliyində müşahidə olunan rəqs modlarının E_{2g} fonon rəqslərinə uyğunluğu təyin olunmuşdur [164].

1.1.3 Si-B qarşılıqlı təsirində quruluş əmələgəlmə formaları

Məlumdur ki, boridlər sinfinə məxsus və kristal strukturunda daha çox bor kimyəvi elementi ilə zəngin birləşmələrdən praktik olaraq ən prespektivli materiallardan biri (B_6Si) bor silikatdır [15, 41, 133, 139, 244]. Detektorların hazırlanmasından başlayaraq texnologiyanın müxtəlif istiqamətlərində geniş tətbiq olunan bor silikat yüngül kütlə, ekstremal möhkəmlik, eksipotensial termik stabilliyə malik kristal kimi geniş tətbiq sahəsinə malikdir [174, 185, 240, 293]. B_6Si kristalı böyük əhmiyyətə malik olması onun yüksək ərimə temperaturuna, yarımkeçirici-metal və yaxud metal və temperaturun artması ilə Seebeck əmsalının və elektrik keçiriciliyinin artmasından ibarətdir [185]. Elektrik keçiriciliyinin mükəmməliyi onun

termik keçiriciliyinin ilə ekvivalentliyi kombinə olunmuş şəkildə ehtiva edir. Bir sıra hallarda B_6Si kristalı yüksək kimyəvi aşılınmaya və termik stabilliyi yüksək kimyəvi eroziya zonalarında termoelektirik materialları kimi geniş istifadə olunur [208].

Sadalanan üstün xüsusiyyətlər fonunda B_6Si kristalında əmələ gələn mümkün kristal strukturun vacib amillərdən biridir, Si-B qarşılıqlı təsirin mümkün $SiB_{2.8}$, SiB_3 , SiB_4 , SiB_6 və SiB_n formalaşma ehtimalları vardır [133]. Həmçinin mövcud strukturların α , β və γ modifikasiyalarının da qeyd etmək mümkündür. Sadalanan kristallar və modifikasiyalardan ən perspektivli α - SiB_3 və B_6Si birləşmələrin daha çox öyrənilmiş və tədqiq edilmişdir [133, 274]. α - SiB_3 birləşməsi B və Si-nin 5-10% kütlə nisbətində ərimə temperaturuna qədər, arqon mühitində qızdırılmaqla sintez olunmuşdur. Lakin yaranan kristal strukturda təmizlik dərəcəsi daha yüksək olan α - SiB_3 alınması kifayət qədər mürəkkəb prosesdir və əlavə olaraq həcmdə B_6Si kristal mərkəzləri formalaşır. B_6Si kristalının struktur analizi haqqında Zhang [297] ətraflı məlumat vermiş, kubik B_6Si kristalını formalaşma mexanizminin kinetikasi izah olunmuşdur. Lakin sonrakı tədqiqatlar B_6Si birləşməsinin digər kristal strukturuna haqqında məlumat vermiş və müəyyən olunmuşdur ki, kompleks kristal strukturda 43 Si atomu və 238 B atomu ortorombik vahiddə davamlı “icosahedra, icosihexahedra” rabitələr əsasında izolə olunmuş atomlardan ibarətdir [75, 292]. α - SiB_3 strukturunda B/Si 6/1 nisbəti şəkilində olmaqla oxşar Si-B sistemlərində $SiB_{5.7}$ $SiB_{6.1}$ və dəyişən B və Si atomlar ardıcılığından ibarətdir (Şəkil 1.1.3.1). SiB_n tərkibli ($n \geq 14$) birləşmələrin sintezi “peritectic” reaksiyalar nəticəsində mümkündür. Maye+ β -borun bərk qarışıqları= SiB_n 2293K temperaturda sintez reaksiyanı yerinə yetirilmiş reaksiya məhsulu kimi SiB_{14} birləşməsi alınmışdır. Borlu kristalların təməl struktur formalaşması “CASTEP” kompüter kodundan və sıxlıq funksiyası nəzəriyyəsinə istifadə olunaraq yerinə yetirilmişdir. Dəyişmə və korrelyasiya funksiyaları Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA-PBE) tərəfindən “parametrləşdirmə ilə ümumiləşdirilmiş qradient” yaxınlaşması ilə işlənmişdir [274].



Şəkil 1.1.3.1 Si-B kristalında ehtimal olunan struktur formaları.

Uyğun olaraq B elementinin elektron konfigurasiyası $2s^22p^1$ və Si elementi üçün $3s^23p^2$ və B atomunun kütləsi 10.81, Si atomunun kütləsi 28.085 və oksigen atomlarının halı üçün say sıfıra bərabərdir. Kristal strukturda k -sayda nöqtədə və 310 eV çevrilmə enerjisi daxil olmaqla Si-B sistemində mümkün bütün fazalar və elastiklik

sabiti (C_{ij}) hesablanmışdır (Cədvəl 1.1.3.1).

Cədvəl 1.1.3.1. Si-B fazasında hesablanmış elastiklik sabitləri (C_{ij}).

Faza	S.G.	C_{11}	C_{22}	C_{33}	C_{44}	C_{55}	C_{66}	C_{12}	C_{13}	C_{14}
SiB ₃	$R\bar{3}m$	326.0		349.3	144.0			86.3	92.1	-2.4
SiB ₄	$R\bar{3}m$	259.0		373.5	51.7			125.8	104.3	-37
SiB ₆	$Rm\bar{3}m$	402.6			-4.13			19.3		
	$P2_1/m$	373.6	351.6	432.5	127.2	176.4	174.8	101	101	
		29.5		16.0		-5.8		-23.7		-20
SiB ₆₋₈₁	$R3m$	187.8		196.1	117.3			74	93.3	75
SiB ₃₆	$R3m$	419.3		431.5	146.8			72.9	75.6	37
β -SiB ₃	$Imma$	288.8	369.6	357.4	123.3	134.6	130.8	51.5	64.3	

Hissəcik və bərk halda olan nümunələr üçün Voight–Reuss–Hill (VRH) yaxınlaşmasından istifadə olunmuşdur. Elastiklik modulu (E) and Puasson nisbəti üçün (ν) qiymətlər (1.1.3.1 və 1.1.3.2) ifadələrindən hesablanmışdır.

$$E = \frac{9BG}{3B+G} \quad 1.1.3.1$$

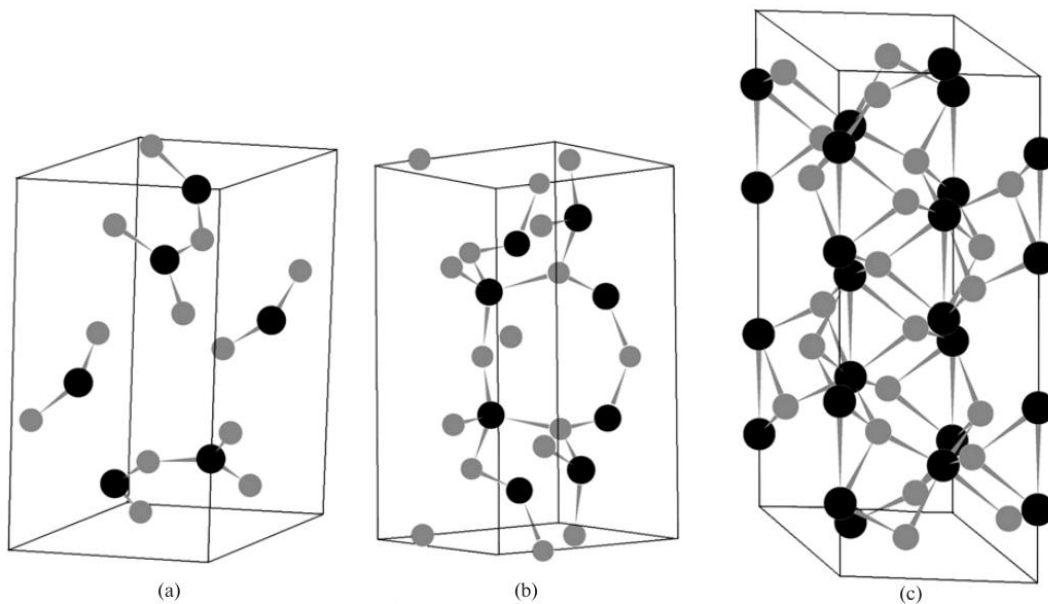
$$\nu = \frac{3B-2G}{6B+2G} \quad 1.1.3.2$$

Universal elastiklik anizotropiya əmsalı (A^U) Voigt və Reuss (B və G) tənliklərindən təyin olunur. Si-B sistemində mexaniki sabillik, tarazlıqda mövcud fazaların yoxlanılması üçün Born-Huang kriteriyasından istifadə olunmaqla təyin olunmuşdur. Məhz cədvəl 1.1.3.1-də Born-Huang kriteriyasına görə Si-B fazalarının elastiklik sabitləri və mexaniki sabilliyi hesablanmışdır. Xarici təsir faktorları B₆Si kristalını səth morfologiyasına, kristal quruluşuna və termik xassələrinə qamma şüalanmanın təsirinin tədqiqi göstərmişdir ki, B₆Si kristalı udulma dozasından asılı olaraq qamma kvantlarla şüalandırmaya davamlı materialdır [187]. Lakin, qamma şüalarının təsiri ilə kristalda qismən amorflaşma, kiçik dozalarda amorflaşma kifayət qədər yüksək olmasa da, maksimal şüalandırılma dozasında 69% amorflaşma müşahidə olunur. Bundan başqa, yüksək temperatur oblasında baş verən fiziki-

kimyəvi proseslərə və termodinamik parametrlərin qiymətlərinin dəyişməsinə qamma şüaları təsir edir [109].

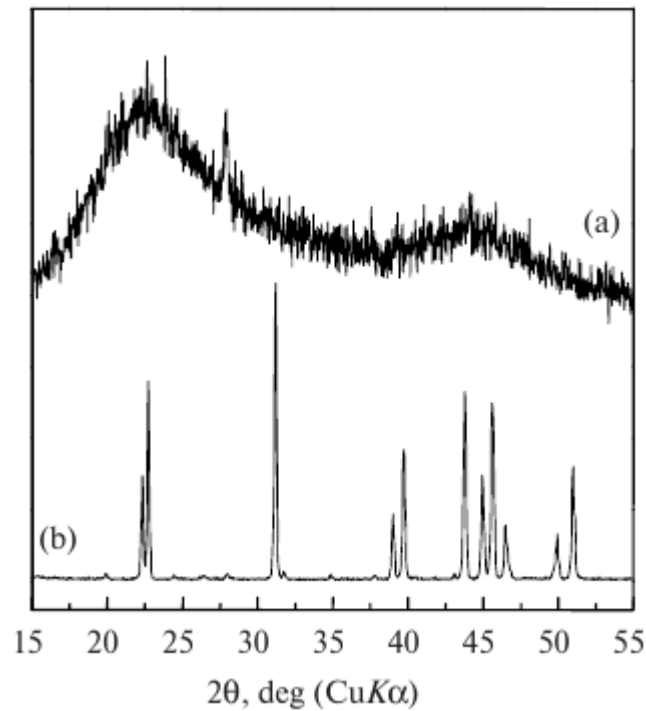
1.1.4 Müxtəlif fəza quruluşlu B_2O_3 kristalları haqqında məlumat

Tədqiqat kristallarından olan bor oksidin quruluşu haqqında elmi ədəbiyyatlarda müxtəlif məlumatlar mövcuddur [27, 40, 149, 249, 255, 261, 288,]. Bor oksid kristalının yüksək təmizlik dərəcəsi ilə sintez edilməsi üçün metaborik turşusunun 940 K temperaturda parçalanma reaksiyası yerinə yetirilməlidir [225]. Şəkil 1.1.4.1-da bor oksid kristalının iki əsas α - B_2O_3 (aşağı təzyiqli faza), β - B_2O_3 (yüksək təzyiqli faza) və γ - B_2O_3 amorfaza kristal modifikasiyaları məlumdur [79, 99, 228]. Lokal vəziyyətlərdə γ - B_2O_3 kristal strukturu α - B_2O_3 modifikasiya ilə əhatə olunmuşdur.



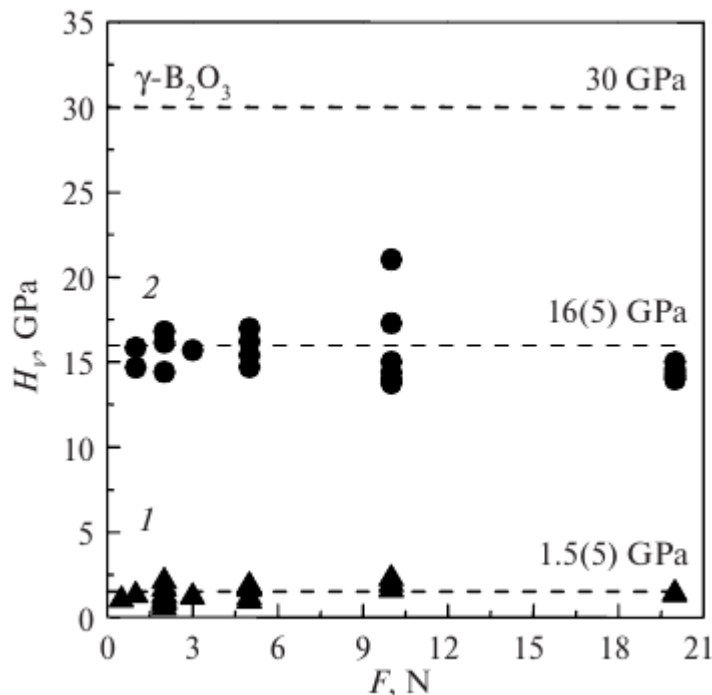
Şəkil 1.1.4.1. α - B_2O_3 (a), β - B_2O_3 (b) və γ - B_2O_3 (c, yüksək sıxlığa malik struktur) kristal strukturları; qara və ağ rəngdə uyğun olaraq B və O atomlarının yerdəyişməsi.

Qəfəs parametrləri $a=0.43358$ nm və $c=0.83397$ nm və $P31$ fəza qrupuna malikdir [146]. Yüksək sıxlığa malik β - B_2O_3 modifikasiyası isə $Cmc2$ fəza qrupuna, $a=0.4613$ nm, $b=0.7803$ nm və $c=0.4129$ nm qəfəs parametrlərinə malikdir [234-235].



Şəkil 1.1.4.2. B_2O_3 (a) və $\beta\text{-B}_2\text{O}_3$ (b) modifikasiyalarının difraksiya spektrləri.

Sintez şəraitindən asılı olaraq kristalların difraksiya mənzərəsi $d_{hkl}=3.5$ və 0.2 nm iki parametrlə xarakterizə olunur (Şəkil 1.1.4.2). Bor oksidin yüksək fazalı modifikasiyasının 7.2 GPa təzyiqdə $1020\text{-}1400$ K temperatur intervalında $\gamma\text{-B}_2\text{O}_3$ modifikasiyasının keçidi müəyyən edilmişdir [236]. Tədqiqatlar göstərir ki, B_2O_3 kristalının sərtliyi təxminən 1.5 GPa, yüksək təzyiqlərdə fazanın sərtliyi (16 GPa), daha yüksək təzyiqlərdə sərtliklə WC-10% Co nümunəsi ilə müqayisə etmək mümkündür (Şəkil 1.1.4.3).



Şəkil 1.1.4.3. B_2O_3 (1) və β - B_2O_3 (2) nümunələrinin müxtəlif təzyiqlərdə möhkəmliyi.

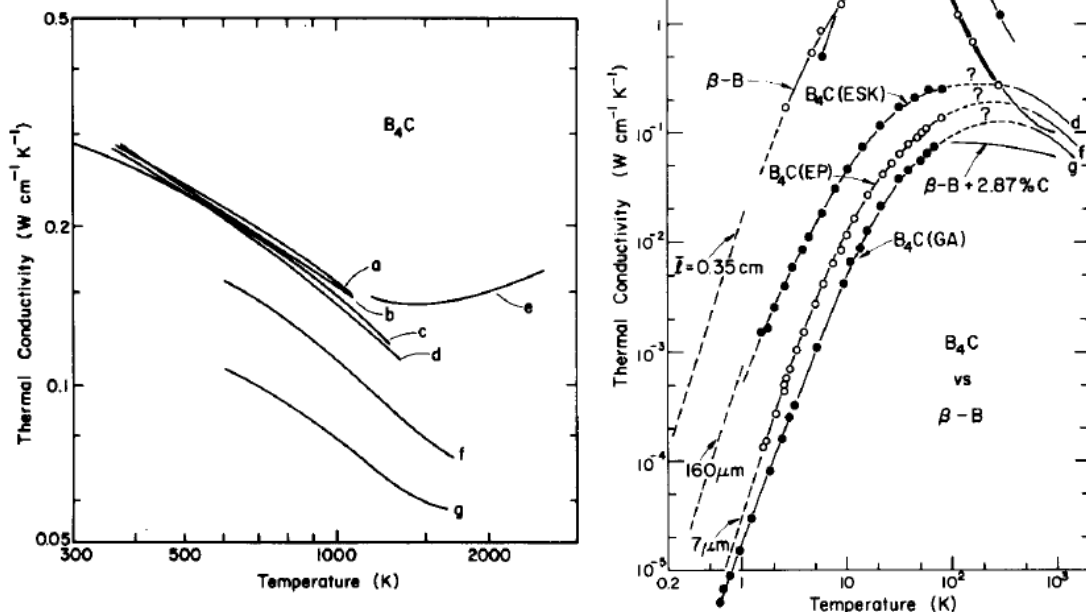
B_2O_3 tərkibi üçün β fazasının quruluşu maksimum sıxlıqda olmadığı üçün tapılan möhkəmlik qiymətinin bor (III) oksidi üçün sərhəd qiyməti olmadığını ehtimal etmək olar. Həmçinin bəzi ədəbiyyatlarda B_2O_3 –ün quruluşunda γ - B_2O_3 modifikasiyası yüksək izotropik sıxlığa malik olmaqla paralel ən yüksək sərtliyi (30 GPa) göstərir.

1.2 Tədqiqat kristallarında termofiziki xassələrin dəyişmə qanunauyğunluqları

Məlumdur ki, bor tərkibli keramik materiallar elmi texnologiyanın daha çox yüksək temperaturlu oblastlarında istifadə olunan ən perspektivli yarımkeçirici materiallar kimi geniş tətbiq olunmaqdadır [11, 35, 60, 144, 298]. Bor və borun müxtəlif binar və digər üçlü birləşmələrinin termofiziki xassələrinin öyrənilməsi fundamental maraq təşkil etməkdədir [23, 94, 110, 118]. Tədqiqat nümunələrindən ön sıralarında yer tutan bor karbid kristalının termofiziki parametrlərinin temperaturdan asılı olaraq dəyişmə kinetikasi mühüm praktik əhəmiyyətə malikdir. Ədəbiyyat icmalının analiz edilməsi, termofiziki parametrlərin kiçik və yüksək temperaturlarda qiymətlərinin təhlili öz əhəmiyyətini saxlamaqdadır. B_4C həmçinin termoelektrik

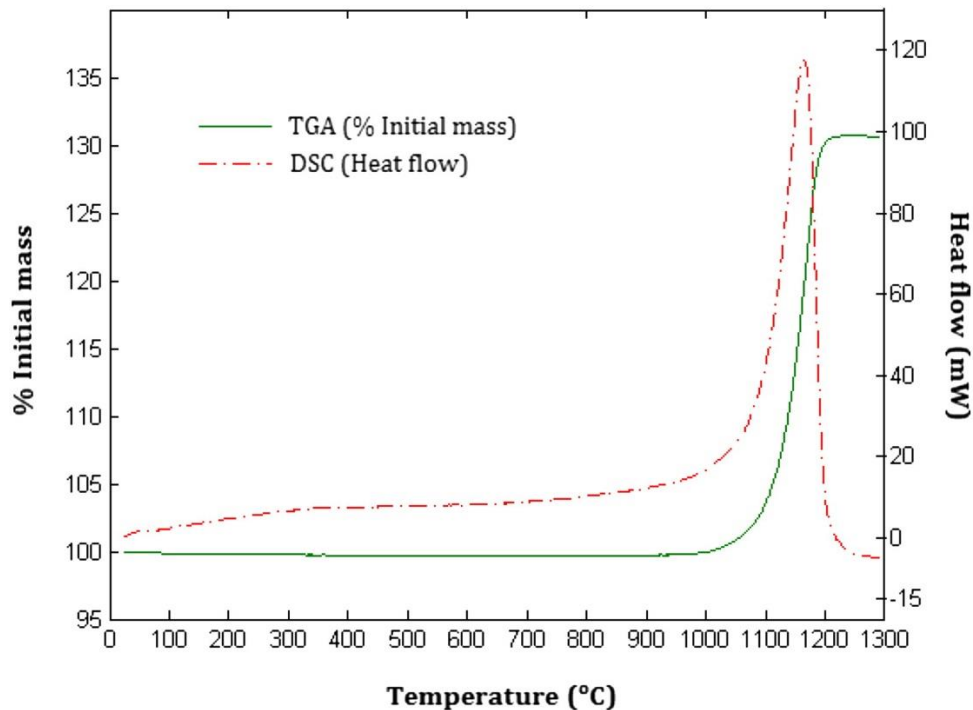
materiallar kimi texnologiyanın müxtəlif sahələrində istifadəsi üçün nəzərə alınması, kiçik termik keçiriciliyə malik olması arzu olunan xarakterik xüsusiyyətlərdən hesab olunmaqdadır [71, 82].

$B_{1-x}C_x$ ($0.1 < x < 0.2$) tərkibli birləşmə 2400K temperaturda, 400 Atm təzyiqdə 2 saat isti press formada diametri 1 sm silindirik şəkildə hazırlanmış kristallarının termik keçiriciliyi və istilik tutumu 1.5-100K temperatur intervalında H-3 soyuducu sistemindən istifadə olunaraq təyin edilmişdir [248]. Təcrübi tədqiqatların dəqiqliyinin analizi məqsədi ilə yüksək təmizlik dərəcəsinə malik kristal B nümunəsinin istilik tutumu 1.5-1520 K temperatur intervalında $\sim T^3$ qanunauyğunluğu ilə dəyişməsi təyin olunmuşdur. $C_v = 5.1 \times 10^{-8} \cdot T^3$ C/q·K istilik tutumunun verilmiş qiyməti 1.29×10^{23} 1/sm³ atomu üçün, sıxlığı 2.32 q/sm³ və Debay sürəti 1.0×10^{16} sm/san olduğu müəyyən olunmuşdur. ($3 < T < 15$ K) temperatur intervalında həmçinin kristallik B nümunəsi üçün yaxın nəticələri müəyyən etmiş və istilik tutumunun $\sim T^3$ qanunauyğunluğu ilə $C_v = 5.8 \times 10^{-8} \times T^3$ C/q·K qiyməti alınmışdır. Kristallik B nümunəsi üçün məlum qiymətlərə əsaslanaraq B_4C , $B_{15}C_2$ və B_9C kristalları üçün istilik tutumunun qiymətlərinin müqayisəli təhlilinin aparılması mümkün olmuşdur. Həmçinin B_4C kristalı üçün $60 < T < 300$ K və $320 < T < 1000$ K temperatur intervallarında aparılmış tədqiqatlar əvvəlki tədqiqat işləri ilə tam uyğunluq təşkil edir [108]. Müəyyən olunmuşdur ki, B_4C kristalı üçün istilik tutumu $C_v = 5.7 \cdot 10^{-8} \cdot T^3$ C/q·K, Debay temperaturu 1470 K və kristal strukturda atomların sayı $1.37 \cdot 10^{23}$ 1/sm³ -ə bərabərdir. Həmçinin B_4C kristalında termik keçiriciliyin qiyməti müxtəlif sıxlıqlarda və fərqli ədəbiyyat nəticələrindən alınan analizlərlə qarşılıqlı təhlili aparılmışdır (Şəkil 1.2.1).



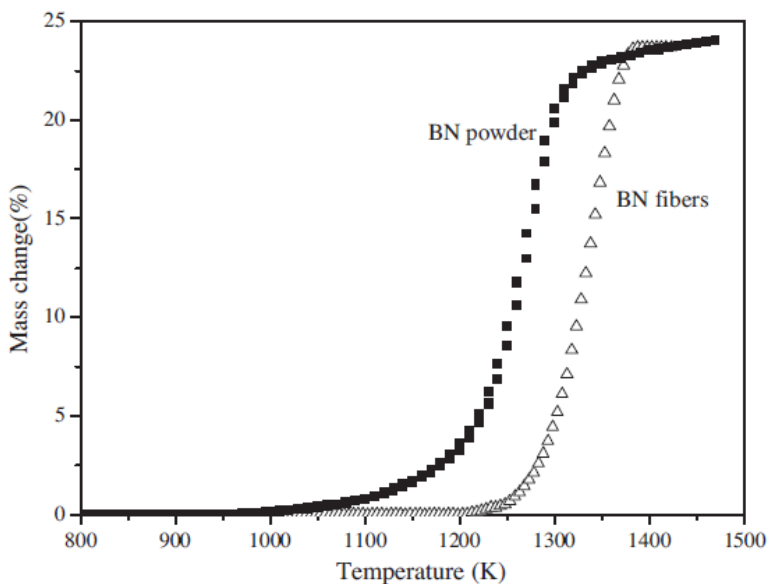
Şəkil 1.2.1. B_4C birləşməsinin müxtəlif sıxlıqlarda termik keçiriciliyi; a: sıxlığı 2.5 q/sm^3 olan və isti pressdə hazırlanmış nümunə, b: sıxlığı 2.5 q/sm^3 , c: sıxlığı 2.48 q/sm^3 , d: neytron uducu testi üçün isti pressdə hazırlanmış nümunə 2 mkm ölçülü və sıxlığı 2.48 q/sm^3 , e: sıxlığı 2.5 q/sm^3 , f: sıxlığı 2.44 q/sm^3 , g: sıxlığı 2.38 q/sm^3 .

Nəzəri hesablamalar göstərir ki, B_4C kristalı üçün optimal sıxlıq 2.52 q/sm^3 -ə bərabərdir. Təcrübi xətalari və istilik axınında mövcud itgiləri nəzərə aldıqda göstərilən ədəbiyyat nəticələri arasında uyğunluq tapmaq mümkündür. $25\text{-}1300 \text{ }^\circ\text{C}$ temperatur intervalında bor nitrid kristalının termofiziki xassələri, istilik funksiyası və kütlə kinetikasının ədəbiyyat nəticələri, normal atmosfer təzyiqində yerinə yetirilən təcrübələrdə h-BN üçün termik kinetika fərqlidir [113, 150, 277]. Müəyyən olunmuşdur ki, $1000 \text{ }^\circ\text{C}$ tempertura qədər h-BN-də kütlə spektrini xarakterizə edən TG əyriləri stabildir (şəkil 1.2.2).



Şəkil 1.2.2 h-BN kristalının 25-1300 °C temperatur intervalında istilik funksiyası və kütlə kinetikasının temperatur asılılığı.

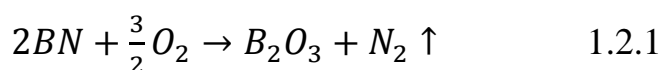
Şəkil 1.2.3-də yüksək temperaturlarda ≈ 1050 °C h-BN liflərində və nano ölçülü kristallik nümunələrdə eyni zamanda oksidləşmə reaksiyası baş verir [113].



Şəkil 1.2.3. h-BN liflərində və nano ölçülü kristallik nümunələrdə oksidləşmə reaksiyası.

Bütün təcrübələrdə ən önəmli məqam kristalların xüsusi səth sahəsi ilə bağlıdır və yerinə yetirilən təcrübələrdə SSA $6 \text{ m}^2/\text{q}$ -a bərabərdir. Xüsusi səth sahəsindən asılı

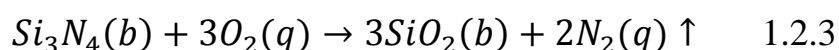
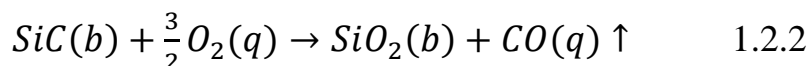
olmayaraq sadalanan kristalarda oksidləşmə reaksiyası üçün başlanğıc temperatur eynidir. Bütün təcrübi tədqiqatlarda istilik selinin əyrisi 1000-1300 °C temperatur intervalında sıçrayışlı artır və doyma halı yəni xüsusi səth sahəsinin tam oksidləşməsi ilə tamamlanan prosesdir. Bor nitrid kristallik nümunəsinin oksidləşməsi və kristalın səthində B₂O₃ kristalının formalaşma fazasının bitdiyini göstərir. Mexanizm olaraq borun atmosferdəki oksigenlə reaksiyaya daxil olaraq reaksiya məhsulu kimi B₂O₃ çevrilməsi və sərbəst N₂ qazının ayrılması baş verir. Bir sıra ədəbiyyatlarda (NO_x) qazının alınması kimi nəticələr göstərilmişdir [212]. Prosesin ümumi kimyəvi reaksiya mexanizmini aşağıdakı kimi qeyd etmək mümkündür.



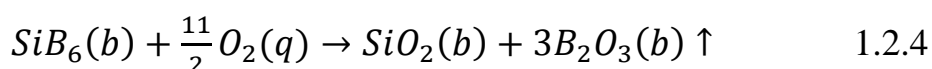
Oksidləşmə prosesinin “doyma faktor”unun tam bitməsi 1200 °C-də tamamlanır və kütlə əyrisinin stabil oblasta keçdiyi aydın müşahidə olunur [158, 165]. Aparılan tədqiqatlardan məlum olmuşdur ki, 1290 °C temperatur qədər kristalın ümumi kütləsinin 30 % oksidləşir, oksidləşmə dərəcəsi bor nitrid kristallarının səthinin 1/3 hissəsini B₂O₃ oksidi ilə örtüldüyünü göstərir. Digər tərəfdən, bir sıra tədqiqat işlərində BN kristallarının oksidləşmə müqavimətinin məhz nümunənin xüsusi səth sahəsi ilə bağlılığı geniş analzi edilmiş və böyük səth sahəsi, kiçik nano ölçü böyük oksidləşmə dərəcəsinə səbəb olmuşdur [277]. DSC əyrləri bir sıra fiziki və kimyəvi proseslərin mexanizmini (oksidləşmə və parçalanma reaksiyasını, faza keçidlərini) izah edir. İstilik funksiyasının temperatur asılılığında BN kristalı üçün 1000°C qədər (istilik selinin maksimum qiyməti 15 mW) əhəmiyyətli bir keçid müşahidə edilməmişdir (şəkil 1.2.2 və şəkil 1.2.3). Lakin sıçrayışlı formada istilik selinin qiyməti 120 mW qədər artır. Ekzotermik xarakterli 1000-1200°C temperatur intervalında müşahidə olunan proses bir başa olaraq BN kristallarının səthində B₂O₃ oksid təbəqəsinin tam formalaşdığını göstərir.

B₆Si kristalın təmizlik dərəcəsi 98%, hissəciyin ölçüsü 3 mkm olan tədqiqat nümunəsi götürülmüşdür [173]. Təcrübələrdə yüksək təmizlik dərəcəsinə malik Al₂O₃ pənlərdən istifadə edilmiş, termik işlənmə sürəti 10 K/min və havanın axın sürəti 0.5

ml/dəq götürülmüşdür. Məlumdur ki, silikat tərkibli keramik nümunələrin (SiC və Si₃N₄) yüksək temperaturlarda müxtəlif şərtlər daxilində oksidləşməsi haqqında geniş ədəbiyyat materialları mövcuddur [41, 167, 241, 265, 284, 298, 306].

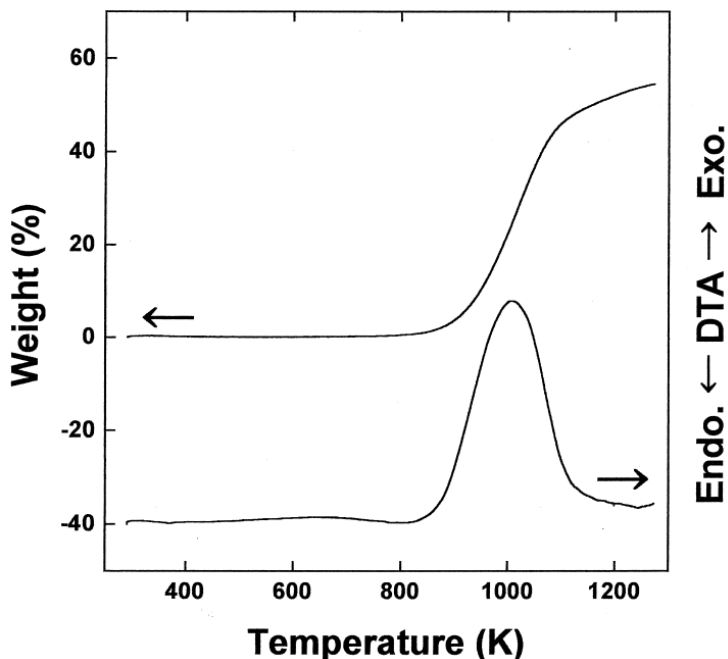


Qeyd olunan bütün proseslərdə yüksək temperaturlarda oksidləşmə məhsulu kimi SiO₂, B₂O₃ oksid təbəqəsinin formalaşması, qaz məhsullarının ayrılması (CO və N₂) və reaksiya müddətində kütlənin artması baş verir. İzotermal oksidləşmə keramik bor silikat mikro hissəciklərində yüksək temperaturda tədqiq edilmişdir [173, 283]. Kristallarda otaq temperaturundan 850 K temperaturuna qədər kütlə spektrində 0.5% azalma müşahidə olunur ki, bu da absorbsiya olunmuş suyun parçalanması ilə bağlıdır. Kütlənin artması oksidləşmə prosesi ilə eyni zamanda baş verir. 1273 K-ə qədər 25 saat müddətində atmosfer şəraitində qızdırılmış, oksidləşmə müqavimətini qiymətləndirmək üçün kütlə dəyişiklikləri aparılmış və B₆Si kristalında 673 K-dən başlayaraq 1273 K qədər kütlə artması müşahidə olunmuşdur [173].

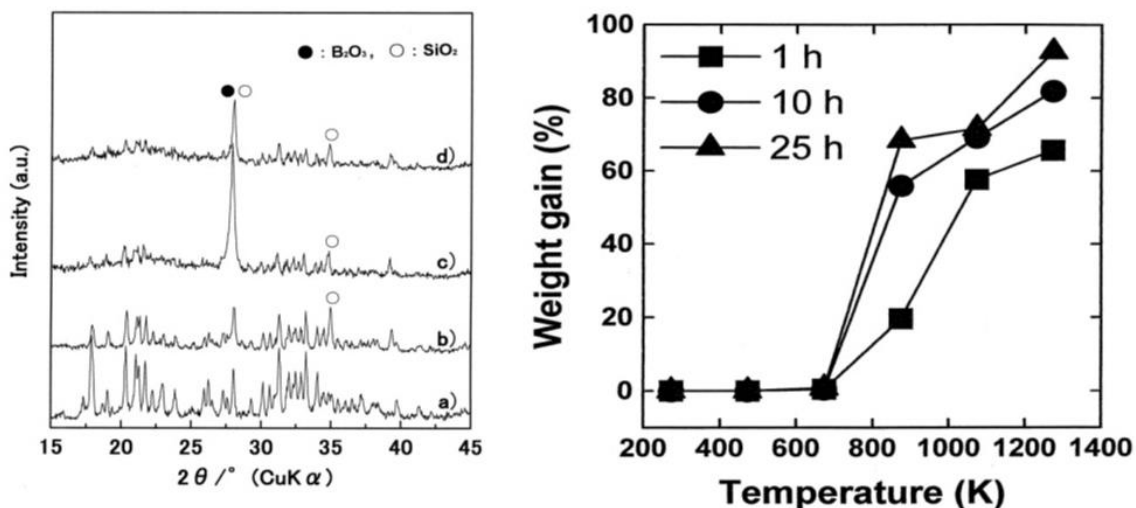


Şəkil 1.2.4-də B₆Si kristalı 850-1100K temperatur intervalında oksidləşmə mexanizmini kalorimetrik spektrlərində formalaşan ekzotermik pik və kütlə kinetikasını xarakterizə edən TG spektri ilə paralel şəkildə tamamlanmış və 55% ətrafında kütlə artımı qeydə alınmışdır. Buna bənzər materiallarda da (SiB₆+Al₂O₃) nümunəsinin oksidləşmə kinetikasi xarakterizə olunmuş və TG spektrində 50 %-ə qədər artım müşahidə olunmuşdur. Yüksək temperaturlarda SiO₂ və yaxud B₂O₃ oksid təbəqəsinin izlərinin öyrənilməsi üçün təkrar struktur analizləri aparılmış və təklif olunan mexanizmilə uyğunluq müşahidə olunmuşdur. Eyni zamanda oksidləşmənin zamandan asılı olaraq dəyişmə kinetikasına dair ədəbiyyat materialları öyrənilmiş

[173] və zaman fərqlinin əsas texniki parametrlərdən olduğu müəyyən olunmuşdur (şəkil 1.2.5).



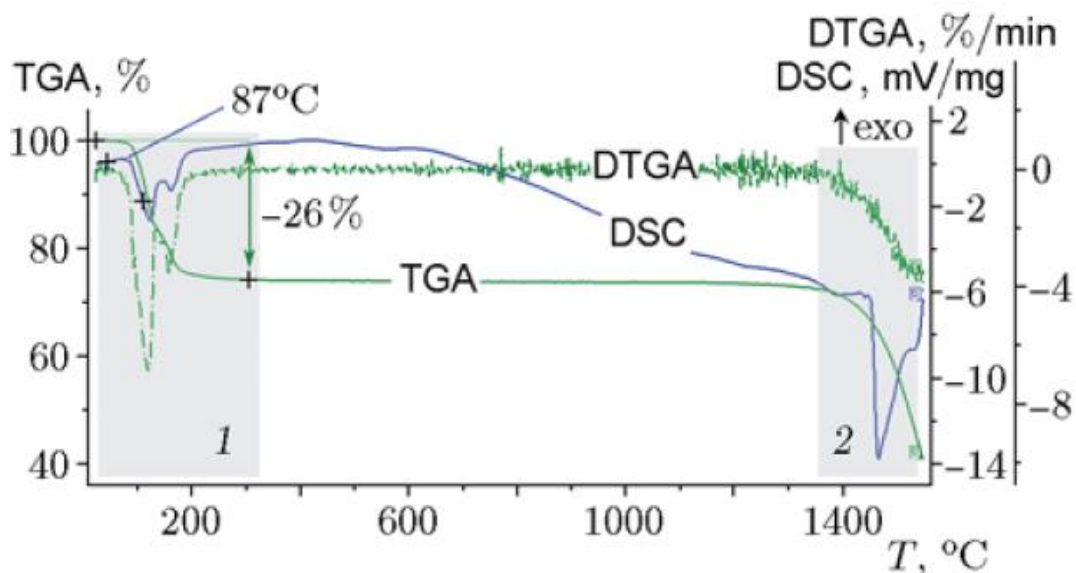
Şəkil 1.2.4. 850-1273 K temperatur intervalında 25 saat atmosfer şəraitində B_6Si kristalında oksidləşmə müqaviməti.



Şəkil 1.2.5. B_6Si kristalında 850-1273 K temperatur intervalında oksidləşmədən sonra difraksiya spektri və zamandan asılılıq kinetikasi.

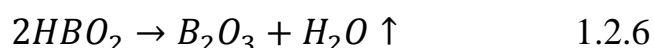
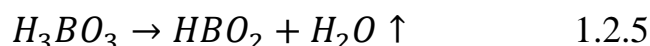
B_2O_3 kristalının termofiziki və kütlə dəyişməsinin öyrənilməsi məqsədi ilə müxtəlif tədqiqat metodlarından (DSC-differential calorimetry analysis, TGA-thermogram analysis və DTGA-differential thermogram analysis) istifadə olunmuşdur [26, 99, 225]. Şəkil 1.2.6-də B_2O_3 kristalının 20-1550°C temperatur intervalında DSC,

TGA və DTGA spektrləri verilmişdir. Spektral dəyişmədən aydın olur ki, üç əsas hadisə prosesin ümumi mahiyyətini təşkil edir; “boric acid” dehidratasiya reaksiyası nəticəsində kütlə itkisi, ərimə prosesi və B_2O_3 buxarlanması ilə baş verən kütlə itkisi ilə xarakterizə olunur [117].



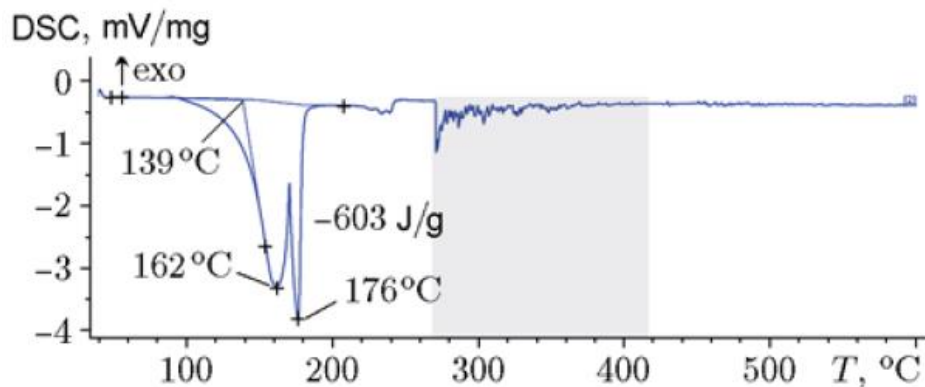
Şəkil 1.2.6. Arqon inert mühitində, 10 K/dəq qızma sürəti ilə B_2O_3 kristalı üçün DSC, TGA və DTGA spektrləri; 1-borik turşusunun susuzlaşdırılması və 2- B_2O_3 buxarlanma.

Şəkil 1.2.6-də birinci hissəsində iki mərhələli endotermik piklərlə xarakterik olunan DSC əyriləri ilə TGA spektri ilə uyğunluq təşkil edir. Bor oksidin böyük adsorbsiya xassəyə malik olması onun adi atmosfer şəraitində bor turşusuna keçməsi və temperaturun təsiri altında aşağıdakı mexanizimlərlə B_2O_3 -ə keçməsi ədəbiyyat materiallarında göstərilmişdir [225].



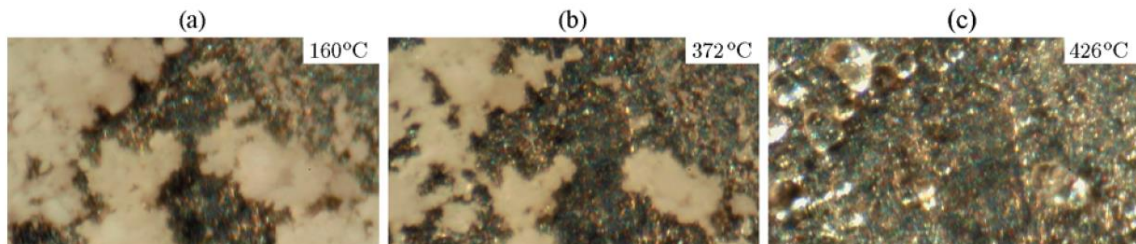
Kütlə itkisinin xarakteristikası açıq pəndə aparılan eksperimentlərdə 26 %-ə, nəzəri təcrübələrdə isə 43.7 %-ə bərabər olunmuşdur. Belə qənaətə gəlmək olar ki, ilkin

B_2O_3 kristalının $\frac{1}{2}$ hissəsini bor turşusu təşkil edir və vizual olaraq müşahidə zamanı suyun susuzlaşdırılması nəticəsində struktur xarakterli heç bir dəyişiklik baş vermir. DSC spektrindən istifadə edərək əldə edilən siqnal-temperatur asılılığında borik turşusunun dehidrasiyasının iki endotermik piki STA məlumatları ilə müqayisədə daha aşağı temperaturlara doğru yönəlir.



Şəkil 1.2.6. B_2O_3 kristalının Ar inert mühitdə xətti qapalı pənlərdə DSC spektri.

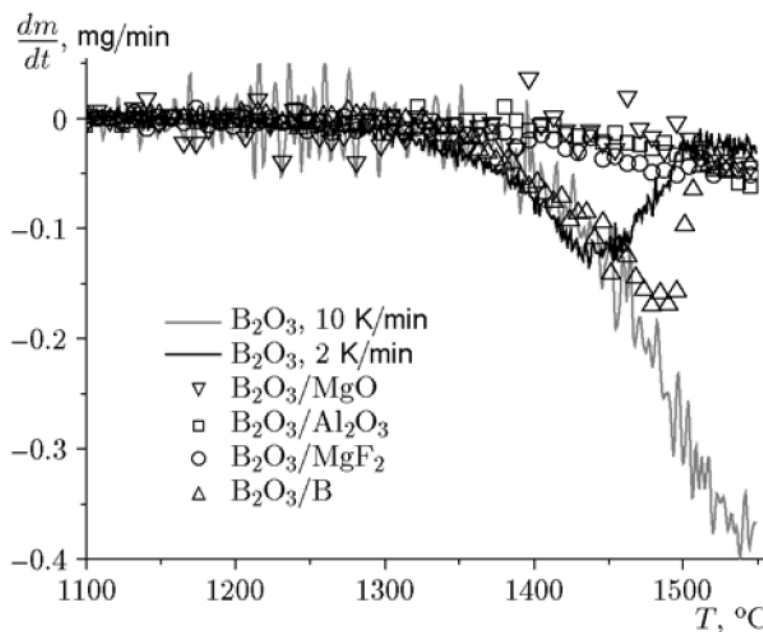
B_2O_3 kristalının əriməsi spektrdə heç bir dəyişiklik olmadan baş verir və amorf təbiətinə malik olduğuna görə açıq pənlərdə aydın bir endotermik pik ilə müşayiət olunmur. Əlavə olaraq bor oksidin ərimə kinetikasının ətraflı öyrənilməsi üçün təcrübələr DSC 409 HP (Netzsch, DSC) kalorimetrində, qapalı pənlərdən istifadə olunaraq aparılmışdır. Suyun parçalanmasından sonra oksid hissənin əriməsinə uyğun gələn siqnalın endotermik pikləri $257^\circ C$ başlanaraq qeyd olunur. Temperaturun artması ilə $310^\circ C$ - hissəciklərin səthində aparılan morfoloji analizlərdən ərimənin baş verdiyini müşahidə etməkdə olar və temperatur yüksəlməsi ilə hissəciklərin mayeləşməsi prosesi baş verir. Şəkil 1.2.7-də maye təbəqənin artan mexaniki hərəkəti müşayiət olunur, əriyən damlalar $600^\circ C$ -də şəffaf homogen təbəqəyə çevrilir və böyük sferik damlalar şəklində formalaşır.



Şəkil 1.2.7. B_2O_3 kristalında temperaturdan asılı olaraq maye təbəqənin artan mexaniki hərəkəti və sferik damlalar şəklində formalaşması.

Şəkildən aydın müşahidə olunur ki, bor oksidinin damcılarının genişlənməsi (əriməsi) və aqlomeratların əmələ gəlməsi təsvir edilmişdir [289]. Formalaşmış mayenin hərəkətinin səbəbləri həm amorf bor oksidinin əriməsi zamanı 33% artması ($\rho_{\text{bərək}} = 1.85 \text{ q/sm}^3$ və $\rho_{\text{maye}} = 2.46 \text{ q/sm}^3$), həm də artan temperaturla birlikdə əridilmiş bor oksidin səthi gərginlik əmsalının anomal artması ilə əlaqələndirmək olar.

600 °C-ə qədər qızdırıldıqda ərimə tam və şəffaf olur, 400 °C-dən yuxarı susuzlaşdırma tamamlandıqda kristalın kütləsi 1200 °C qədər dəyişməyən və istiləşmə zamanı buxarlanmağa başlayan, buxarlanma sürəti 1300–1400°C -də eksponent olaraq yüksələn saf bir bor oksidinə çevrilir. B_2O_3 birləşməsinin kütlə itgisi nisbətinin ayrılərini 2 və 10 K/dəq qızdırma dərəcələri 1450°C temperatura qədər baxılmışdır (şəkil 1.2.8).



Şəkil 1.2.8. B_2O_3 kristallarının 2 və 10 K/dəq qızdırma dərəcələri ilə DTG spektrləri.

Kristalların kütləsində əhəmiyyətli itkisinin sürəti (nə qədər yavaş olursa, kritik kütlə o qədər kiçikdir) buxarlanmanın baş verdiyi səthin sahəsinin azaltmağa başlayır və kütlə itkisinin dərəcəsi Langmur tənliyinə uyğun (dm/dt) -də azalır.

$$-\frac{dm}{dt} = \gamma p S \sqrt{\frac{M_g}{2\pi RT}} \quad 1.2.7$$

Burada γ buxarlanma əmsalı, M_g buxarlanan maddənin molekulyar kütləsi, S buxarlanma səthi, p buxarlanma təzyiqi, T temperatur və R universal qaz sabitidir. Ədəbiyyat materiallarında borun titanlı [39], oksigenli [229] birləşmələrində ekzotermik qarşılıqlı təsirlərin meydana gəlməsi üçün oksidin buxarlanmasının və səthin “aktivləşməsinin” idarəedici rolu qeyd olunur. Bor oksidinin buxarlanma prosesinin əhəmiyyətindən asılı olmayaraq, ədəbiyyatda onun buxarlanmasının entalpiyası ilə bağlı məlumatlar 325 kC/mol, [99] 336 kC/mol, 390 kC/mol [116], 392 kC/mol [40] verilmişdir. Bor oksidin 1, 2, 5 və 10 K/dəq dərəcəsi ilə 0,1 Mpa təzyiqdə qızdırılması zamanı əldə edilən TGA məlumatlarına əsaslanaraq buxarlanma entalpiyasını Langmur tənliyinə görə hesablanmışdır [209]. Birləşdirmələr aparmaqla Klasius -Klapeyron tənliyi ilə hesablamalar aparılır.

$$\ln\left(\frac{dm}{dt}\sqrt{T}\right) = a - \frac{\Delta H_m(T)}{RT} \quad 1.2.8$$

1120-1520 °C temperatur intervalında buxarlanmanın orta entalpiyasının 347 ± 3 kC/mol olduğu təyin olunmuşdur.

1.3 Kristalların struktur quruluşunda müxtəlif növ şüaların təsiri altında radiasiya defekt əmələgəlmə, migrasiya və rekombinasiya mexanizmləri

İonlaşdırıcı mühitlərdə nöqtəvi defektlərin əmələgəlməsi və müxtəlif nümunələrdə diffuziyası kristallarda və amorf birləşmələrdə fərqli mexanizimlərlə baş verir [1, 2, 7, 38, 46, 50, 59, 100, 161]. Xarakterik olaraq defektləri vakansiya və düyünlər arasındakı defektlər, 0D), xətti (1D), müstəvi (2D) və həcmi (3D, qabarmalar, defekt paketlər və tetraqonal defekt paketləri qruplarına bölmək mümkündür [59, 101, 304]. Bərk cisimlər fizikasıdan məlumdur ki, şüalanmadan sonra strukturda əsas

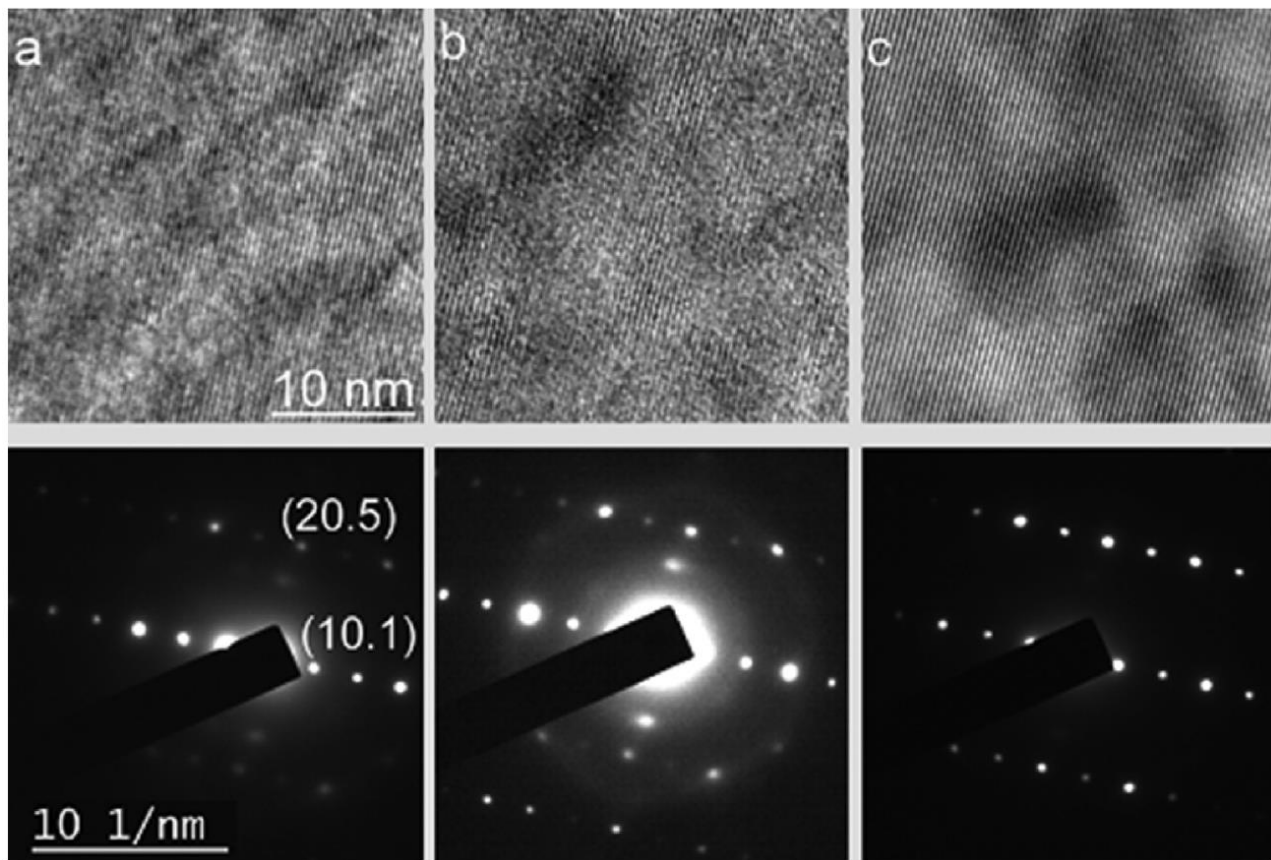
nöqtəvi defektlər formalaşır, onların əsas tərkib hissəsini atomlararası pozulmalar, düyünlərarası defektlər və vakansiyalar təşkil edir [295]. Atomlararası defektlər kristal qəfəsdə requlyar olmayan atomlar arasında və düyün nöqtələrdə yerləşir. Məlumdur ki, defekt əmələgəlmə mexanizmi bilavasitə fəza qrupundan asılıdır. Düyünlərarası defektlər ən sadə kubik qəfəs quruluşlarında oktoedrik və tetraedral quruluş formalaşdırır [281, 302].

Kubik qəfəs quruluşunun tinlərində yerləşən atom səkkiz elementar qəfəs ilə qarşılıqlı əlaqədədir. Hər bir müstəvidəki atom iki qəfəsin müstəvisindədir. Qəfəsdəki atomların sayı tinlərdə yerləşən səkkiz atom səkkiz qəfəs ilə qarşılıqlı təsirdədir. Qəfəsin düyünlərində yerləşən atomlardan altısı hər iki kristal ilə bağlıdır. Sadə kubik quruluşda atomlar arasındakı müstəvidə yerləşən atomların dörd oktoedrik vəziyyətdə formalaşır ki, onlardan biri mərkəzləşmiş elementar qəfəs quruluşundan digərləri isə tinlərdə formalaşır [278,]. Mürəkkəb mexanizimlə baş verən prosesin aşağıdakı şəkildə əyani təsvir edilməsi mümkündür.

Quruluş modifikasiyasında çatışmayan vakansiyalar ətrafı nöqtəvi defektlərin ən sadə modelində təsvir edilməsi üçün yerinə yetirilmiş kompüter modelləşdirilmələrində göstərilir ki, vakansiya ətrafında qonşu atomlar vakansiyanı bir-bir əvəz etməklə quruluş daxilində hərəkətdə olur [275, 308]. Düyünlər arasındakı atomların formalaşma enerjisi ≤ 2.0 eV, relaksasiya həcmi 2Ω və aşağı enerjilərdə miqrasiya (≤ 0.15 eV) və yüksək hərəkətli xarakterə malikdir [152]. Struktur və sıxlıq parametrlərindən asılı olaraq vakansiyalar daha kiçik enerjilərdə ≥ 1.8 eV formalaşır, daha böyük relaksasiya həcminə malik olur ($0.1-0.5\Omega$), yüksək enerjilərdə miqrasiya və atomlar arasındakı düyünlərlə daha kiçik hərəkətlidir. Bütün bunların təmsalında kristal quruluşda vakansiyaların yığılması üçün tələb olunan enerji atomlar arasındakı klasterlərin yaranması üçün tələb olunan enerjidən daha kiçik enerjilərdə (0.1 eV) baş verir.

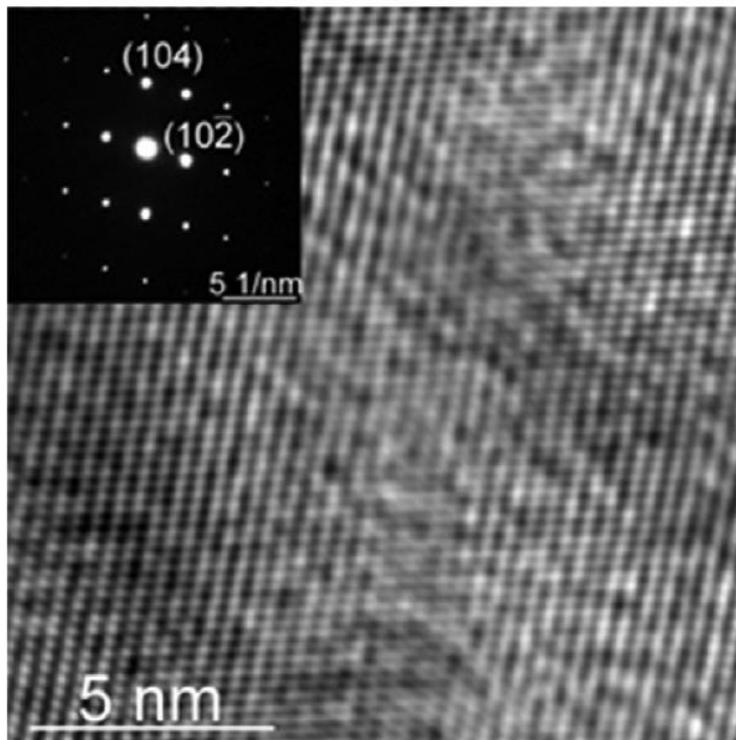
Gosset və başqaları 4 MeV enerjiyə malik qızıl (Au) ionları ilə bor karbid kristalını $1.0 \cdot 10^{13}$ ion/sm² -dən $4.0 \cdot 10^{15}$ ion/sm² -dək sel sıxlığında, DPA dəyəri 0.01 -dən 8 dpa intervalında olan və maksimum ion konsentrasiyasında otaq temperaturunda şüalandırılması yerinə yetirilmişdir [100, 101]. Ağır ionlarla yerinə yetirilən tədqiqat

işinin əsas məqsədi bor karbid kristalında amorflaşma mexanizminin müxtəlif analitik metodlarla əyani göstərilməsidir.



Şəkil 1.3.1. 4 MeV qızıl (Au) ionları ilə 10^{15} ion/sm² intensivlikdə şüalandırılmış bor karbidin TEM və SAED görüntüləri; a: Dərinlik ~10 nm. b: Dərinlik ~50 nm. c: Dərinlik ~100 nm.

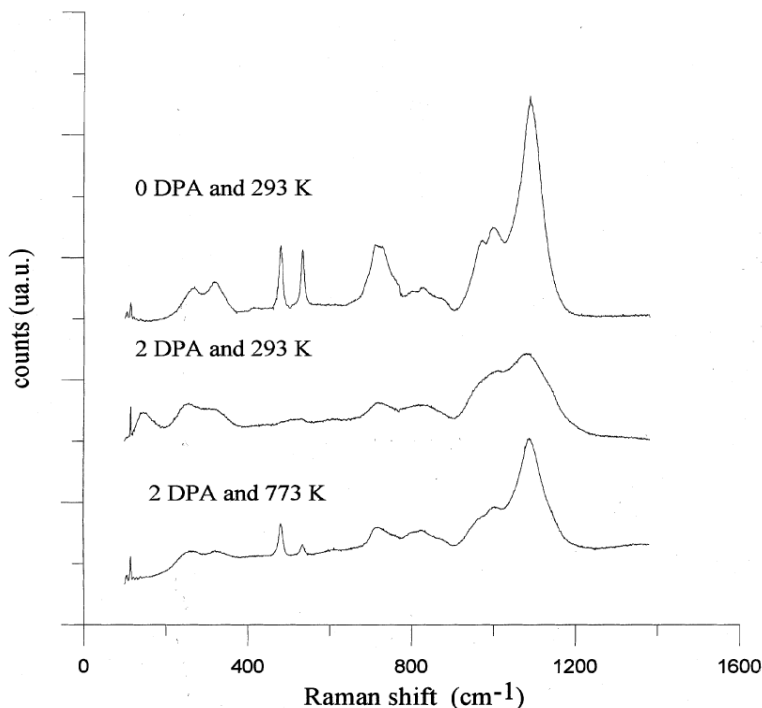
Şəkil 1.3.1-də göstərilən TEM görüntülərində $1.0 \cdot 10^{15}$ ion/sm² intensivlikdə şüalandırılmış və 10 nm, 50 nm və 100 nm dərinliyə görə alınmış görüntülərdən aydın olur ki, müxtəlif modifikasiyalarda radiasiya defektlərinin təsirləri aydın müşahidə olunur. Lakin TEM tədqiqatlarından aydın olur ki, $5.0 \cdot 10^{14}$ ion/sm²-ə qədər B₄C kristalı implantasiya olunmuş səthində radiasiya təsiri nəticəsində yaranan defektlərin diffuziya sahəsinin seçilməsi aydın görünür (Şəkil 1.3.2).



Şəkil 1.3.2. Qızıl (Au) ionları ilə $5.0 \cdot 10^{14}$ ion/sm² intensivlikdə 4 MeV enerjiddə, 50 nm dərinlikdə şüalandırılmış bor karbidin diffuziya sahəsinin TEM və SAED görüntüləri.

TEM müşahidələri şüalanmanın struktur deqredasiyasına səbəb olduğunu sübut edir və kristallik strukturda radiasiya təsirləri nəticəsində iki sahəli amorflaşma görünür. Ön sahədə (səthdən təxminən 70 nm-ə qədər dərinlikdə) kiçik intensivliklərdə amorflaşmış, digər kristallik sahələrdə nanometrik ləkələr kimi səpələnmiş və ya meydana gəlmiş dislokasiya kimi defektlər görünməkdədir. İkinci sahə (təxminən 70 nm-dən 100 nm-ə qədər olan dərinlik) yüksək intensivlikli implantasiya axınında analiz edildi, ilkin amorfizasiya prosesinin izləri ön bölgənin zədələnməsini göstərir. TEM tədqiqatlarının təsdiqi üçün əlavə aparılmış SRİM, SİMS və Raman spektroskopik tədqiqatlar amorflaşma prosesinin təbiətini və B₁₂, B₁₁C₁, B₁₂C₂, B₆O və B₆Si formalaşmış izləri müəyyən edilmişdir. Nüvə reaktorlarında parçalanma məhsulu kimi ən çox rast gəlinən He⁺ ionlarıdır. Otaq temperaturunda enerjisi 180 keV olan He⁺ ionları ilə 10^{12} ion/sm² intensivlikli şüalandırılmış bor karbid kristalında defekt əmələgəlmə kinetikasi analiz edilmişdir [100]. 180 keV enerjili He⁺ ionlarının B₁₂C₃ kristalında nüfuz etmə dərinliyi TRIM (Transport Ions in Matter) kodu ilə Ziegler

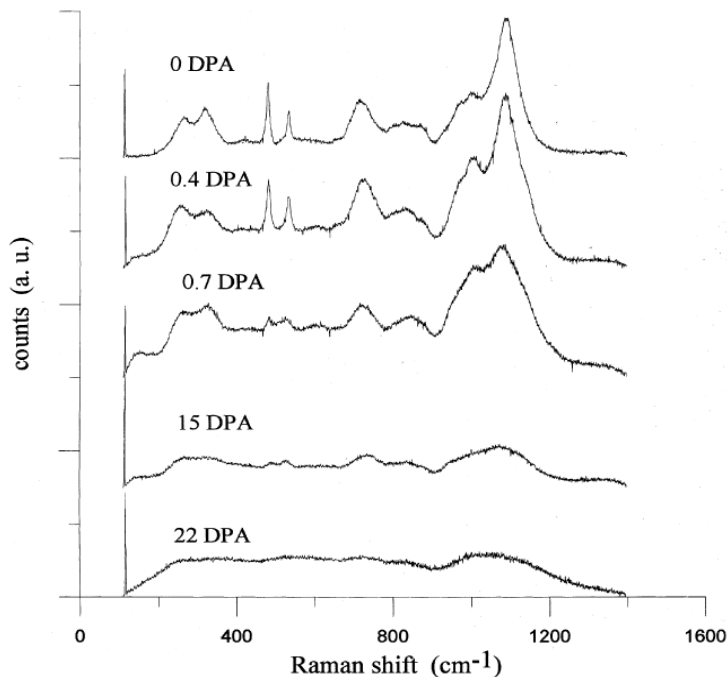
formulundan istifadə edilərək hesablanmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, He^+ ionlarının B_{12}C_3 kristalında ortalama implantasiya dərinliyi 0.6 mkm-ə bərabərdir. Helium ionlarının nümunədə konsentrasiyası 1 DPA üçün 10^{-3} -ə, 2 DPA-da isə $2.0 \cdot 10^{-3}$ -ə ekvivalentdir. Raman tədqiqatlarından aydın olur ki, DPA-nın artması ilə 485 cm^{-1} və 527 cm^{-1} Raman şifflərində mövcud olan piklərin intensivliyi azalır. Həmçinin 1 DPA-dan sonra 155 cm^{-1} tezlikdə geniş yayılmış yeni piki aşkar edilmişdir (şəkil 1.3.3).



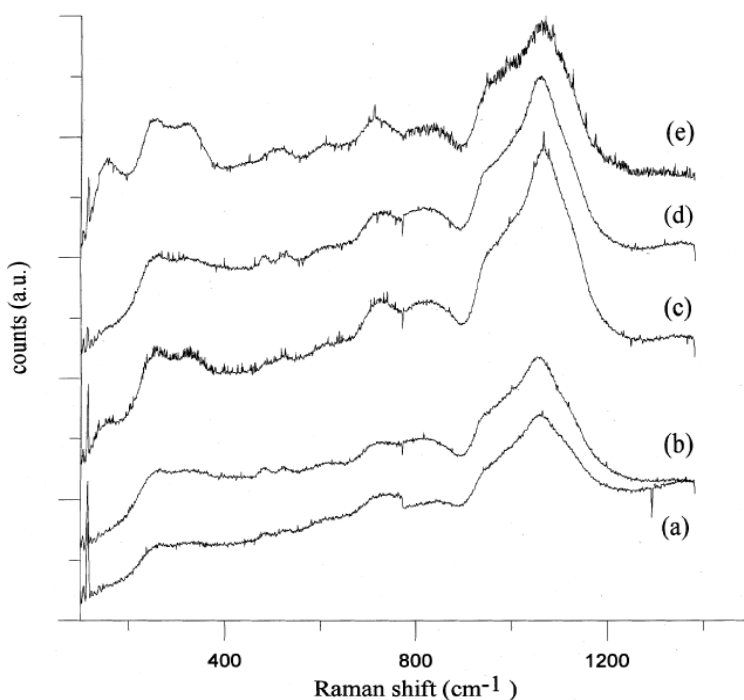
Şəkil 1.3.3. İlkin, şüalanmış və 773 K termik işlənmiş B_{12}C_3 kristalının Raman spektrləri.

Temperaturdan asılı olaraq piklərin vəziyyətinin öyrənilməsi məqsədi ilə həmmüəliflər 773 K temperaturda 30 dəq ərzində termik işləmədən sonra təkrar Raman analizləri aparmış, termik işləmədən əvvəl və sonra Raman spektrlərinin müqayisəli spektrləri göstərilmişdir [153-154]. Müəyyən olunmuşdur ki, termik işlənmiş kristallarda şüalanmamış nümunədə olduğu kimi piklərin yenidən bərpa olunması baş verir. Helium atomlarının şüalanmamış bor karbid kristalında diffuziya uzunluğu 5.3 nm ətrafındadır [101]. Təyin olunmuş qiymətin nümunənin ölçülərindən olduqca kiçik olduğu üçün helium atomlarının nümunədəki paylanmasını nəzərə almamaq mümkündür. Termik işlənmiş və ilkin nümunələrin Raman spektrləri arasında mövcud fərqin helium atomlarının kristalda yayılması ilə bağlı olma ehtimalı olduqca kiçikdir.

Təkrar yüksək temperaturlarda termik işlənmiş bor karbid kristallarında mövcud 155 sm^{-1} pikin yox olması və 485 sm^{-1} və 527 sm^{-1} piklərinin isə yenidən intensivləşməsinə səbəb olur. Ağır ionlarla paralel neytron şüalarının bor karbid kristalında yaratdığı defekt əmələgəlmə mexanizminin təbiəti mürəkkəb qanunauyğunluqla dəyişir [177, 194, 246, 283]. Məlumdur ki, fərqli enerji və intensivlikli neytron şüalanması zamanı paralel gamma və elektron təsirləri də mövcuddur [7, 147, 185]. Simeone və digər həmmüəlliflərin yerinə yetirdikləri tədqiqatlarda 600 K temperaturda yüksək intensivlikli ($3.0 \cdot 10^{20} \text{ ion/sm}^2$) neytron şüaları ilə 323 gün (Pressurized Water Reactor, PWR) tədqiqat nüvə reaktorunda dairəvi formada hazırlanmış B_{12}C_3 kristalları üzərində şüalanma effektləri və lokal yerlərdə yaranmış nöqtəvi defektlərin yaranma dinamikası tədqiq edilmişdir [283]. Ümumiyyətlə, neytron selinin kristal ilə elastiki və qeyri-elastiki toqquşmaları mövcuddur ki, göstərilən hər iki prosesin ən mürəkkəbi qeyri-elastiki toqquşma zamanı baş verir [120-122]. Məlumdur ki, neytronun kristaldan elastiki səpilməsi zamanı neytron kinetik enerjisinin müəyyən bir hissəsini itirməsi ilə yekunlaşır. Lakin qeyri elastiki toqquşma zamanı yeni izotopların yaranması ilə zəncirvari nüvə reaksiyaları baş verir [120]. Şəkil 1.3.4 və şəkil 1.3.5-də 0 DAP-dan başlayaraq 20 DPAYA qədər geniş bir inrevalda şüalanmış B_{12}C_3 kristallarının Raman spektrləri və 373 K, 573 K, 673 K və 773 K temperaturlarda 30 dəqiqə temik işlənmədən sonra təkrar Raman spektrləri verilmişdir. Müəyyən olunmuşdu ki, yüksək temperaturlarda termik işlənmə bor karbidin xarakterizə edən piklər yenidən bərpa olunur.



Şəkil 1.3.4. İlkin və müxtəlif DPA-da şüalanmış $B_{12}C_3$ kristalının müqayisəli Raman spektrləri.



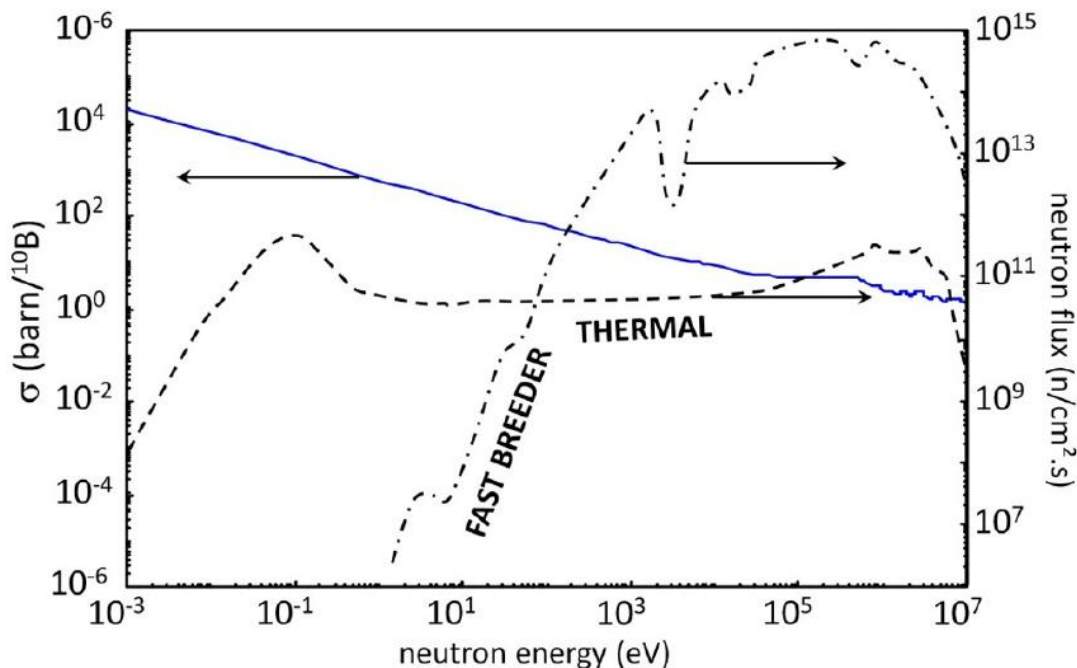
Şəkil 1.3.5. Müxtəlif termik işləmədən sonra şüalanmış $B_{12}C_3$ kristalında Raman effektləri; a) 2 DPA-da neytron seli ilə şüalanmış kristal, b) 373 K temperaturda 30 dəq termik işlənmiş kristal, c) 573 K temperaturda 30 dəq termik işlənmiş kristal, d) 673 K temperaturda 30 dəq termik işlənmiş kristal, e) 773 K temperaturda 30 dəq termik işlənmiş kristal.

^{10}B izotopu demək olar ki, bütün nüvə reaktorlarında yüksək effektiv neytron uducuların hazırlanmasında istifadə olunur [254]. Neytronun ^{10}B ilə qarşılıqlı təsiri cədvəl 1.3.1 göstərilmişdir. Yüksək kinetik enerjili He və Li ionlarının alınması ilə nəticələnən nüvə reaksiya baş verir. İki mexanizimli reaksiyada fərqli enerjilərdə əlavə alfa, qamma və protonların hissəciklərində yaranması müşahidə olunur [35].

Cədvəl. 1.3.1. Neytronun ^{10}B izotopu ilə qarşılıqlı təsir mexanizmi.

^{10}B	$B^{10} + n \xrightarrow{94\%} \alpha(1.47 \text{ MeV}) + Li^7(0.84 \text{ MeV}) + \gamma(0.48 \text{ MeV}) \xrightarrow{6\%} \alpha(1.78 \text{ MeV}) + Li^7(1.01 \text{ MeV})$	3840
^6Li	$n + Li^6 \rightarrow H^3(2.72 \text{ MeV}) + \alpha(2.05 \text{ MeV})$	940
^3He	$n + He^3 \rightarrow H^3(191 \text{ keV}) + p(573 \text{ keV})$	5330

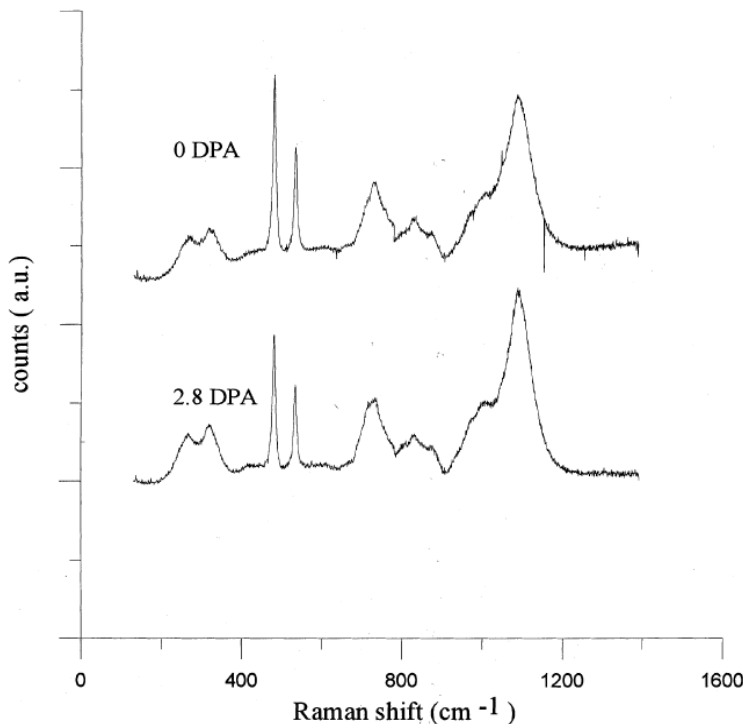
Həmçinin neytronun enerjisindən asılı olaraq effektiv en kəsiyin və neytronun sel sıxlığının dəyişməsi şəkil 1.3.6 verilmişdir.



Şəkil 1.3.6. ^{10}B izotopu üçün neytron udulmanın effektiv en kəsiyi.

Aydın olur ki, yüksək enerjili neytronların maddə ilə qarşılıqlı təsiri zamanı səpilmənin effektiv en kəsiyi enerji ilə tərs mütənəsbdir, termal və sürətli neytronlar üçün qanunauyğunluq mövcuddur. Sadalanan şüalanmalar sırasında elektron şüalanmanı da xüsusi qeyd etmək lazımdır ki, yüksək enerjili xətti elektron sürətləndiricilərdə bor karbid ilə bağlı müxtəlif tədqiqatlara rast gəlinir [127, 193, 227].

1.2 MeV enerjili elektronlarla şüalandırılmış bor karbid kristallarında Raman spektrlərinin müxtəlif DPA-larda amorflaşma mexanizmi müşahidə olunmuşdur (şəkil 1.3.7)



Şəkil 1.3.7. İlk və 1.2 MeV enerjili elektronlarla şüalanmış B₁₂C₃ kristallarının Raman spektrləri.

1.4 Ədəbiyyat xülasəsindən alınan mühüm nəticələr, açıq sualların elmi və praktiki qiymətləndirilməsi və dissertasiya işinin əsaslandırılması

Son on illikdə bor birləşmələri üzərində müxtəlif sürətli ağır ion şüalanma mənbələri ilə yerinə yetirilən analitik tədqiqatlar göstərir ki, kristallik, yarımkrystal, kompozit birləşmələrində və çox laylı nümunələrində Ar, Kr, və Xe ionları ilə 150-580 kEv enerji intervalında $\sim 10^{20}$ ion/m² sel sıxlıqlarında şüalandırıldıqda səthdə fərqli ölçülü qabarcıqların böyüməsi effekti baş verir [36, 100, 101, 189, 227, 271]. Həmçinin tədqiqat üçün seçilmiş kristalda müxtəlif ion şüalanma mənbələrini təsirləri və səth morfoloqiyasının formalaşması fərqli dinamikada müşahidə olunur. Kristalların səthində lokal yerlərdə müxtəlif ölçülü qabarcıqların sərhədləri açıq aydın müşahidə olunur və şüalanma dozasından asılı olaraq hərəkətli xarakterlidir. Ağır ionlar texnologiyasında müxtəlif yanaşmalardan istifadə olunaraq qabarcıqların yaranma

kinetikasını riyazi və fiziki əsaslandırılması verilmişdir [2, 210].

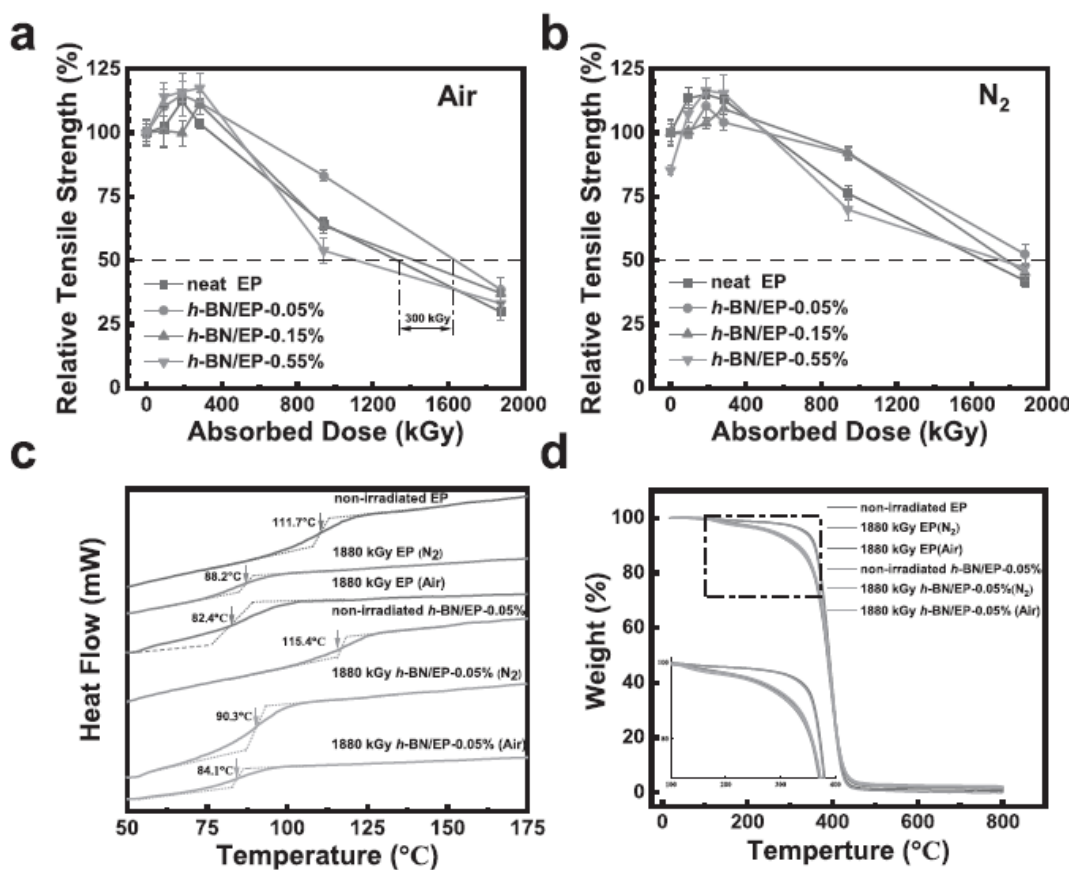
Aydındır ki, xarici təsirə məruz qalmayan təmizlik dərəcəsi yüksək faizli olan kristalların səthində qabarcıqlar rast gəlinməkdədir. Lakin şüalanmadan sonra böyük ölçülü qabaqcıqlar kiçik və orta ölçülü qabarcıqları adsorbsiya edir. Daha dəqiq zədələnmiş qabarcıqlar kaskad əmələ gətirir ki, bu da çox laylı nümunələrin səthində qabarcıqların böyüməsinə gətirib çıxarır. Çox laylı birləşmələrdə şüalanmadan sonra səthin kinetikasi şüalanma müddətindən asılı olaraq 2.2 dəfə daha çox qabarcıqlara rast gəlinir [11, 242].

Termo nüvə reaktorlarında reaksiya məhsulları kimi H və He ionlarının parçalanması ilə baş verən mürəkkəb proseslər, helium ionların enerjisi 1 MeV kiçik olmaqla paralel 100 nm dərinliyinə nüfuz etmə qabiliyyətinə malikdirlər. Əlavə olaraq qabarcıqların böyümə sürəti çox laylı kristallarda ən yaxşı ehtimalla bizim bor əsaslı nümunələrdə dəfələrlə çoxdur. Bu şəkildə bor tərkibli kristallarda daha böyük olması nümunənin səthində baş verən termik proseslərlə bağlıdır ki, Jon yaxınlaşmasından istifadə olunaraq bu proseslərin kinetikasını riyazi əsaslandırılmasının aparılması mümkündür [10]. Əsasən qabarcıqların kinetikasi elmi ədəbiyyatda termik proseslərdən yaranan piklər kimi adlandırılır. Formalaşan bütün termik piklər silindirik həndəsi formada yaranır və xarakteristikası Jon parametri ilə xarakterizə olunur. Jon yaxınlaşmasında ən sadə təklif şüalanmadan sonra kristalların səthində yaranan qabarmaların ölçüsü Jon parametrinin ədədi qiymətinə bərabər olsun. Müxtəlif elmi ədəbiyyatlarda şüalandırma metod və texnikasından asılı olaraq fərqli bucaqlarda şüalandırılmış səthlərin quruluşu qəfəs parametrinin orientasiyası ilə paralel dəyişir. İon şüalanması zamanı səthdə qabarmaların yaranmasında payı olan təsirlərdən biri mikrostrukturda baş verən dislokasiya ilə bağlıdır. Bərk cisimlərdə şüalanmanın təsir altında dislokasiyanın yaranmasının iki əsas səbəbi vardır ki, bu da implus rejimində və kəsilməz rejimində şüalandırma ilə bağlıdır.

Aparılan tədqiqat nəticələrindən aydın olur ki, implus rejimində şüalanmadan sonra dislokasiya ən böyük qiymətinə malik olur. Müxtəlif enerjilərdə müxtəlif ionlarla implus rejimində şüalandırılmış kristallarda yaranan dislokasiyanın kinetikasi

araşdırılmışdır. Müəyyən olunmuşdur ki, enerjisi 40 keV olan 10^{16} ion/sm² və 10^{18} ion/sm² intensivlikli C ionu ilə şüalanmadan sonra dislokasiya uyğun olaraq 5.0×10^{19} sm⁻² və 6.0×10^{19} sm⁻² qiymətlərini, intensivliyi 6.8 keV enerjili Fe ionu üçün alır.

Növbəti eksperimentlərdə bor nitrid BN/EP nümunələri molibden əsaslı şüşə qablara yerləşdirilmiş, şüşələr yüksək vakuum mühitində bağlanmış, səthdən zəif absorbsiya olunmuş oksigenin təmizlənməsi üçün 15 dəqiqə maye azotlu mühitdə işlənmişdir. Nümunələr otaq temperaturunda 65 Qr/dəq udulma dozasında ⁶⁰Co qamma şüalarla şüalandırılmışdır.



Şəkil 1.4.1. Qamma şüalarının təsiri altında BN/EP nümunələrin temperatur kinetikasi.

Udulan dozanın qiyməti elektron paramaqnit rezonans standartı ilə yoxlanılmış və müəyyən olunmuşdur ki, epoksial təbəqə şüalanmaya qarşı dayanıqlı xassə formalaşdırır. Bor nitridin şüalanmaya dayanıqlığı və neytrondan qoruyucu qabiliyyəti sayəsində radiasiyaya davamlı materialların hazırlanmasına təklif edilmişdir. Radiasiyaya dayanıqlı h-BN/EP kompozitləri məhlul qarışığı ilə hazırlığı, istilik sel

funksiyası vasitəsi ilə istilik xüsusiyyətləri araşdırılmışdır (şəkil 1.4.1). Təcrübənin nəticələri göstərdi ki, bor nitridə əlavə olunmuş qatran qatı nümunənin mexaniki xüsusiyyətini və şüşələşmə keçid temperaturunu yüksəldir. Kiçik konsentrasiyalı BN-nin əlavə olunması ilə EP-nin radiasiya dayanıqlılığını müqaviməti artırır. Bor nitridin 0.05 % kütlə hissəsində formalaşan kompozitlərdə, nisbi mexaniki gücü 50% azaltmaq üçün lazım olan udulma dozunu 300 kQr qədər artırmaq tələb olunur. Radiasiya müqavimətinin artması daxili mexanizmin XPS və EPR tədqiqatları tərəfindən araşdırılan təcrübələrdə oksigen təsiri ilə əlaqələndirilir. Bor atomlarının neytron udma qabiliyyətindən faydalanaraq, EP qatranına 0.55% h-BN əlavə edilməsi qatranın neytron keçiriciliyini 5.6 % azalda bilmişdir. Bu araşdırmalar göstərir ki, BN ilə qarışdırılmış qatranın radiasiyaya davamlı xüsusiyyətini və neytron ekranlama xassəsini artırır [19]. Sadalanan bütün elmi tədqiqat işlərindən aydın olur ki, sürətli ağır ionların təsiri altında tədqiqat kristalları üzərində termofiziki xassələrin araşdırılmasına ehtiyac yaranmışdır.

II FƏSİL

TƏDQIQAT KRİSTALLARI, STRUKTUR ANALİZLƏR, ŞÜALANMA VƏ TERMOFİZİKİ XASSƏLƏRİN ÖYRƏNİLMƏ METODİKALARI

II fəsilin birinci bəndində kristalların fiziki, kimyəvi xassələri, toz şəkilində həqiqi sıxlığı, təmizlik dərəcələri, xüsusi səthin sahəsi, atomların kütlə nisbəti, ərimə və buxarlanma temperaturuları haqqında geniş məlumat verilmişdir. 2.2, 2.3, 2.4 və 2.5 ilə qeyd olunmuş başlıqlarda kristalların quruluş analizi, fəza qruplarının təyini, kristal qəfəsdə atomlararası məsafənin dəyişməsi və qəfəs parametrlərinin öyrənilməsi üçün struktur analiz metodikası, səth morfologiyasının tədqiqi üçün SEM metodu, səthdə və həcmdə defektlərin təbiətinin analizi, şüalanmadan sonra səthdə formalaşan qabarmaların və amorflaşma mexanizminin təbiətinin öyrənilməsi məqsədi ilə Raman spektroskopik və atom qüvvət mikroskopunun (AFM) analiz metodikası haqqında məlumat verilmişdir. Şüalanmanın təsiri altında ağır ionların kristalların səthində nüfuz etmə dərinliyi, baş verən fiziki və kimyəvi proseslərin nəzəri əsasları SRIM kod analizi şərh edilmişdir. ^{60}Co qamma izotop mənbəyi, 167 MeV enerjili sürətli $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ağır ionları, intensivliyi 10^{12} - 10^{15} n/sm²×san arasında dəyişən neytron seli və 2.5 MeV enerjili elektron seli ilə şüalandırılma metodikası, şüalanma mənbəyi haqqında geniş məlumat verilmişdir. Termofiziki xassələrin öyrənilməsi üçün istifadə olunan analiz metodikaları, cihazların texniki parametrləri verilmişdir.

2.1 Tədqiqat kristalları haqqında ümumi məlumat

Tədqiqatda toz halında sıxlığı 0.3-1.80 q/sm³, təmizlik dərəcəsi 99.9 % (Cədvəl 2.1.1), hissəciyin ölçüsü 1-3 mkm, xüsusi səthin sahəsi (SSA) 2-28 m²/q, kristalda kütlə nisbəti B:77.5 və C:22.4, ərimə temperaturu 2350 °C, buxarlanma temperaturu 3500 °C və kimyəvi sərtliyi ≥ 400 Mpa olan bor-karbid kristalı götürülmüşdür (Sigma-Aldrich Products, Germany).

Cədvəl 2.1.1. B₄C kristalının tərkibində kimyəvi elementlərin faizlə paylanması

B	C	N	O	Ca	Al	Fe	Mo	Na	Mg
4k	3k	<0.001k	<0.004	<0.002	<0.001	<0.001	<0.001	<0.001	<0.001
%	%	%	k %	k %	k %	k %	k %	k %	k %

İkinci tədqiqat kristalı toz halında sıxlığı 2.43 q/sm³, təmizlik dərəcəsi 99.9 % (Cədvəl 2.1.2), hissəciyin ölçüsü 40 mkm, xüsusi səthin sahəsi (SSA) 60-150 m²/q, kristalda kütlə nisbəti B:69.7 və Si:30.2, ərimə temperaturu 1870 °C, buxarlanma temperaturu 3300 °C və kimyəvi sərtliyi ≥320 Mpa olan bor-silikat kristalı götürülmüşdür (US Research Nanomaterials, Inc., TX, USA).

Cədvəl 2.1.2. B₆Si kristalında kimyəvi elementlərin ppm paylanması

B	Si	Co	Fe	Mo	O	Digər elementlər
66.9 %	30.2 %	15 ppm	200 ppm	50 ppm	50 ppm	200 ppm

Üçüncü tədqiqat kristalı toz halında sıxlığı 2.29 q/sm³, təmizlik dərəcəsi 99.8 % (Cədvəl 2.1.3), hissəciyin ölçüsü 3-8 mkm, xüsusi səthin sahəsi (SSA) 3.5-6 m²/q, kristalda kütlə nisbəti B:50.7 və N:50.3, ərimə temperaturu 2973 °C, buxarlanma temperaturu 3600 °C və kimyəvi sərtliyi ≥300 Mpa olan bor-nitrid kristalı götürülmüşdür (Sigma-Aldrich Products, Germany).

Cədvəl 2.1.3. BN kristalında kimyəvi birləşmələrin faizlə paylanması

BN	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	B ₂ O ₃
99.8 %	<0.03 %	<0.002 %	<0.04 %	<0.1 %

Sonuncu tədqiqat kristalın toz halında sıxlığı 2.46 q/sm³, təmizlik dərəcəsi 99.9995 % (Cədvəl 2.1.4.), hissəciyin ölçüsü 75 mkm, xüsusi səthin sahəsi (SSA) 36 m²/g, kristalda kütlə nisbəti B:69.7 və O:30.2, ərimə temperaturu 450 °C, buxarlanma

temperaturu 1850 °C olan bor-oksüd (B_2O_3) (tetrahedral modification) kristalı gütürülmüşdür (Sigma-Aldrich Products, Germany).

Cədvəl 2.1.4. B_2O_3 kristalında kimyəvi birləşmələrin faizlə paylanması

B_2O_3	Cl	PO_4	SiO_2	SO_4	Ag
99.9995 %	≤5 ppm	≤5 ppm	≤1 ppm	≤5 ppm	≤0.020 ppm

2.2 Kristallarda struktur analizləri üçün istifadə olunan metodlar

Müxtəlif kristal və amorf halında olan nümunələrin faza tərkibinin təyin olunması üçün istifadə olunan RSA (Rentgen Struktur Analiz) unikal tədqiqat metodlarından biridir [128,199, 211]. Hər bir faza kristallik quruluşa malikdir və müstəvilər arası məsafələr (d/n) müəyyən diskret dəyərlər vasitəsi ilə xarakterizə olunur. Tədqiq edilən kristallarda müstəvilər arası məsafələri bilmək onun kristal qəfəsini xarakterizə etməyə və maddənin faza quruluşunu təyin etməyə imkan verir [303]. Struktur analiz təcrübələri XRD (X-Ray Diffraction D8 Advance) cihazında, enerjisi 100 V ÷ 30 keV intervalında dəyişən elektronlarla yerinə yetirilmişdir (şəkil 2.2.1).



Şəkil 2.2.1. Müstəvilər arası məsafə, qəfəs parametrləri, fəza qrupu və Miller əmsallarının təyin etmək üçün X-Ray (Diffraction D8 Advance) cihazı.

Kristal quruluşa malik maddələrin faza tərkibinin, onların müstəvilər arası məsafələrinin müəyyən edilməsi ən geniş yayılmış və nisbətən asan həll olunan məsələlərindən hesab olunmaqdadır və bu kimi problemlərdə kristal qəfəsin növündən

asılı olmayaraq istənilən metal, binar və çox tərkibli maddələr üçün həll oluna bilər. Həmçinin müxtəlif fazalar üçün müstəvilər arası məsafələri və atomların koordinatları, vakansiyalar haqqında məlumatlar xüsusi verilən məlumat bazalarından tapıla bilər. Tədqiq olunan parametrlər adətən cədvəllərdə d_{hkl}/n dəyərlərin azalan ardıcılığı ilə sıralanır n tam qiymətlərlə (1, 2, 3,...) qəbul olunan sırasıdır. Bundan əlavə, d_{hkl}/n dəyərləri (hkl) indeksləri formasında müstəvilər arası məsafələr kimi qəbul edilə bilər. HKL müstəvinin müvafiq göstəricilərinin əks olunma qaydası ilə sıraların hasilinə bərabər olan müdaxilə indekslər şəklindədir ($H=nh$, $K=nk$ və $L=nl$). Vulf-Breq tənliyinə görə (2.2.1), λ dalğa uzunluğunun verilmiş qiymətində müstəvilər arası məsafənin hər bir qiyməti müəyyən θ bucaq altında kristal nümunədən səpilən rentgen şüalarının difraksiya xəttinə uyğun gəlir .

$$d_{HKL} = d/n = \lambda/2\sin\theta \quad (2.2.1)$$

Rentgen şüalarının kristalda difraksiya xətlərinin mövqeyini (θ bucaqları) təyin etməklə və şüaların dalğa uzunluğunu bilməklə müstəvilər arası məsafənin qiymətini d/n (2.2.1) ifadəsi ilə təyin etmək mümkündür. Tədqiq olunan material üçün d/n qiymətini təyin etməklə müxtəlif birləşmələr üçün məlumat bazası ilə müqayisə olunur və verilmiş materialın hansı faza quruluşunda olduğunu müəyyən etmək mümkündür. Materialın yüksək dəqiqliklə kimyəvi tərkibi məlumdursa faza axtarışı əhəmiyyətli dərəcədə artır və keyfiyyət fazasının təhlili çox asanlaşdırılır. Məhz bu səbəbdən araşdırılan kristalın kimyəvi tərkibinin ilkin tədqiqi dəqiq analitiik metodlarla aparmaq lazımdır. Rentgen analiz metodu ilə maddənin faza analizində mühüm mərhələ olan müstəvilər arası məsafələrin dəqiq müəyyən edilməsidir. Bu problemin həll olunması zamanı bir sıra çətinliklərlərin meydana gəlmə ehtimalı mövcuddur. Analiz müddətində rentgen şüalarından istifadə olunur, ən parlaq xətlər K seriyasına ($K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 2}$ və $K_{\beta 1}$) aiddir, digər xətlər aşağı intensivliyə malikdir və rentgen fonu ilə qarışmış haldadır. Tədqiqat zamanı filtdən istifadə olunmayıbsa o zaman pikləri $K_{\alpha 2}$ və $K_{\beta 1}$ şüalanmasından ayırmaq lazımdır.

$K_{-\alpha}$ və $K_{-\beta}$ şüalarının eyni müstəvidən əks olunması nəticəsində alınan bir cüt xəttin sinus bucaqlarının nisbəti müvafiq dalğa uzunluqlarının $\lambda_{-\alpha}$ və $\lambda_{-\beta}$ nisbətində bərabər olduğundan, ilkin mövqelərin müəyyən edilməsindən sonra Rentgen şüalarının difraksiya nümunəsində difraksiya maksimumları hər bir xəttin $\sin\theta$ -nin qiymətləri tapılır və dalğa uzunluqlarının $\lambda_{-\alpha}/\lambda_{-\beta}$ nisbətində vurulur. Əgər rentgen şüalarının difraksiya nümunəsində əks bucaqları

$$\sin\theta_2 = \sin\theta_1 \frac{\lambda_{\beta}}{\lambda_{\alpha}} \quad (2.2.2)$$

əlaqəsinə tabe olan və birinci xəttin intensivliyi ikincidən zəif olan bir cüt xətt varsa, onda birinci sətir $K_{-\beta}$ şüalarının əks olunması nəticəsində əldə edilir. Bundan əlavə, hesablamalarda $K_{-\alpha}$ şüalanma dubletini nəzərə almaq lazımdır. Kiçik bucaqlarda $K_{-\alpha 1}$ və $K_{-\alpha 2}$ xətləri birləşir, d/n dəyərlərini təyin edərkən λ_{-} ($K_{-\alpha}$) qiymətindən istifadə olunur və aşağıdakı düsturla müəyyən edilir.

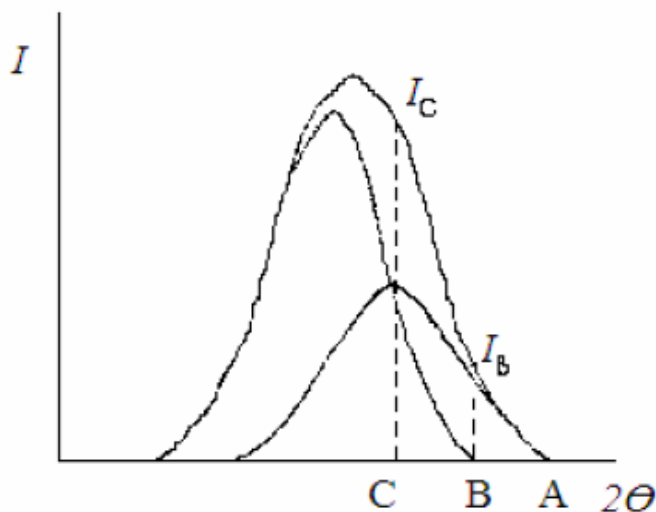
$$\lambda_{K_{\alpha cp}} = \frac{2\lambda_{\alpha 1} + \lambda_{\alpha 2}}{3} \quad (2.2.3)$$

2θ bucağı artdıqca piklər aydın müşahidə olunur və piklərin maksimumu nə qədər aydın müşahidə olunursa əks olunma bucağı da bir o qədər böyük qiymətə malik olur. Bu zaman dubletin piklərin bölünməsi Reçinger üsulu ilə həyata keçirilir. $K_{-\alpha 1}$ və $K_{-\alpha 2}$ xətlərinin eyni olması $K_{-\alpha 1}$ xəttinin inteqral intensivliyinin $K_{-\alpha 2}$ şüalanmasına uyğun olan xəttin intensivliyindən iki dəfə çox olması ehtimalına əsaslanır. “X-ray” piklərinin ümumi genişlənməsi θ bucağının artması ilə artan interblet (δ) məsafəsinin funksiyasıdır.

$$\delta = \frac{2(\lambda_{\alpha 2} - \lambda_{\alpha 1}) \operatorname{tg}\theta}{\lambda_{\alpha 1}} \quad (2.2.4)$$

A nöqtəsində koordinatı ilə hər iki xəttin intensivliyi praktiki olaraq sıfır bərabərdir (Şəkil 2.2.2). A nöqtəsindən δ məsafədə yerləşən B nöqtəsində $K_{-\alpha 1}$ xəttinin intensivliyi sıfıra bərabərdir və bütün intensivlik I_B $K_{-\alpha 2}$ şüalanması ilə bağlıdır. $(2\theta_1 - 2\delta)$ kordinatlı C nöqtəsi üçün intensivlik $I_{K_{\alpha 1}}$ və $I_{K_{\alpha 2}}$ cəmi şəklində olacaq. $I_{K_{\alpha 1}}$ nöqtəsində intensivliyin $I_{K_{\alpha 2}}$ dən iki dəfə böyük olacağını nəzərə alsaq, əldə edirik:

$$I_c(2\theta_1 - 2\delta) = 2I_B(2\theta_1 - \delta) + I_{K\alpha_2}(2\theta_1 - 2\delta) \quad (2.2.5)$$



Şəkil 2.2.2. Dubletin piklərin bölünməsinin sxematik təsviri.

Struktur analiz öncəsi müəyyən mərhələlərin ardıcılıqla yerinə yetirilməsi zərurəti vardır və bu proses bir neçə mərhələdən ibarətdir. Nümunələr hazırlandıqdan sonra adətən əvvəlki emal (oksidləşmə, dekarburizasiya) və ya nümunə səthinin kəsilməsi, üzvi və qeyri-üzvi birləşmələrlə çirklənməsi və hazırlanması zamanı edilən dəyişikliklər (səthin mexaniki deformasiyası) nəticəsində strukturun dəyişməsi və səth təbəqəsini tədqiqi tələb olunur. Mexaniki hamarlamadan sonra kristalın səthi ən azı 0.1-0.2 mm qalınlığında bir təbəqənin çıxarılması ilə kimyəvi və ya elektrolitik aşındırmaya məruz qalır. Aşınma adi metalloqrafik reagentlərlə, məsələn, azot turşusunun 10 % həlli ilə karbon və aşağı ərintili poladlar üçün, nikel ərintiləri və konsentratlaşdırılmış hidrogen peroksidin əlavə edilməsi ilə konsentratlaşdırılmış xlorid turşusu ilə yüksək lehimli poladlar üçün həyata keçirilə bilər. Elektrolitik cilalama və ya “elektropolishing” rejimində həyata keçirilir. Ayrı-ayrı struktur komponentlərinin üstünlüklə aşındırılmasının qarşısını almaq üçün təbəqələrin vahid qalınlığında çıxarılması və ya səthin struktur komponentləri ilə zənginləşdirilməsinə səbəb olan rejim aradan qaldırılmalıdır.

Bütün qeyd olunan fikir və riyazi ifadələri cəmləşdirib qısa şəkildə eksperimental ardıcılığı aşağıdakı şəkildə yazmaq olar.

1. Nümunələrin diffraktoqramının spektrlərini almaq;

2. Tələb olunduğu halda xətləri $K_{-\alpha}$ və $K_{-\beta}$ dubletlərini və yaxud emissiyalarından ayırmaq;
3. “X-ray” difraktometr proqramından istifadə edərək $K_{-\alpha}$ dubletini analiz etmək;
4. $K_{-\alpha 1}$ -ə uyğun gələn zirvələr üçün 2θ əks bucaqlarının qiymətinin təyin etmək;
5. Vulf-Breq tənliyindən istifadə edərək müstəvilər arası məsafələrin (d_{hkl}) hesablanması;
6. Verilənlər bazasından istifadə edərək, əldə edilmiş d_{hkl} qiymətlərinə və inteqrasiya edilmiş I_{hkl} intensivliyinin müvafiq dəyərləri ilə test maddəsinin müəyyən edilməsi.

Raman spektroskopik tədqiqatlar mikro və nano ölçülü kristalların səth morfologiyasının öyrənilməsi üçün yaradılmış nanotexnoloji metodlardan biri hesab edilir (Şəkil 2.2.3) [73, 88, 198]. Aşağıda qeyd olunan əsas xüsusiyyətləri ilə xarakterizə olunur.



Şəkil 2.2.3. Amorflaşma kinetikasi, kimyəvi rabitələrin təbiəti və kristallik ölçünün təyin etmək üçün Raman spektroskopik (NT-MDT, NTEGRA Spectra) cihazı.

- Tədqiqat kristallarının üç ölçülü Raman və lüminessent görüntüləri;
- Lazer mikroskopundan istifadə edərək üç ölçülü topoqrafiya;
- Eyni anda üç ölçülü səth görüntüsü və kimyəvi analiz;
- Mürəkkəb quruluşa malik obyektlərin təhlili;
- Materiallarda defektlərin və kristal daxili təzyiqin aşkarlanması;

- Əczaçılıq sahəsində maddələrin tərkibinin təyin edilməsi;
- Bioloji obyektlərin araşdırılması;
- Nanotexnikda tədqiqatlar;
- Yüksək həssaslıqlı tək molekulların aşkarlanması;

Sistemin modul quruluşu, lazer və mikroskoplar üçün geniş seçim imkanı, üç lazerlə işləmək üçün avtomatik üç mövqeyli qurğuların istifadəsi, maksimum səmərəliliyi təmin etmək üçün mexaniki-optik qurğuların avtomatik tənzimlənməsi ilə üç lazerin dəyişdirilməsi və ya işləməsi, lazer fokuslu mikroskopla eyni vaxtda şəkillərin qurulması ilə yüksək dəqiqliklə materialın səth bölgüsünün tez təyin edilməsi kimi üstünlüklər sistemi çevik edir və müxtəlif məsələləri həll etməyə yardımçı olur. Raman spektrometri aşağıdakı ətraf mühit tələblərinə uyğun olaraq işləmək üçün hazırlanmışdır. 18-22 °C temperatur intervalı, nisbi rütubət 20 °C -də 80 % (maksimum) və atmosfer təzyiqi 96 kPa ilə 104 kPa və vibrasiyaya davamlı optik sistem üzərində yerləşir.

Optik mexaniki vahidlər (OMU) mexanizmlərini idarə etmək üçün optika və mexanika sektorlarından, enerji təchizatından və idarəetmə blokundan ibarət bir sistemdir. OMU -da mikroskop bağlamaq, lazer şüalanması, spektrometr və ya digər avadanlıqlar bağlamaq üçün çıxışlar verilir. Müxtəlif məqsədləri üçün (100x, 60x, 40x) Either Inverted və normal mikroskoplardan istifadə olunur ki, həmin lazerlər fasiləsiz və impuls rejimində çalışır. 244, 390, 442, 473, 488, 514, 532, 543, 633, 783 və 1064 nm yayılan UV (ultra bənövşəyi) –İQ (infraqırmızı) lazerlərindən istifadə edilə bilər.

“NANOFINDER 30” konfigurasiyası bir, iki və ya üç lazerin istifadəsinə icazə verir. Bu, müxtəlif vəzifələrdə və yaxud pozisiyalarda (Scanning system, XY- piezo scanner, XY-galvanic scanner, Z-piezo scanner) təcrübələrin yerinə yetirilməsi üçün uyğun bir sistemin hazırlanmasına imkan verir.

Əsas lazer xəttinə əlavə olaraq, qaz lazerləri digər dalğa uzunluqlarında da işıq yaya bilər. Belə işıq, məsələn, qaz plazmasında lazer olmayan keçidlər nəticəsində yarana bilər. Bu xətlər əsas lazer xəttindən xeyli zəif olsa da, bir spektrə təhrif və ya əlavə səs -küy gətirə biləcəyi üçün Raman spektrində olması arzu olunmazdır. Lazer

şüası bir nümunəyə dəyməzdən əvvəl, lazer şüası, istənməyən işıqdan bir plazma xətti rədd (PLR) filtri ilə süzülür. Filtr açısal tənzimləməni təmin etmək üçün tutucuya quraşdırılmışdır. 488 nm lazer üçün plazma rədd filtrin xüsusiyyətləri aşağıda nümunə olaraq verilmişdir:

Mərkəzi dalğa uzunluğu 488 nm, ölçüsü 16 nm, diametri >6 nm, yarım eni 3-0.6 nm, transmissiya $>73\%$, bloklama $OD > 5$ (UV -dən 900 nm -ə qədər), dalğa ön təhrifi $<L/4$ 488 nm, düzlük $<L/4$ 488 nm, paralellik <30 seçilmişdir. Siqnallar Ag, Au, Cu, Li, Na, K, Rb, Ni, Ti, Co, Al, Pd, Pt, Rh, Cd, Ga, In və həmçinin oksidlər ZnO, Ag₂O₃, TiO₂, NiO, Fe₃O₄ və digər birləşmələrlə AgCl, AgBr, AgI, CdS, GaP yoxlanılmışdır. Titrəmə spektri molekulların quruluşu haqqında çoxlu məlumat ehtiva edir. Rahatlaşmanın titrəmə vaxtı elektron vaxtından daha qısa olduğu üçün doymuş bir molekul tərəfindən vahid vaxtda yayılan Raman fotonlarının sayı floresan fotonların sayından xeyli çoxdur. Bu bir molekulun aşkarlanma müddətini minimuma endirməyə imkan verir. Bundan əlavə, tədqiq olunan molekullar fotodekompozisiyadan əziyyət çəkmir, çünki həyəcan enerjisi molekulyar keçidlərlə rezonansa malik deyil.

2.3 Səth morfoloqiyasının tədqiq metodları

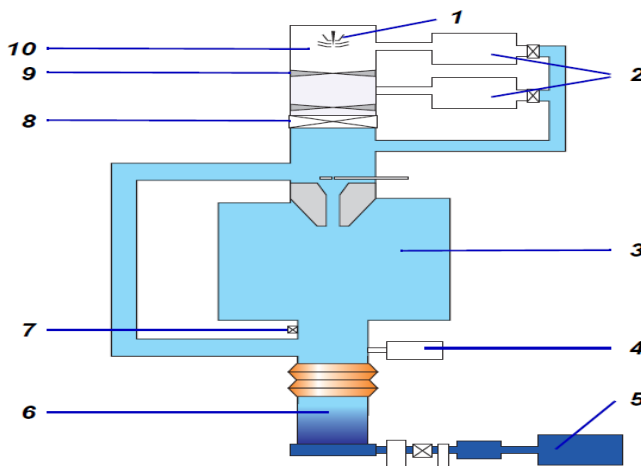
Səth morfoloqiyasının təcrübələri SEM (Scanning Electron Microscope, ZEISS, SIGMA VP) cihazında, enerjisi 100 V ÷ 30 keV intervalında dəyişən elektronlarla yerinə yetirilmişdir (şəkil 2.3.1).



Şəkil 2.3.1. Scanedici Elektron Mikroskopunun sxematik təsviri.

1. Elektron optik sütün; 2. Nümunələrin yerləşdiyi kamera; 3. EDS detektor; 4. Monitorlar; 5. EBSD detektoru; 6. Prosesor; 7. ON/STANDBY/OFF düyməsi; 8. Mühafizə qatı; 9 WDX

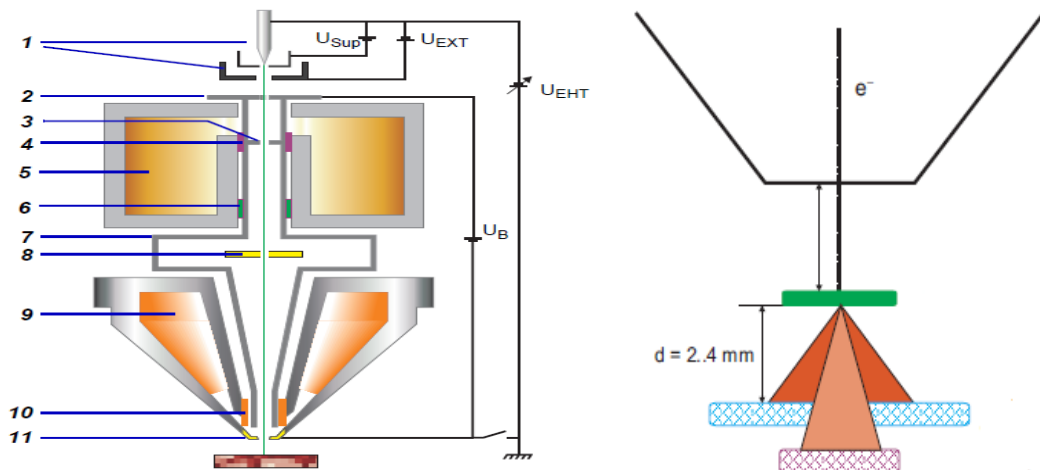
Skanedici Elektron Mikroskopunda elektron mənbə kimi sirkonium halqasına daxil edilmiş volfram elementindən istifadə olunur. Şotki effektinə əsaslanan termo emisiiya prosesi ilə gərginlik üçün işçi rejim $100 \text{ V} \div 30 \text{ keV}$ arasında, şüa mənbəyi ilə kristal arasında işçi məsafə $\leq 10 \text{ mm}$ kimi götürülmüşdür. Kristalların təcrübə üçün hazırlığı xüsusi seçilmiş laboratoriya şəraitində karbon altlıqların üzərinə yerləşdirilir və gümüş yuvacılara yerləşdirilir. Kristallar kameraya yerləşdirildikdən sonra sxematik təsviri şəkil 2.3.2-də verilmiş turbo molekulyar nasoslar vasitəsi 10^{-7} Pa vakuum şəraiti yaradılır. Yüksək vakuumun yaradılmasında məqsəd elektronların sərbəst qaçış yolunu uzatmaq, elastiki və ya qeyri-elastiki toqquşma ehtimalının azaldılmasıdır. Bu zaman sürətləndirilmiş elektronlara verilən enerji birbaşa kristalın atomları ilə qarşılıqlı təsirinə ötürülür və xətanın kiçilməsinə gətirib çıxarır.



Şəkil 2.3.2. Scanedici Elektron Mikroskopda vakuüm sisteminin sxematik təsviri.

1. Tapança ; 2. kristalların yerləşdiyi kamera; 3. Xüsusi qutu; 4. Detektor; 5. Əlavə edilmiş vakuüm nasos; 6. Turbo nasos; 7. Hava klapanı; 8. Kameranın kolonkası; 9 Çox kanalı dəlik; 10 Tapançanın başlığı;

Təcrübi hissə ilə bərabər mikroskopda elektron optikasında baş verən proseslərin nəzəri hissəsi və ya optikası daha böyük maraq kəsb edir. Sxematik olaraq SEM-da proseslərin baş vermə sıralaması şəkil 2.3.3-də ətraflı göstərilmişdir. Termoemisya effektinin təsiri altında volfram elementindən buraxılan elektronlar elektrostatik sahə ilə istiqamətləndirilir. Potensial sahədə sürətlənmiş elektronlar 30 kV enerjiyə kimi sürətləndirilir və kristal ilə qarşılıqlı təsirdə olur.



Şəkil 2.3.3. Scanedici Elektron Mikroskopda elektronların optikasının sxematik təsviri.

1. Şotki sahəsindən emisiyya; 2. Anod; 3. Çox kanallı məsamələr; 4. Qurulaşdırıcı sistem; 5. Linza; 6. Stiqmator; 7. Xətti kanal; 8. Detektor; 9. Elektromaqnit linzalar; 10. Scan kamerası; 11. Qapaq

SE2 detektoru vasitəsi ilə elektronların enerjisi səth relyefinə görə addım-addım artırılaraq, hissəciklərin paylanması və ölçüsü haqqında müfəssəl məlumat əldə etmək olur. Kristallar SE2 detektoru və İD-Point analizatoru ilə 15 keV enerjili elektronlar ilə səth morfologiyasında seçilmiş 45 nöqtədə tərkib analizi tədqiq edilmişdir. SEM ilə aparılan tərkib analizləri yalnız səthi xarakterli olmaqla bircins nümunələr üçün daha effektivlidir. Bütün seçilmiş nöqtələrdəki tərkib analizi zamanı kristal təşkil edən baza elementlərdən əlavə qatışıq elementlərin orta qiyməti müəyyən olunur. Həmçinin bütün eksperimental təcrübələrdə kristalların hissəciklərin ölçüsü “ μm ” intervalında dəyişməsi müəyyən olunmuşdur.

2.4 Qamma şüalanma mənbəyi haqqında

Tədqiqat işi üçün hazırlanmış kristallar qamma kvantları ilə şüalandırılması Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Yüksək Texnologiyalar Parkında yerləşən K-25 nömrəli ^{60}Co izotop mənbəyində yerinə yetirilmişdir [186]. Əvvəlcə kristallar xüsusi vakuum qurğusunda 10^{-3} Pa təzyiq altında hər bir tədqiqat nümunəsindən 5 ədəd kvars ampulalarda bağlanmışdır. Müxtəlif tədqiqatçılar tərəfindən bərk cisimlərdə və

qarışıq heterogen sistemlərdə qamma şüaların otaq və müxtəlif temperaturlarda udulan dozanın nəzəri hesablanması yerinə yetirilmişdir. Riyazi modelləşdirmədən alınan qiymətlər əsasında qamma şüalanmasının udulan dozası üçün hesablama metodologiyası hazırlanmışdır. Tədqiqat işlərindən dəmir oksid və digər kimyəvi birləşmələrin elektron buludunda elektron sıxlığına görə müqayisəli təhlillər aparılmış və təklif olunmuş metodlar ilə hazırlanan dozimetrik ölçü sistemlərində qamma şüalarının bərk cisimdə udulması dozasının qiymətlərinin müqayisəli təhlili verilmişdir.

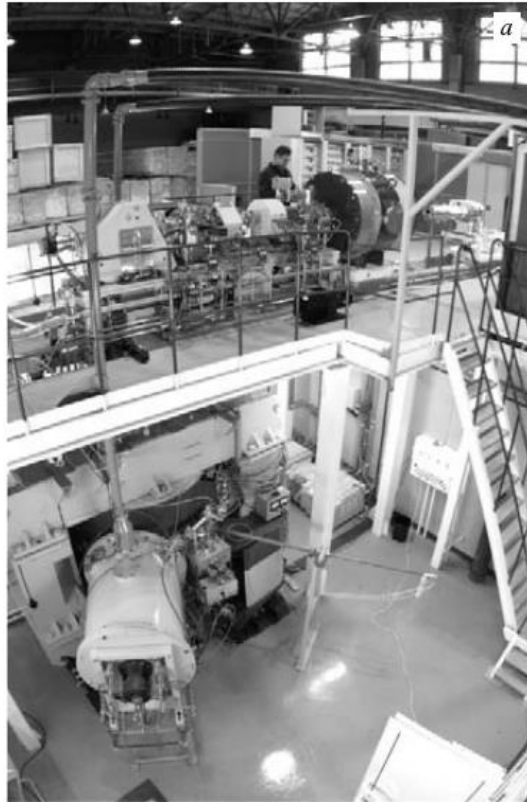
Yerinə yetirilən bütün nəzəri hesablamalardan alınan praktik qiymətlərin müqayisəli müəyyənləşmə dəqiqliyi aparılmış və aydın olmuşdur ki, hər iki metodlarla aparılan hesablamalar bir-birini təkrarlayır. Udulma dozasının daha dəqiq tədqiqi məqsədi ilə qamma şüaların iştirakı ilə bir sıra sistemlərdə kimyəvi dozimetrlərdən istifadə edilmişdir. Göstərilən kimyəvi sistemlər əsasən metan, tsikloheksan və ferrosulfat birləşmələri götürülmüşdür. Tədqiq olunan nümunələrdə udulan dozanın gücü, α -parametri qiyməti və dozimetrik sistemlərin elektron sıxlığının nisbəti müəyyən edilmişdir. Qamma şüalarla yerinə yetirilmiş eksperimental təcrübələrdə α parametrinin qiyməti 0,74÷0,86 intervalında dəyişir. Həmçinin kimyəvi dozimetrlər metodu ilə müəyyən olunan udulan dozanın gücü, udulan şüalanma dozasının gücünün qiyməti müəyyən edilir. Qamma şüalanması tədqiqat olunan birləşmələr üçün 1.17 MeV və 1.33 MeV enerji xəttinə malik ^{60}Co izotopu ilə (doza gücü $D=0.27$ Qr/san) 10, 50, 100, 150, 200 saat müddətində otaq temperaturunda şüalandırılmış (uyğun olara udulan doza ilə 9.7, 48.6, 97.2, 145.8 və 194.4 kQr kimi ifadə etmək mümkündür) və şüalanma bitdikdən dərhal sonra otaq temperaturundan 1000 °C temperatúra qədər kalorimetrik metodu (DSC, DTA, DTG və TG) ilə termofiziki xassələri tədqiqi aparılmışdır. Termofiziki xassələrdən əlavə olaraq qamma şüalanmanın təsiri altında quruluş və optik xassələrdə həmçinin yerinə yetirilmişdir. Optik xassələr əsasında bir sıra nümunələrdə rəng mərkəzlərinin formalaşma mexanizmi verilmişdir.

2.5 Sürətli ağır ionlarla şüalanma metodikası və SRIM kod analizi

167 MeV enerjili sürətli ^{132}Xe ağır ionlarla nümunələrin şüalandırılması Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutunun Nüvə Reaksiyaları laboratoriyasının “Nano texnologiyada ion implantasiya və radiasiya materialşünaslığı” sektorunda mövcud olan İS-100 ion sürətləndiricisində yerinə yetirilmişdir. İS-100 ağır ion sürətləndirici kompleksi elmi və praktiki eksperimental tədqiqatların yerinə yetirilməsi üçün mükəmməl qurğulardan biri hesab etmək olar. Sürətləndiricidə fiksə olunmuş enerjisi $\sim 1.2 \text{ MeV/n } ^{12}\text{C}^{2+}$ başlayaraq $^{40}\text{Ar}^{7+}$ qədər olan ionların sürətləndirilməsi üçün nəzərdə tutulmuşdur. Qurğunun daxilində ion mənbəyi kimi PİG tipli daxili sistemdən istifadə olunmuşdur. PİG sistemi sürətləndirilmiş ionların kütləsini dəqiq təyin etməyə imkan yaradır.

2003-2005-ci illərdə İS-100 sürətləndirici kompleksinin modernizasiyası həyata keçirilmiş və ion mənbəyi yüksək keçiricilikli yeni ESR (elektron sürətləndirici rezonans) mənbə ilə əvəz olunmuşdur. Yeni quraşdırılmış ESR mənbə arqon, kripton, ksenon təsirsiz qazları ilə yanaşı digər ağır ionların yüksək intensivlikli selinin alınması həyata keçirilir. Təcrübələrin böyük hissəsi intensiv selin cərəyan şiddəti $\approx 2 \text{ mA}$ olan $^{86}\text{Kr}^{25+}$ və $^{132}\text{Xe}^{23+}$ ionları ilə yerinə yetirilməkdədir. Bundan əlavə, eksperimental məqsədən asılı olaraq $^{40}\text{Ar}^{7+}$ (cərəyan şiddəti $> 2 \text{ mA}$), $^{56}\text{Fe}^{10+}$ (cərəyan şiddəti $> 0.3 \text{ mA}$), $^{127}\text{I}^{22+}$ (cərəyan şiddəti $> 0.25 \text{ mA}$), $^{132}\text{Xe}^{24+}$ (cərəyan şiddəti $> 0.6 \text{ mA}$) və $^{182}\text{W}^{32+}$ (cərəyan şiddəti $> 2 \text{ mA}$) ionlardan da istifadə olunur.

Sürətləndiricinin mərkəzində bir ədəd spiralvarı inflektor quraşdırılmışdır ki, elektrodların forma vəziyyəti ilkin halda sürətləndirilmiş ionların ən optimal şəkildə müşahidəsini yerinə yetirir. İonların çıxışında elektrostatik deflektor və iki ədəd fokuslanmış maqnit kanalı yerləşdirilmişdir. Sürətləndiricisinin sxematik təsviri şəkil 2.5.1-də göstərilmişdir. Əsasən iki hissəyə bölünmüş kompleksin mühəndis və eksperimenta hissəyə ayrılır. Mühəndis hissəsində sürətləndiricinin cədvəl 2.5.1 də verilmiş texniki parametrlərinə nəzarətdən ibarətdir. Eksperimental hissədə təyin olunmuş intensivliklərin seçilmə prosesi yerinə yetirilir.



Şəkil 2.5.1. İS-100 sürətləndiricisinin ümumi və sxematik təsviri.

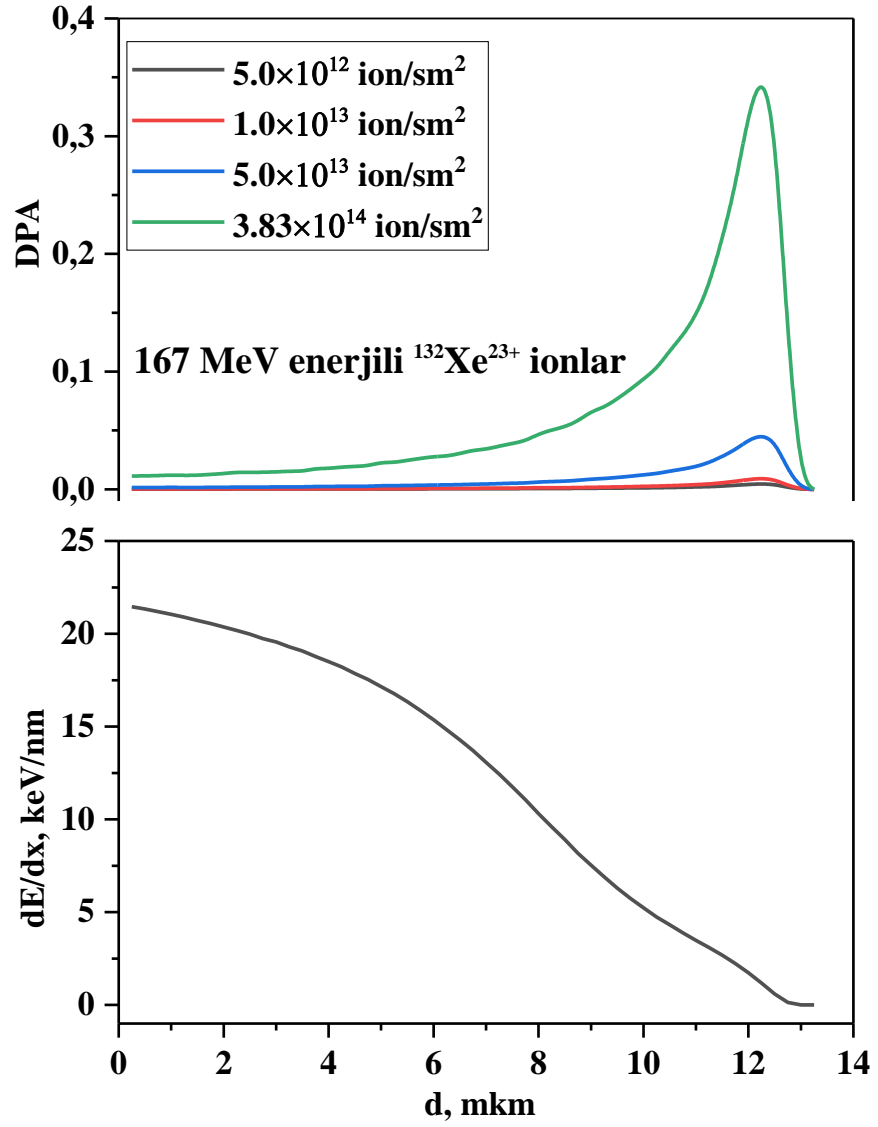
Əlavə xətlərin aradan qaldırılması məqsədi ilə passiv fokuslanmış maqnit sahəsi ağır ion selinin fokuslanmasına imkan yaradır və orta maqnit sahəsində xətləri azaldır. Polimer təbəqələrin şüalandırılması üçün məxsusi izolə olunmuş ötürücü kanal selinin yaradılmışdır. Həmçinin həmin kanalda yaradılmış xüsusi yerdə böyük səth sahəsinə malik materialların ağır ionlarla şüalandırılması həyata keçirilir.

Cədvəl 2.5.1. İS-100 sürətləndiricisi üçün nəzərdə tutulan və eksperimental alınan əsas texniki parametrləri.

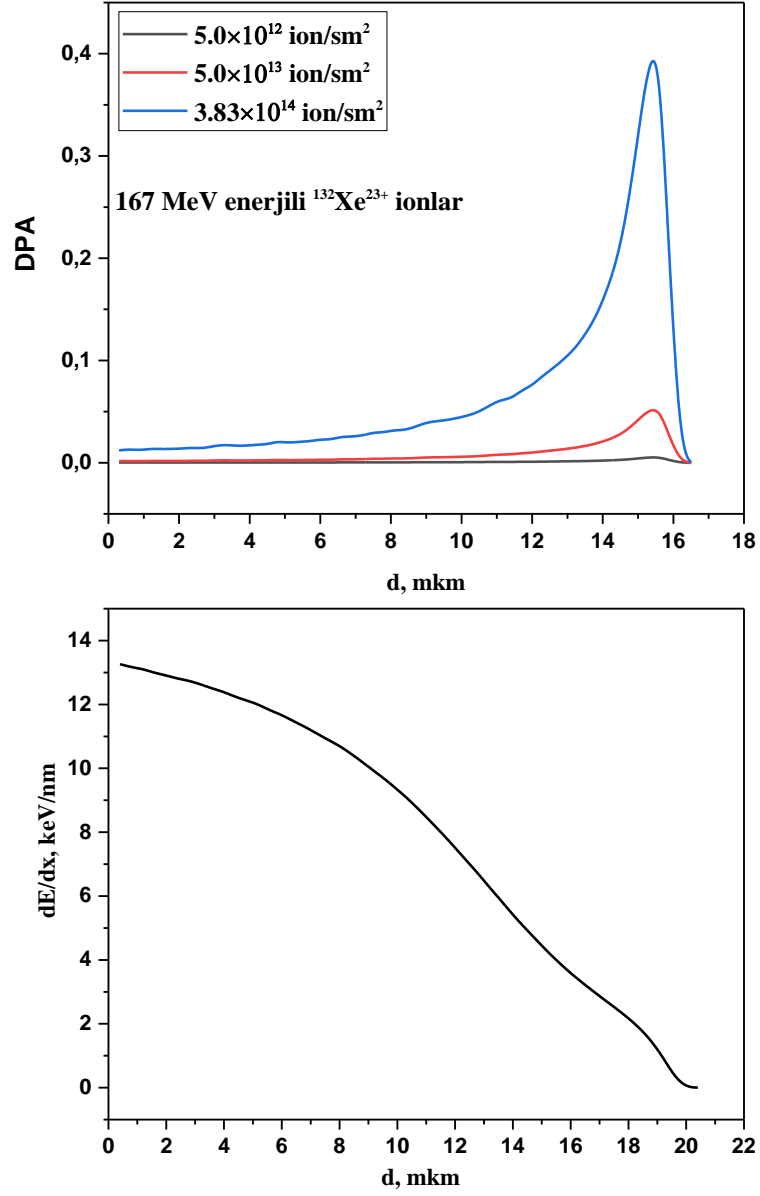
Sürətləndiricinin əsas texniki parametrləri	Sürətləndirici üçün nəzərdə tutulan qiymətlər	Sürətləndiricidə eksperimental alınan qiymətlər
Sürətləndirilən ionlar	Ar, Kr, və Xe	$^{22}\text{N}^{4+}$, $^{40}\text{Ar}^{7+}$, $^{56}\text{Fe}^{10+}$, $^{86}\text{Kr}^{15+}$, $^{127}\text{I}^{22+}$, və $^{132}\text{Xe}^{23+}$, $^{132}\text{Xe}^{24+}$, $^{182}\text{W}^{32+}$, $^{184}\text{W}^{31+}$, $^{184}\text{W}^{32+}$,
Sürətləndirilən ionların diapazonu	$A/Z=5.3-6.0$	$A/Z=5.5-5.95$
İonların enerjisi, MeV/n	1-1.25	0.9-1.1
Orta maqnit sahəsi, Tl	1.88-2.01	1.78-1.93
Yüksək tezlikli generatorun tezliyi, MHz	20.4-20.9	19.8-20.6
İnjesiya enerjisi, kV	12.5	14-15
Xətti injeksiyada vakuum, Torr	5.0×10^{-7}	1.5×10^{-7}
Sürətləndiricidə işçi vakuum, Torr	5.0×10^{-7}	5.0×10^{-8}
Gərginlik, kV	50	45-55
Ayrılmadan sonra injeksiya kanalı boyunca selin ötürülmə effektivliyi	0.8	0.5-0.8
$^{86}\text{Kr}^{15+}$ seli üçün sürətləndirilmiş intensivlik, san^{-1}	10^{12} (2.5 mkA)	8.0×10^{12} (2.0 mkA)
$^{132}\text{Xe}^{23+}$ seli üçün sürətləndirilmiş intensivlik, san^{-1}	2.6×10^{11} (1.0 mkA)	3.0×10^{11} (1.2 mkA)
Cərəyan şiddətinin uzun müddətli sabitliyi	$\pm 10 \%$	$\pm 10-15 \%$

Quraşdırılmış iki ədəd yüksək tezlikli generatorların vasitəsi ilə selin xassəsini dəyişmək, parametrlərin idarə olunması, çıxışda optimal sıxlıqda intensiv selin

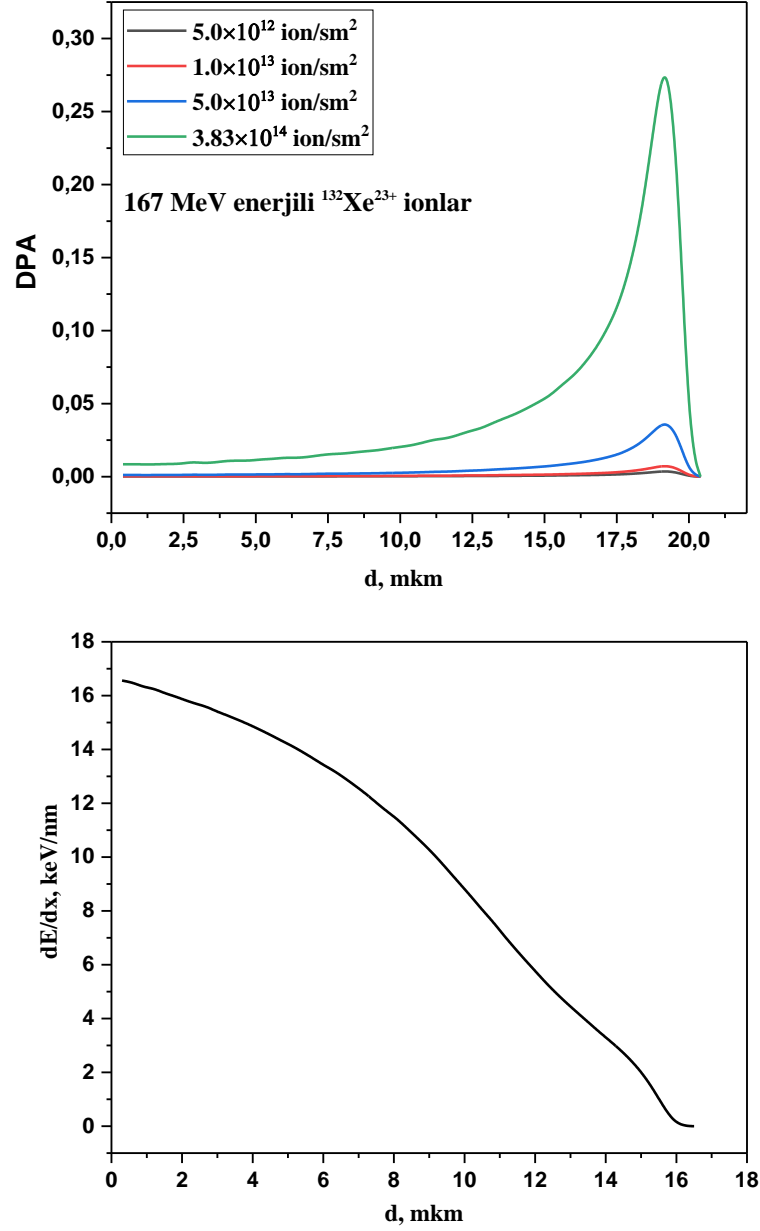
alınması və sabit elektrik cərəyanının uzun müddət saxlanmasını təmin edir. Keçirilmiş testlər və eksperimental analizdən alınan nəticələr sürətləndiricinin diaqnostik qiymətləndirilməsinin aparılmasına, polimerlərin bircinsli şüalandırılmasına, uzun müddətli sabir intensivlikli selin saxlanmasına, yeni parametrlərin daxil edilməsinə, praqnozlaşdırılmış qiymətlərə yaxın rəqəmlərin alınmasına imkan yaradır. ESR-mənbələrinin vasitəsi ilə İS-100 qurğusunda çox yüklü ionların $A/Z=5.3-6.0$ diapazonunda sürətləndirilməsi məqsədi ilə qurulmuşdur. Həmçinin mürəkkəb parametrlərin, ağır elementlərin yüksək yüklü ionlarının alınmasına əsaslanır və maqnet sahəsinin qiymətinin 3 Tl, tezliyinin 18 GHz çatdırılması nəzərdə tutulmuşdur. Məlum parametrlə İS-100 sürətləndiricisində nümunələr diametri $\sim 250 \pm 10$ mkm, qalınlığı 80 mkm həndəsi formasında “Shimadzu Press” press qurğusunda $300 \text{ kP}/\text{sm}^2$ sıxılaraq hazırlanmış, cilalanma vasitəsi ilə səthi şüalandırılma üçün hazırlanmışdır. Hazırlanmış nümunələr (M/s Sartorius, model BP221S, USA) tərəzində ± 0.00001 mq dəqiqliyi ilə kütlələri təyin olunmuşdur. Nümunələr otaq temperaturunda $5.0 \times 10^{12} \text{ ion}/\text{sm}^2$, $1.0 \times 10^{13} \text{ ion}/\text{sm}^2$, $5.0 \times 10^{13} \text{ ion}/\text{sm}^2$ və $3.83 \times 10^{14} \text{ ion}/\text{sm}^2$ intensivlikli 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{23+}$ ionları ilə şüalandırılmışdır. Şüalanma zamanı nümunələrin temperaturu $50 \text{ }^\circ\text{C}$ temperaturu keçmir. Şüalanma ilə paralel nümunələri DPA (Displacements Per Atom) və SRIM kod (Stopping and Range of Ions in Matter) nəzəri analizləri yerinə yetirilmişdir. Şəkil 2.5.2-2.5.5-də B_2O_3 , B_4C , B_6Si və BN nümunələrinin DPA və SRIM kod analiz nəticələri verilmişdir.



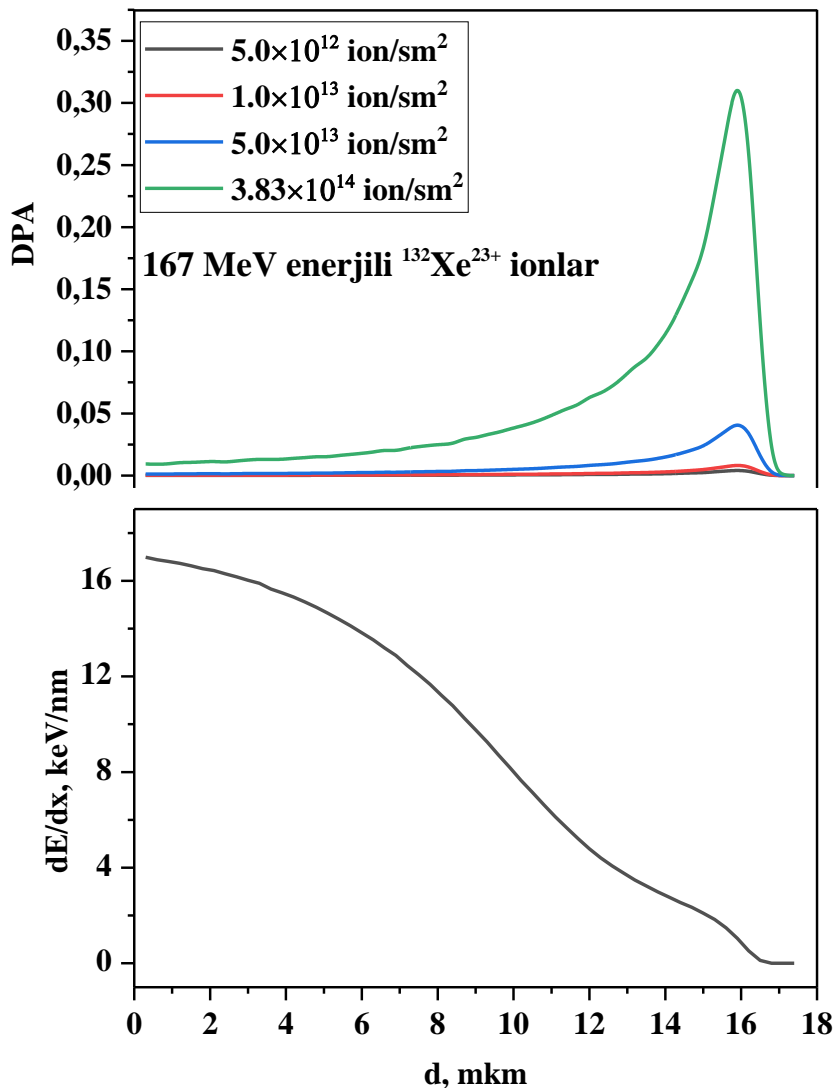
Şəkil 2.5.2. B_2O_3 nümunəsində 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{23+}$ ionların DPA və nüfuz etmə dərinliyi.



Şəkil 2.5.3. B_4C nümunəsində 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{23+}$ ionların DPA və nüfuz etmə dərinliyi.



Şəkil 2.5.4. B_6Si nümunəsində 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{23+}$ ionların DPA və nüfuz etmə dərinliyi.



Şəkil 2.3.5. BN nümunəsində 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{23+}$ ionların DPA və nüfuz etmə dərinliyi.

İonun ortalama enerjisi və müvafiq elektron dayandırma gücü SRIM kodu ilə hesablanmışdır. Şüalanmış materiallarda radiasiya təsirləri, strukturu bombardman edən hissəciklərin növü, intensivliyi və enerji spektrinin paylanması ilə müəyyən edilir. Materiallarda yükündən, kütləsindən və enerjisindən asılı olaraq yerdəyişmiş atomlar meydana çıxır, öz növbəsində bu yerdəyişmiş atomlar yeni yerdəyişmələrə səbəb olur. Radiasiya təsirinin bir atom üzrə yerdəyişmə vahidlərində (DPA) hesablanması aşağıdakı kimi hesablanır:

$$DPA = \Phi \times \frac{N_v}{n} \quad (2.5.1)$$

Burada N_v –strukturda formalaşmış vakansiyaların sayı, Φ – şüalandırılan

hədəf nümunəsinin vahid səthinə düşən ion selinin sıxlığı və n –hədəf nümunəsində atom sıxlığı. DPA, hər bir hədəf atomun orta hesabla bir dəfə kristal strukturundan yerindən ayrıldığı dozanı təmsil edir. İon şüalanmalarında yerdəyişmələrin dərinlik paylanması ümumiyyətlə radiasiya profilləri adlanır. Hər bir təsir profili ion diapazonunun sonuna qədər müəyyən bir dərinlikdə maksimum nümayiş etdirir. Bu maksimum doza piki məhz DPA adlanır. Hər bir ion axını üçün radiasiya pik nöqtəsində, DPA-da dozanın maddədəki ionların dayanması və diapazonundan (SRIM) 2008 kodu istifadə etməklə müəyyən edilə bilər tam kaskad rejimində (sıxlığı bor oksid nümunəsi üçün 2.46 q/sm^3 , bor karbid nümunəsi üçün 1.80 q/sm^3 , bor silikat nümunəsi üçün 2.43 q/sm^3 və bor nitrid nümunəsi üçün 2.29 q/sm^3 yerinə yetirilmişdir. Müxtəlif ion axınlarında otaq temperaturunda $5.0 \times 10^{12} \text{ ion/sm}^2$, $1.0 \times 10^{13} \text{ ion/sm}^2$, $5.0 \times 10^{13} \text{ ion/sm}^2$ və $3.83 \times 10^{14} \text{ ion/sm}^2$ bor oksid, bor karbid, bor silikat və bor nitridi SRIM kod analizi tərəfindən təxmin edilən Xe ionunun paylanması və ionlaşması göstərilir. İonlaşma enerjisi itkiləri bor oksid, bor karbid, bor silikat və bor nitridi müvafiq olaraq 21.5 keV/nm , 13.4 keV/nm , 16.8 keV/nm və 17 keV/nm və olmuşdur. Hər bir nümunədə radiasiya təsirləri fərqli fərqli qiymətlərə malikdir, maddələrin atom sıxlıqları fərqli olduğundan dərinliyi fərqlidir. İmplantasiya edilmiş ionların nüvə enerjisi itkisi onların diapazonunun sonunda, enerji müəyyən bir dəyərdən aşağı düşükdə baş verir. Bundan əvvəl elektron enerji itkisi üstünlük təşkil edir ki, bu da heç bir aşkar təsir göstərmir. Nəticə odur ki, ion enerjisinin artması ilə maksimum ilkin yerdəyişmələrin mövqeyi və müvafiq olaraq maksimum zərərin mövqeyi daha böyük dərinliyə keçir.

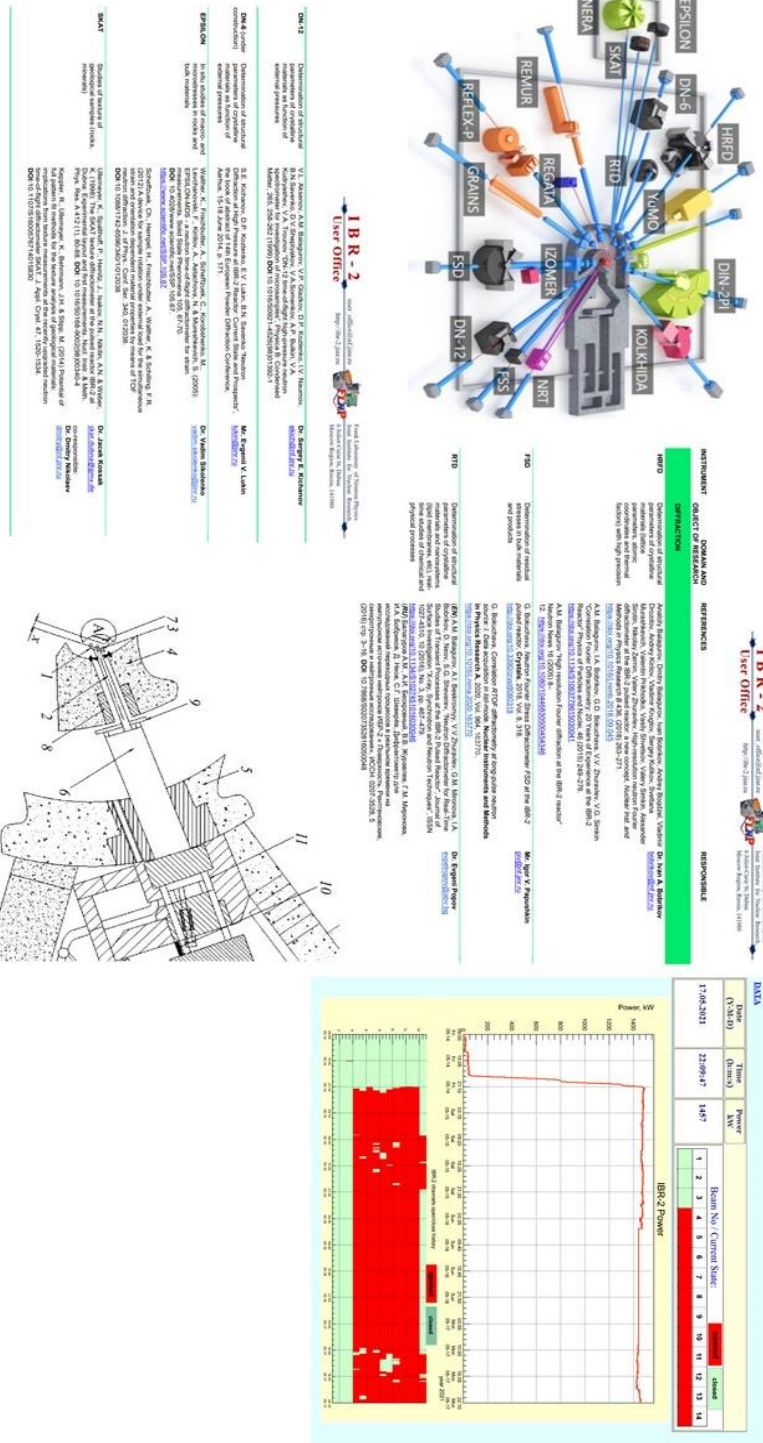
2.6 Nüvə Reaktoru: Neytron mənbəyi və materialların radiasiya dayanıqlığının tədqiqi üçün şüalanma qurğusu

Məlumdur ki, müxtəlif mexanizimlərlə işləyən tədqiqat nüvə reaktorlarında neytron selinin fərqli rejimlərdə alınması həyata keçirilməkdədir. Sadalanan tədqiqat nüvə reaktorlarından olan, implus rejimində işləyən reaktorun iş prinsipi ətraflı təhlil olunmuşdur. Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutunun Frank adına Neytron Fizikası

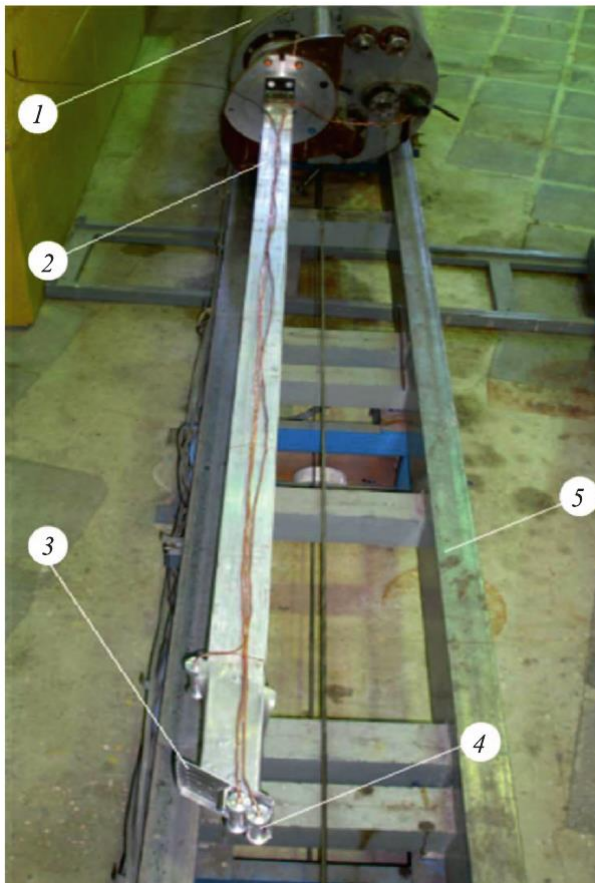
laboratoriyasında yerləşən İBR-2 impulsu nüvə reaktoru müxtəlif elmi və praktiki tədqiqatların həyata keçirilmə məqsədləri üçün istifadə olunan, kompakt aktiv zonaya malik olan hal hazırda dünyada mövcud nadir nüvə reaktorlarından biridir [56, 74]. Eksperimental tədqiqatların yerinə yetirilməsi məqsədi ilə aktiv zonanın ətrafında dairəvi 13 tədqiqat kanalı mövcuddur ki, həmin kanallarda məqsədə uyğun olaraq neytron və qamma şüaları ilə bağlı tədqiqat işlər görülməkdədir. Nüvə reaktorunda birinci amil bioloji təhlükəsizliyin qorunması məqsədi ilə iki qat beton divarlardan istifadə olunur və dairəvi koridorda həmin divarların arxa hissəsində mühəndis və təcrübi avadanlıqlar yerləşdirilmişdir (şəkil 2.6.1).

İntensiv neytron seli ilə nümunələrin şüalandırılması üç nömrəli kanalda yerinə yetirilir və neytron selinin çıxışı aktiv zonaya ən yaxın məsafədə yerləşən en kəsiyi 200×400 mm malik düzbucaqlı kanal böyü istiqamətləndirilmişdir. Üçüncü kanalda bioloji təhlükəsizlik üçün dairəvi koridor boyunca diametri 800 mm xüsusi dəliklər neytron çıxışları üçün yerləşdirilmişdir. Şüalanma müddəti tələb olunan neytron selinin intensivliyindən aslıdır. Seçilmiş neytron selinin sıxlığından asılı olaraq bir neçə saatdan 11 saata qədər dəyişə bilər. Şüalanma zamanı nümunələrin temperaturu $50\text{ }^{\circ}\text{C}$ yuxarı keçmir ki, ümumi havalandırma sistemi ilə temperatur qradientinin dəyişməsinə həmişə nəzarət olunur.

Eksperimentin məqsədindən asılı olaraq nümunələri aşağı temperatturlarda 10 K və yuxarı temperatturlarda 1250 K yerinə yetirilir. Həmçinin şüalanma zamanı udulan dozanın qeyd edilməsi mümkündür və şüalandırma kanalının ən ön hissəsinin daha detallı görünüşü şəkil 2.6.2-də verilmişdir.



Şəkil 2.6.1. İBR-2 nüvə reaktorunda üç nömrəli şüalandırma kanalının sxematik təsviri; 1. Nümunələrin yapışdırılması üçün metal qablar; 2. Hissəciklərin ötürülməsi üçün kanal; 3. Birinci bioloji müdafiə qatı; 4. İkinci bioloji müdafiə qatı; 5. Böyük miqdarda şüalanma hissəsi; 6. Suyun dövr etdiyi kanal; 7. A- aktiv zona; 8. Nümunə ilə aktiv səth arasında məsafə; 9. Məxsusi bioloji müdafiə qatı; 10. Qəza qurğular; 11. Mexaniki qurğular; 12. Hərəkət edici yol.



Şəkil 2.6.2. İBR-2 nüvə reaktorunun eksperimental otaqında yerləşən üç nömrəli kanalda şüalandırma qurğusu.

İBR-2 reaktorunun eksperimental otaqında yerləşən üç nömrəli şüalandırma kanalı uyğun olaraq aşağıdakı 1. Böyük həcmli nümunələrin şüalandırılma hissəsi, 2. Hərəkət edən “dvutavr”, 3. Metallik qutuların bərkidilməsi üçün divar, 4. Şüalandırılma üçün hazırlanmış nümunələr, 5. İdarə etmə yolu detallardan ibarətdir. Şüalandırma şərtlərinə görə nümunələrin həndəsi ölçüləri məxsusən nümunələrin yerləşdirilməsi üçün hazırlanmış 160×160 mm alüminium qutuların ölçülərindən kiçik olmalıdır. Neytron selinin sıxlığı və energetik spektrin dəyişməsi neytron aktivləşmə analizi (NAA) vasitəsi ilə yerinə yetirilir. Üç nömrəli şüalanma kanalı boyunca 300 mm, 500 mm və 3150 mm ara məsafələrdə səthdəki keçikmiş neytronların qeyd edilməsi üçün detektorlar yerləşdirilmişdir. İonlaşdırıcı mühitdə yarımkəçirici detektorların geniş tətbiqi və şüalanmanın təsiri altında effektiv parametrlərin deqredasiyası diqqət yaradan məqamlardan biridir. Digər tərəfdən radiasiya təsirləri yarımkəçirici materialların kristallik qəfəsində qadağan olunmuş

energetik zonada elektrik aktiv səviyyələr (dərin mərkəz) yaradır ki, həmin mərkəzlər daşınan yüklərin termogenerasiyasından və rekombinasiyasından ibarətdir. Dərin mərkəzlərdə daşınan yüklərin detektorun həcmindən cərəyan şiddətinin artması ilə yaşama müddəti azalır və toplanmış yüklərin effektivliyi (siqnalın amplitudu) azalır. Si əsaslı detektorlar üçün vacib effektlərin şüalanma zamanı detektorların həcmində xüsusi elektirik müqavimətinin dəyişməsindən ibarətdir.

Detektorların texniki parametrləri $E < 0.1$ MeV və $E > 1$ MeV enerjili neytron selinin differensial energetik sıxlığı təyin etməyə imkan verir. Eksperimental nəticələrin analizi göstərir ki, neytron selinin differensial energetik sıxlığı $E > 1$ MeV enerji oblastında (2.6.1) tənliyi ilə aydın şəkildə yazmaq mümkündür.

$$\Phi(E) = \left(C_1 e^{-0.693E} + C_2 \frac{e^{-\alpha E}}{E} \right) \cdot 10^{12} \quad (2.6.1)$$

Burada $\alpha=1$, C_i əmsallara görə dəyişir. C_1 və C_2 əmsallarının qiymətlərinin dəyişməsi cədvəl 2.6.1-də verilmişdir. C_1 və C_2 əmsalları üçün xətanın qiyməti 8 %-i keçmir. Bütün qiymətlər yalnız nümunə ilə reaktor moderatoru arasındakı məsafənin qiymətindən asılıdır.

Cədvəl 2.6.1. Moderatoran nümunəyə qədər olan müxtəlif məsafələrdə C_1 və C_2 əmsallarının qiymətləri.

x, m	C_1	C_2
0.3	0.470	0.395
0.5	0.216	0.189
0.7	0.085	0.072

Rezonans oblastda differensial energetik sıxlığı $E < 0.1$ MeV olan neytron seli üçün sel sıxlığını (2) tənliyi şəkilində yazmaq mümkündür.

$$\Phi(E) = C_x E^{-\beta_x} \quad (2.6.2)$$

Burada $\beta_x=0.88$, $C_x \approx C_i$ əmsallarının qiymətləri bir-birinə yaxındır və əmsalları üçün xətanın qiyməti 2 %-i keçmir. Praktiki hesablamalar üçün İBR-2 nüvə reaktorunda üç nömrəli şüalandırma kanalında 0.5 eV-dən 14 MeV geniş enerji intervalında neytron selinin differensial energetik sıxlığını (2.6.3) tənliyi ilə ümumi şəkildə yazmaq mümkündür.

$$\Phi(E) = \left(C_1 e^{-0.693E} + C_2 \frac{e^{-0.97E}}{E^{0.88}} \right) \cdot 10^{12} \quad (2.6.3)$$

(2.6.3) tənliyinin sağ hissəsindəki ifadə enerjisi olan $E > 1$ MeV sürətli neytron selinin funksiyasını, sol tərəf isə rezonans neytron selinin funksiyasını xarakterizə edir. C_i əmsallarının qiyməti cədvəl 2.6.1-də verilmiş qiymətləri moderatorun nümunəyə qədər olan müxtəlif məsafələrin dəyişməsinə görə saxlayır. İBR-2 nüvə reaktorunda şüalanma zamanı udulan dozanın və neytronun intensivliyinin üç nömrəli üfüqü şüalandırma kanalında neytron selinin differensial energetik sıxlığı haqqında yuxarıda verilmiş qiymətləri bir sıra parametrlərin, şüalanma müddətinin davam etməsindən və yaxud gözləmə müddətindən asılıdır. Şüalanma qurğusunda 1 MeV enerjiddən böyük maksimum neytronun intensivliyi 40 mm məsafədə neytron selinin sıxlığı 10^{18} n/sm²×san, 0.3 m məsafədə isə neytron selinin sıxlığı 4.0×10^{17} n/sm²×san bərabərdir. Qamma şüalanması hesabına maksimum udulan doza 40 mm məsafədə 100 MQr (10^8 J/kq), uyğun olaraq 0.3 m məsafədə 40 MQr ekvivalentdir. Tədqiqatımızın məqsədinə uyğun olaraq toz şəklində x kütləli nümunələr alüminium qablara yerləşdirilmiş. Hazırlanmış nümunələr otaq temperaturunda 15 gün müddətində intensivlikli neytron seli ilə şüalandırılmışdır. Şüalanma bitdikdən iki həftə sonra nümunələrin aktivləşmə analizi yerinə yetirilmişdir. Təbii radiasiya fonuna malik olduğuna görə nümunələr üzərində müxtəlif eksperimental tədqiqatlar icra olunmuşdur.

2.7 Xətti elektron sürətləndiricidə şüalandırma metodikası

Bərk cisimlər fizikası və radiasiya materialşünaslığında müxtəlif növ radiasiya çeşidlənməsi ilə müxtəlif eksperimental tədqiqatlar yerinə yetirilir ki, həmin radiasiya növlərindən biri xətti elektron şüalandırma metodunu qeyd etmək mümkündür. Ümumi yanaşmada xətti sürətləndirici sürətləndirilmiş yüklü hissəciklərin düzxətli

trayektoriya üzrə hərəkətidir. Xətti sürətləndiriciləri iki kateqoriyaya bölmək mümkündür ki, onları xətti xarakterli sürətləndirici və məxsusi xətti sürətləndirici kimi adlandırmaq olar. Eksperimental tədqiqatlarda daha çox elektrostatik generator (Van de Graafa) əsaslı sürətləndiricidən istifadə olunur. Xətti elektron sürətləndiricidə aşağıdakı əsas məsələləri həll etmək mümkündür:

- Radiasiya materialşünaslığının əsas prioritet problemlərinin həlli;
- Nano materiallarda və nanoörtlüklərdə yeni effektlərin öyrənilməsi;
- Optik materialların tədqiqi;
- Yarımkəçirici detektor birləşmələrin öyrənilməsi;
- Mineral xammalların öyrənilməsi;
- Tibbi məhsulların tədqiqi;
- Dərman preparatları üçün xammal məhsullarının öyrənilməsi;
- Bio məhsulların öyrənilməsi

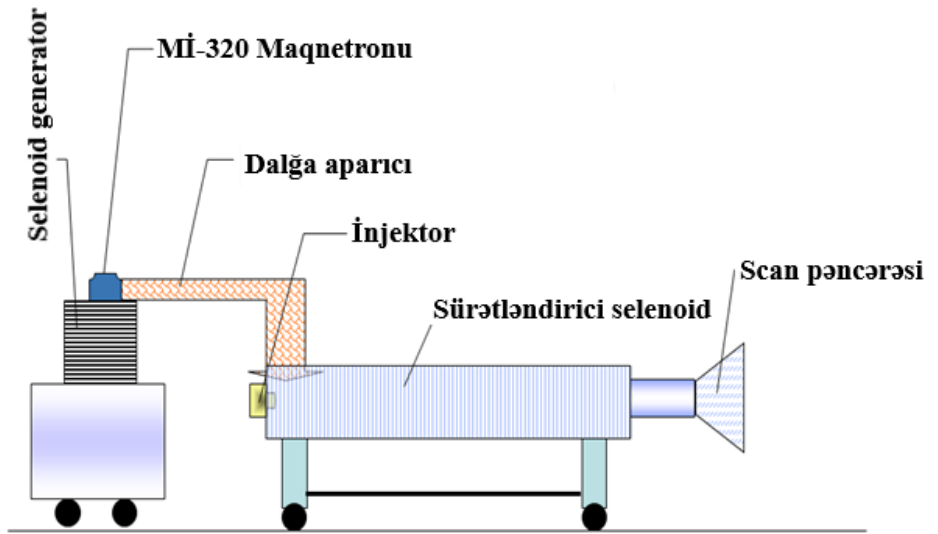
Yuxarıda qeyd olunan bəndlərdən aydın olur ki, elektron şüalanmanın təməl prinsipləri radiasiya fizikasında müxtəlif məsələlərinin həllində istifadə olunur. Tədqiqat işində seçilmiş nümunələrin şüalandırılması Özbəkistan Respublikasının Elmlər Akademiyasının Nüvə Fizikası İnstitutunda yerləşən “Elektronika Y-003” xətti elektron sürətləndiricidə yerinə yetirilmişdir. Şəkil 2.7.1-də “Elektronika Y-003” xətti sürətləndiricinin sxematik təsviri verilmişdir.



Şəkil 2.7.1. “Elektronika Y-003” elektron sürətləndiricinin idarə etmə otağı.



Şəkil 2.7.2. “Elektronika Y-003” elektron sürətləndiricinin eksperimental zalı.



Şəkil 2.7.3 “Elektronika Y-003” xətti sürətləndiricinin sxematik təsviri.

Cədvəl 2.7.1. “Elektronika Y-003” xətti sürətləndiricinin əsas texniki parametrləri.

1	Requlyar enerji diapazonu, MeV	4-8
2	İmpuls cərəyanının müddəti, saniyə	$(1-4) \cdot 10^{-6}$
3	1-4 mikrosaniyə müddətində impuls cərəyanı, A	0-1
4	İmpuls cərəyanının müşahidə olunan tezliyi, san^{-1}	300, 200, 100, 50, 10, 1
5	Elektron selinin maksimum gücü, kVt	5
6	Elektron selinin diametri, mm	5-10
7	Yoxlama xətlərinin uzunluğu, mm	4000
8	Sürətləndirici üçün istifadə olunan güc, kVt	70
9	Tibbi məhsullar üçün cihazın məhsuldarlığı, m^3/saat	2

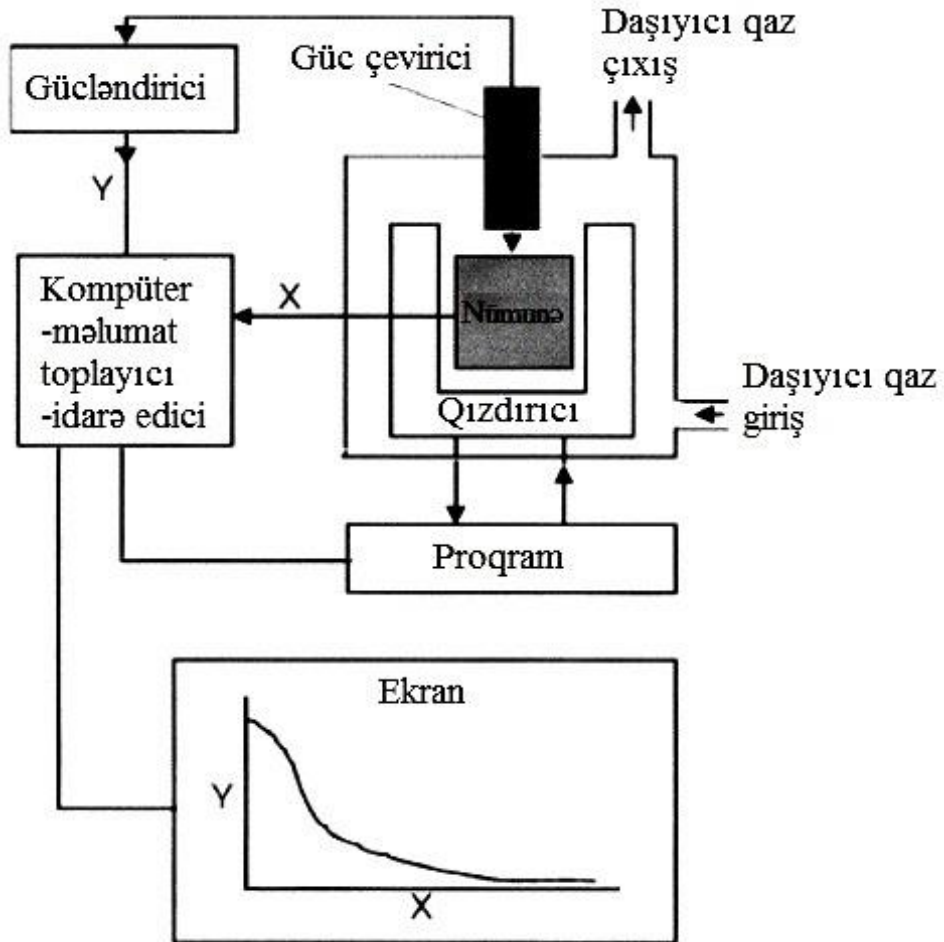
Tədqiqatımızın məqsədinə uyğun olaraq toz şəklində 10 mq kütləli nümunələr alminium qablara yerləşdirilmiş. Hazırlanmış nümunələr otaq temperaturunda 15 gün müddətində intensivlikli neytron seli ilə şüalandırılmışdır. Şüalanma bitdikdə sonra iki həftə nümunələrin aktivləşə analizi yerinə yetirilmişdir. Təbii radiasiya fonuna malik olduğu andan başlayaraq nümunələr üzərində müxtəlif eksperimental tədqiqatlar icra olunmuşdur.

2.8 Termofiziki xassələrin öyrənilmə metodikası

Radiasiya materialşünaslığı və nüvə texnologiyasında geniş miqyasda istifadə olunan, aşağı və yüksək temperaturalarda istilik selinin təyini, termofiziki xassələrin öyrənilməsi, termik işlənmə sürətindən asılı olaraq termik parametrlərin müxtəlif analitik metodlarla öyrənilməsinə geniş yer ayrılmışdır [220, 222, 239, 243]. Bərk cisimlərdə termik işlənmə sürətindən və temperaturdan asılı olaraq baş verən müxtəlif tip (DSC Scanning Kinetics, DSC Isothermal Kinetics və TGA Decomposition Kinetics) proseslərin kinetikasının təhlili bu tip materiallar üçün olduqca yeni analiz metodu kimi qəbul olunmaqdadır [125, 222, 237, 300, 305]. Yüksək təmizlik dərəcəsinə malik birləşmələrdə, geniş temperatur intervalında, $5-20^\circ\text{C}/\text{dəq}$ intervalında termik işlənmə sürət ilə yaranan termik effektlərin, kinetik parametrləri (enerjisi,

entolpiyası, oksidləşmə reaksiya sürəti, istilik tutumu və aktivləşmə enerjisi) təyini qarşıya məqsəd kimi qoyulmuşdur.

Eksperimental təcrübələr “Perkin Elmer” STA 6000 [188], DSC3 STAR^e Systems METTLER TOLEDO [194, 202] və NETSCHE DSC 204 F1 Phoenix [195] cihazında yerinə yetirilmişdir. “Perkin Elmer” STA 6000 cihazında işçi oblast 25-1000 °C, termik işləmə sürəti 5°C/min, PolyScience analizatoru və “digital temperature controller” soyuducu sistemindən ibarətdir. “Pyris Manger” proqram təminatından istifadə olunaraq kinetik parametrlərin təyini, dəyişməsinə və temperaturdan asılı olaraq artma və azalması hesablanmışdır. Yanma məhsullarının sistemdən xaric edilməsi və kondensasiya prosesinin qarşısının alınması məqsədi ilə təsirsiz arqon (Ar) qazından istifadə edilmiş və sistemə verilmə sürəti 20 ml/dəq götürülmüşdür.



Şəkil 2.8.1. Termal parametrlərin ölçülməsi məqsədilə istifadə olunan qurğunun sxematik təsviri.

Daşıyıcı qazlar üçün texniki tələbin ciddi olması istilik selinin həmin inert qazla daşınmasının qarşısını almış olur. Ar təsirsiz qazından əlavə bir sıra eksperimental tədqiqatlarda N qazından geniş istifadə olunur. Lakin təcrübələr bir daha göstərirdi ki, Ar mühitində aparılan təcrübələrin dəqiqliyi daha böyükdür. Yüksək temperatur intervalında sobanın əsas hissəsinə verilən inert qaz qızma prosesində oksidləşmə reaksiyasının qarşısını alır. Qazın daxil olması, istilik selinin daşınması sxematik olaraq şəkil 2.8.1-də göstərilmişdir. Şəkildən görüldüyü kimi, təsirsiz Ar qazının sistemə verilməsi ilə sobanın ətrafını həndəsi olaraq tam əhatə etmiş olur. Standart olaraq 177.78 mq alüminium oksid əsaslı pəndən istifadə olunmuşdur. Termocüt üzərində yerləşdirilmiş elektron qeydedici vasitəsi 10^{-3} q dəqiqliyi ilə nümunənin kütləsi təyin olunur və avtomatik rejimdə qeyd olunur. Proqram təminatı avtomatlaşdırılmış qaydada nümunə ilə dolu pənin kütləsi ilə boş pənin kütlə fərqi təyin edir. Təyin olunmuş kütlə proqram təminatında yadda saxlanılır. Termik spektrlərdə yaranan endo və ekzotermik effektlərin parametrləri “Calculation” menyusundan istifadə olunmaqla hesablanılır. Bundan əlavə digər cihazlar vahid cm^2 62 ədəd yerləşirilmiş müasir temperatur sensorları və nümunənin dəqiq kütləsinin təyin olunması üçün konfigurasiya olunmuşdur. Yüksək dəqiqliklə hazırlanmış elektron hissə bizə dəqiq məlumatların verilməsinə zəmin yaradır. Həmçinin son nəsil kalorimetrik cihazlarda “SaTurnA” sensor texnologiyasına keçid, eyni zaman müddətində çoxlu təcrübələrin aparılmasına və tələb olunan funksiyadan daha ətraflı məlumatların əldə olunmasına gətirib çıxarır. “Perkin Elmer” STA 6000 termik cihazının xarakteristikasına əsasən eyni zamanda çoxlu təcrübə prinsipi ilə təcrübələr aparılır (Şəkil 2.8.2).

Şəkil 2.8.2-də göstərildiyi kimi, 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 ölçülməsinə nəzarət edilir. Nümunə şaquli halda asanlıqla sistemə yerləşdirilə bilər və həmin andan ehtibarən eyni zamanda şaquli yerləşdirilmiş bu sensorla nümunənin vəziyyəti nəzarətdə saxlanıla bilər. Bəzi STA 6000 cihazları eyni

anda 45 – dən çox nümunə ölçməyə imkan verir; 3 – möhkəm alüminium soba korroziyaya qarşıdır 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 sistemin köməyi ilə nümunənin temperaturu tez bir zamanda aşağı salına bilər; 5 – paslanmayan polad divarlardır, hansı ki, ümumi sistemi termal izolyasiya etmişdir və sistemin 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 yaranacaq əlavə qazların sistemdən uzaqlaşdırılmasını təmin edir; 7 – təcrübələr zamanı sistemə ötürülən təsirsiz qaz mühitinin sistemdə saxlanmasını və hərəkətini təmin edir, bu qaz sistemdə mövcud qatışıqların qovulmasına və qızma nəticəsində yaranacaq yeni qaz qatışığının konsentrasiyasını idarə etməyə imkan verir.



Şəkil 2.8.2 “Perkin Elmer” STA 6000 termik cihazının eyni zamanda çoxlu təcrübə prinsipi ilə sxematik təsviri

NETSCHE DSC 204 F1 Phoenix cihazında işçi oblast (-180 °C) - 700°C termik işləmə sürəti 0.001÷200 K/min intervalındadır. 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 mütənasıbdır,

temperaturun artması ilə kinetik enerji artır. Termik halda daha çox molekul böyük kinetik enerjiyə malik olacaq və enerji baryeri yüksək olan molekullar fraksiyası yaranacaqdır. Fraksiya payı yüksək olan molekulların enerjisi aktivləşmə enerjisinə E_a bərabər və yaxud ondan böyükdür. Arrenius tənliyindən istifadə edərək E_a aktivləşmə enerjisi təyin olunur.

$$k = Z \exp\left(\frac{E_A}{RT}\right) \quad (2.8.1)$$

(2.8.1) tənliyində k -kimyəvi reaksiyanın sürəti, Z pre-exponensial faktor və ya Arrenius tənliyinin “A” faktoru adlanır. “A” faktoru temperaturdan empirik olaraq asılıdır və kimyəvi reaksiyanın sürət əmsalıdır. “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/saniyə) dir. E_A -reaksiyanın aktivləşmə enerjisi, R -universal qaz sabiti və T - Kelvin ilə mütləq temperaturdur. Termik prosesdə

$$\ln k_1 = \frac{E_A}{RT_1} + \ln Z \quad (2.8.2)$$

və

$$\ln k_2 = \frac{E_A}{RT_2} + \ln Z \quad (2.8.3)$$

$\ln k_2 - \ln k_1$ fərqini hesablasaq onda

$$\ln k_2 - \ln k_1 = \left(-\frac{E_A}{RT_1} + \ln Z\right) - \left(-\frac{E_A}{RT_2} + \ln Z\right) \quad (2.8.4)$$

$$\ln \frac{k_1}{k_2} = \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right) \left(\frac{E_A}{R}\right) \quad (2.8.5)$$

$$E_A = \ln \frac{k_1}{k_2} \frac{R}{\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)} \quad (2.8.6)$$

həmin prosesin aktivləşmə enerjisi (6) ifadəsi şəklində veriləcəkdir.

Məlumdur ki, termodinamik sistemlərdə kinetik parametrlərin hesablanması üçün ilkin parametrlərin daxil edilməsi verilmiş şərtlərdən biridir. Termik analiz

prosesində tədqiq olunan A maddəsinin kütləsi $t=0$ anında α -ya bərabərdirsə, B maddəsinin miqdarı isə həmin anda sıfırdır. Temperaturun artması ilə $t=t_0$ anında B maddənin miqdarı x olarsa, prosesi sxematik olaraq (2.8.7) tənliyi ikimi ifadə etmək olar.



Burada k kimyəvi reaksiyanın sürəti (oksidləşmə və yaxud parçalanma), ΔH -fiziki keçid üçün lazım olan enerji və yaxud entolpiyadır. $\Delta H > 0$ qiyməti endoeffekti, $\Delta H < 0$ isə ekzoeffektləri xarakterizə edir. Kimyəvi reaksiyanın sürəti üçün

$$v = \frac{dx}{dt} = k(a - x)^n \quad (2.8.8)$$

$$a = \frac{x}{\sigma}, \quad x = \sigma \times a \quad (2.8.9)$$

σ A-maddəsinin B-maddəsinə çevrilmə dərəcəsi, n -reaksiyanın tərtibidir.

$$\frac{d\sigma \times a}{dt} = k(a - a \times \sigma)^n \quad (2.8.10)$$

$$\frac{d\sigma}{dt} = k(1 - \sigma)^n \quad (2.8.11)$$

$$\frac{d\sigma}{dt} = Z \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right)(1 - \sigma)^n \quad (2.8.12)$$

Eyni növ faza keçidində kinetik parametrlərin termik işlənmə sürətindən asılı olaraq xətti azalması, istiliyin bütün molekularda Fermi-Dirak statistikasına görə bərabər paylanmaması eksperimental olaraq təsdiq olunur. Aktivləşmə enerjisinin təyin olunmuş qiymətlərində termik işlənmə sürətindən asılı olaraq azalması prosesin mexanizmini izah edir. Nümunənin oksidləşmə reaksiyasının sürətinin temperaturdan asılılığından müəyyən olunmuşdur ki, kiçik sürətli termik işlənmələrdə proses daha zəif, yüksək sürətlərdə isə sıçrayışlıdır. TG və DTG spektri üçün (2.8.13) tənliyini aşağıdakı şəkildə yazmaq olar.

$$\frac{d\sigma}{dt} = \frac{dm}{dt \times \Delta m} \quad (2.8.13)$$

Temperaturun modullaşdırılmış qiymətinin idarə olunması, spektrin amplitudunun dəyişməsi riyazi şəkildə ifadə oluna bilər.

$$T = T_0 + \beta t + B \sin \omega t \quad (2.8.14)$$

Burada, T – nümunənin cari temperaturu, T_0 – nümunənin ilkin temperaturu, β – temperaturun dəyişmə sürəti, B – modullaşma amplitudası, ω – modullaşmanın bucaq tezliyidir. 2.8.14 tənliyinin zamana görə differensial tənliyi

$$\frac{dT}{dt} = \beta + \omega B \cos \omega t \quad (2.8.15)$$

Bundan əlavə, istilik tutumunun eksperimental olaraq dəqiq müəyyən edilməsi xüsusi istilik tutumunun və entropiyanın daha dəqiq müəyyən edilməsinə gətirib çıxarır. Dəqiq müəyyən edilmiş istilik axını sürəti funksiyası istilik tutumu və termodinamik funksiyaların hesablamalarının düzgünlüyünə təsir göstərir. Bütün bunları nəzərə alsaq, istilik selinin qiyməti ilə bağlı aşağıdakı açıqlamanı əldə edə bilərik.

$$C_p = K_\Phi(T) \cdot \frac{\Phi_S - (\Phi_{emp} + \Phi_{sum})}{\Phi_R - (\Phi_{emp} + \Phi_{sum})} \cdot \frac{m_R}{m_S} \cdot C_R + \frac{m_R - m_S}{m_S} \cdot C_{Cr} \quad (2.8.16)$$

Burada $K_\Phi(T)$ kalibrasiya faktoru- temperatur və istilik axını sürətinin funksiyasından asılıdır; Φ_S - nümunənin istilik selinin qiyməti; Φ_R - referens nümunənin istilik selinin qiyməti; Φ_{emp} boş pənin istilik selinin qiyməti; Φ_{sum} cəm halda həm referens, həm də kütlə olmadan nümunənin istilik selinin dinamikası; m_r -referens nümunənin kütləsi; m_s -nümunənin kütləsi; C_r - referens materialın xüsusi istilik tutumu and C_{Cr} - pənin xüsusi istilik tutumu. Həmçinin şüalanma faktorunu daxil etsək, (2.8.16) ifadəsi (2.8.17) kimi yazılmalıdır. D -ni udma dozası kimi qiymətləndirsək, eksperimental nəticələrlə üst-üstə düşə bilən yeni riyazi ifadə müəyyən edə bilərik.

$$C_p = f(D) \cdot K_\Phi(T) \cdot \frac{\Phi_S - (\Phi_{emp} + \Phi_{sum})}{\Phi_R - (\Phi_{emp} + \Phi_{sum})} \cdot \frac{m_R}{m_S} \cdot C_R + \frac{m_R - m_S}{m_S} \cdot C_{Cr} \quad (2.8.17)$$

Bundan sonra kalibrəmə əmsalını və istilik tutumunu təyin etməklə istilik axını funksiyalarının faktiki qiymətindən aktivləşdirmə enerjisinə və termodinamik

funksiyalara keçmək mümkündür.

2.9 Xətaların təyin edilməsi

Bütün eksperimental nəticələrin sərbəst dəqiqliyinin müəyyən edilməsi üçün istifadə olunan bütün tədqiqat metodlarının dəqiqliyinin məhdudluğunu nəzərə almaqla sistematik və təsadüfi xətaları qiymətləndirilməsinin aparılması lazımdır. Mütləq xətanın ölçü həddi hesablanması üçün aşağıdakı riyazi yaxınlaşmadan istifadə olunmalıdır.

$$\varepsilon = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \nabla x_i = \sum_i \left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \right| \varepsilon_i \quad (2.9.1)$$

Burada, ε_i - hadisələrin mütləq xətası, əlavə faktorların olmasını göstərir. Ölçmələr zamanı alınan qiymət orta ədədin qiyməti ətrafında olur onda, kvadratik xətanın qiymətini aşağıdakı kimi yaza bilərik.

$$S(\chi) = \sqrt{\frac{\sum_i \chi_i - x}{n-1}} \quad (2.9.2)$$

n – mövcud müəyyənləşmələrin sayı, χ tək müəyyənləşmənin nəticəsidir. $S(\chi)$ kəmiyyəti nisbi vahidlərdən müəyyən olunana orta kvadratik xəta və yaxud variasiya əmsalı adlanır:

III FƏSİL

SÜRƏTLİ NEYTRONLARLA ŞÜALANDIRILMIŞ KRİSTALLARIN OPTİK VƏ TERMOFİZİKİ XASSƏLƏRİ

Təqdim olunan fəsildə tədqiqat materiallarının struktur düyünlərində yerləşən atomlarla neytron selinin elastiki və qeyri-elastiki qarşılıqlı təsiri, hissəciklərlə daşınan kinetik enerjinin atoma ötürülmə prinsiplərinin riyazi əsasları, yüksək intensivlikli neytron selinin təsiri altında atomların yerdəyişmə mexanizminin təhlili aparılmışdır. B_4C , B_6Si , BN və B_2O_3 kristalları impuls rejimində (200 mikro saniyə), 1 MeV enerjili, sürətli neytron 4.0×10^{12} n/sm², 8.0×10^{12} n/sm², 1.3×10^{13} n/sm², 4.0×10^{14} n/sm² və 1.0×10^{15} n/sm² seli ilə şüalanmadan sonra termofiziki xassələri tədqiq olunmuşdur. Temperaturdan asılı olaraq termodinamik funksiyalar, istilik seli və istilik tutumu üçün alınmış təcrübi qiymətlərin neytron selindən asılı olaraq müqayisəli analizi aparılmışdır. Nano kristallik B_2O_3 -ün səthində zəif kimyəvi qarşılıqlı təsir nəticəsində absorbsiya olunmuş su molekullarının sürətli neytron selinin intensivliyindən asılı olaraq parçalanma mexanizmi infraqırmızı və Raman spektroskopik analizlər ilə geniş şəkildə tədqiq edilmişdir. Temperatur və neytron selinin təsiri altında BN birləşməsində Viqner enerjisinin kinetikasi tədqiq olunmuşdur.

3.1 Sürətli neytron selinin tədqiqat kristallarının atomları ilə qarşılıqlı təsiri və enerji ötürmə mexanizmi

Elektrostatik nöqtəyi-nəzərdən neytronun yüksüz olmasını nəzərə alaraq, baş verən fiziki proseslərin təsviri neytral hissəciyin tədqiqat materiallarının atom nüvələri ilə mümkün elastiki və qeyri-elastiki qarşılıqlı təsir mexanizmi üzərində qurulmalıdır [115]. Neytron selinin “elastiki səpilməsi” bərk cismin səthindən səpilmə mexanizmi ilə eyni fazada xarakterizə olunur. Defekt əmələgəlmə mexanizmi yüksək neytron selinin kristaldan keçdiyi müddətdə qəfəsin düyün nöqtələrində yerləşən atomlarla qarşılıqlı təsir ehtimalından, atoma ötürülən kinetik enerjinin qiymətində və bir sıra sərhad şərtlərindən asılıdır. Qarşılıqlı təsirin ehtimalı effektiv səpilmənin (neytronun başlanğıc enerjisi, neytronun qarşılıqlı təsirindən sonrakı enerjisi, neytronun fəzada

səpilmə bucağı) 3.1.1 ifadəsindəki iki qat differensialı ilə təyin olunur.

$$\sigma(E_B, \Omega) = \int \sigma(E_B, E_S, \Omega) d\Omega \quad (3.1.1)$$

Neytron selinin kristalda elastiki səpilmə müddətində “səpilmə ehtimalının” qiyməti neytron selinin başlanğıc enerjisindən asılılığı kimi nəzərdə tutulur və neytronun selinin başlanğıc enerjisi üçün tam səpilmənin ehtimalı (3.1.2) şəkildə yazmaq mümkündür.

$$\sigma(E_B) = \int \sigma(E_B, \Omega) d\Omega \quad (3.1.2)$$

Radiasiya materialşünaslığında neytron şüalanmanın təsiri altında bərk cisimlərdə formalaşan defektlərin tədqiqi zamanı qarşılıqlı təsirə məruz qalan atomlar kaskadı daha böyük maraq kəsb edir. Ötürülən enerjinin çarpaz en kəsiyi $\sigma(E_B, \Omega)$, M kütləli atom, E_B başlanğıc enerjili neytronların səpilmə bucağının ehtimalı və qarşılıqlı təsirdə olan atomlara ötürülən kinetik enerjinin T qiymətindən asılıdır. Hesablamaların ardıcılığı üçün atomlara ötürülən enerjinin və səpilmə bucağının qiyməti tələb olunur. Neytron selinin kristal strukturda yolu və atom nüvəsi ilə səpilmənin əvvəl və sonra halı lobaratoriya sistemində baxılmışdır. Toqquşma prosesinə kütlə mərkəzi sistemində baxıldıqda məlum başlanğıc enerji ilə qarşılıqlı təsirdə olan neytronlar arasında səpilmə bucağı və atoma ötürülən enerjinin təyini əsasında qurulmuş metodlarda baxılır. Kütlə mərkəzi sistemində qarşılıqlı təsir mexanizminə nəzər yetirsək toqquşmada iştirak edən hissəciklər toqquşmadan sonra əks istiqamətlərdə hərəkətdə olurlar. Eyni və əks istiqamətlərdə neytronun atom ilə qarşılıqlı təsiri üçün impuls və enerjinin saxlanma qanunlarını aşağıdakı kimi ifadə etmək mümkündür.

$$v_c m - V_c M = 0 \quad (3.1.3)$$

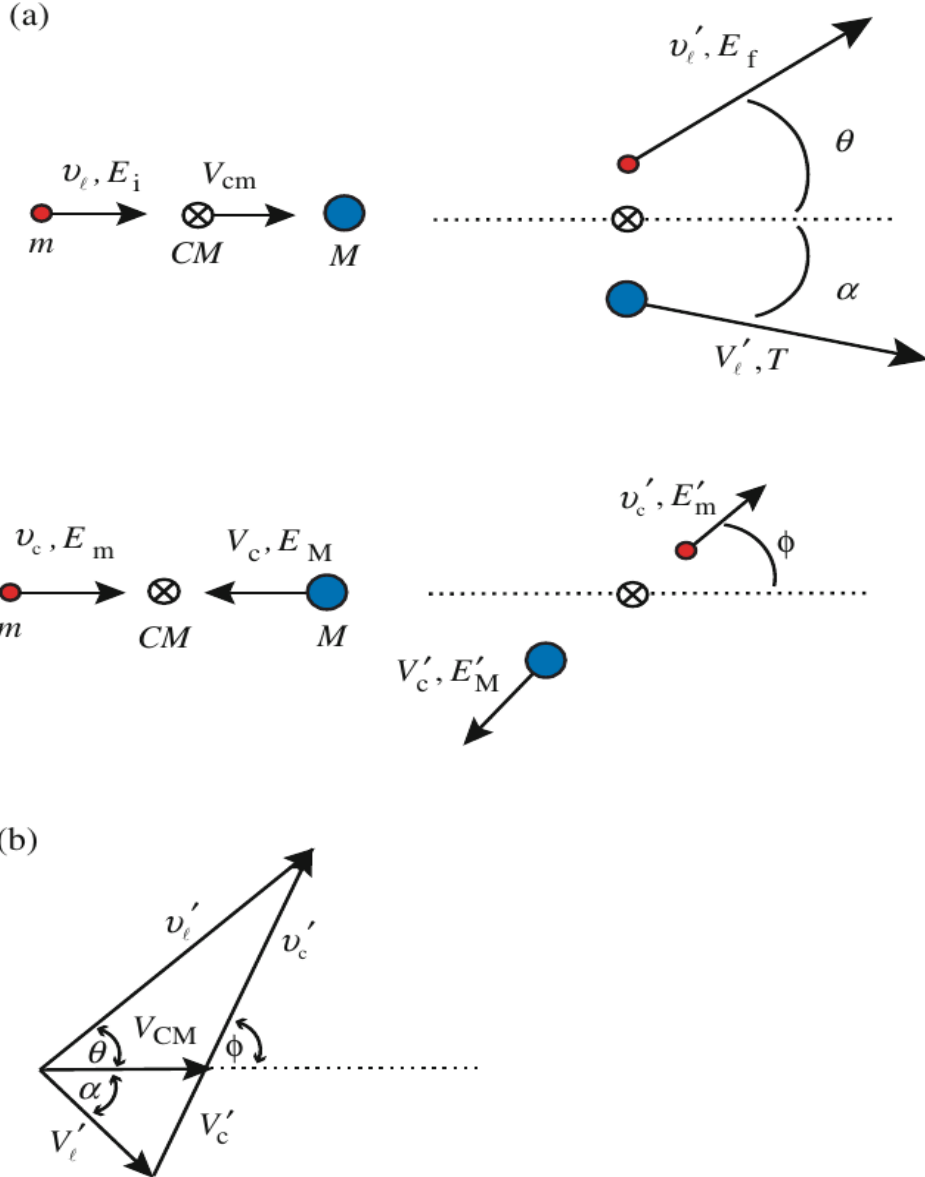
$$v_c' m - V_c' M = 0 \quad (3.1.4)$$

$$\frac{1}{2} m v_c^2 + \frac{1}{2} M V_c^2 = \frac{1}{2} m v_c'^2 + \frac{1}{2} M V_c'^2 \quad (3.1.5)$$

(3.1.3) və (3.1.4) tənliklərində v_c' və v_c üçün alınmış qiymətləri enerjinin saxlanma qanununda uyğun ifadələri ilə əvəz etsək enerjinin saxlanma qanunun (3.1.6) ifadəsi kimi yazmaq mümkündür.

$$\left[\frac{1}{2} m \left(\frac{M}{m} \right)^2 + \frac{1}{2} M \right] V_c^2 = \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{M}{m} \right)^2 + \frac{1}{2} M \right] V_c'^2 \quad (3.1.6)$$

Riyazi şərtlər daxilində $V_c'^2 = V_c^2$ və $v_c' = v_c$ kimi qəbul etsək neytronla qarşılıqlı təsirdə olan hədəf atomlar laboratoriya sistemində koordinatları şəkil 3.1.1-də kimi dəyişir.



Şəkil 3.1.1. Laboratoriya sistemində vektorial sürətlərin kütlə mərkəzinə görə dəyişməsi (a), ikili sistemdə əlaqəli sürətlərin dəyişməsi (b).

Beləliklə kütlə mərkəzini xarakterizə edən sürətdən istifadə edərək laboratoriya sistemində kütlə mərkəzinin sürətinin təyin edilməsi üçün V_{CM} və V_c yaxınlaşmasını

qəbul etməli və yekun ifadə 3.1.7 tənliyi şəkilində yazılmalıdır.

$$v_c = v_l - V_{KM} = v_l - V_c \quad (3.1.7)$$

Onda V_c ifadəsi üçün 3.1.1 tənliyindən istifadə edərək kütlə mərkəzinin sürəti üçün aşağıdakı ifadəni almış olarıq.

$$V_{KM} = \left(\frac{m}{M+m} \right) v_l \quad (3.1.8)$$

Yuxarıda göstərilən riyazi çevrilmələrdə əsas məqsəd kütlə mərkəzindən müxtəlif bucaqlar altında baş verən qarşılıqlı təsirdə atoma ötürülən kinetik enerjinin qiymətinin təyini ilə bağlıdır. Qeyd olunan vektorial analizlərdə müəyyən çətinliklər mövcuddur. Şəkil 3.1.1 (a)-da göstərilən sxemdən istifadə edərək kosinuslar teoremini aşağıdakı kimi yazmaq mümkündür.

$$V_l'^2 = V_{CM}^2 + V_c'^2 - 2V_{CM}V_c' \cos\phi \quad (3.1.9)$$

Sürət üçün alınmış 3.1.9 riyazi ifadəsinin enerji vahidləri ilə ifadə etsək və təkrar kosinuslar qanununda əvəzləmə etsək, onda atoma ötürülən kinetik enerji üçün aşağıdakı ardıcıl keçidlərdən sonra yekun ifadəni almış olarıq.

$$V_l'^2 = \frac{2T}{M}, \quad V_{CM}^2 = \frac{2E_i}{m} \left(\frac{m}{m+M} \right)^2 \quad \text{və} \quad V_c'^2 = \frac{2m}{M^2} E_m' \quad (3.1.11)$$

$$T = \frac{mM}{(m+M)^2} E_i + \frac{m}{M} E_m' - 2 \left(\frac{m}{m+M} \right) (E_i E_m')^{\frac{1}{2}} \cos\phi \quad (3.1.12)$$

$$\eta_1 = \left(\frac{m}{m+M} \right) \quad \text{və} \quad \eta_2 = \left(\frac{M}{m+M} \right) \quad (3.1.13)$$

əvəzləmələrin yerinə yetirib (3.1.12) ifadəsində nəzərə alsaq atoma ötürülən kinetik enerji üçün daha lakonik ifadə almış olarıq.

$$T = \eta_1 \eta_2 E_i + \frac{\eta_1}{\eta_2} E'_m - 2\eta_1 (E_i E'_m)^{\frac{1}{2}} \cos\phi \quad (3.1.14)$$

Yerinə yetirilən riyazi yaxınlaşmadan belə nəticəyə gəlmək olar ki, neytron selinin atomla elastiki toqquşması zamanı atoma ötürə biləcəkləri kinetik enerji yalnız neytronun başlanğıc enerjisindən və səpilmə bucağından aslıdır. Onda neytronun başlanğıc enerjisi ilə toqquşmadan sonrakı enerji arasındakı riyazi əlaqənin aşağıdakı keçidlərlə ifadə etmək mümkündür. (3.1.7) və (3.1.8) ifadələrində mümkün əvəzləmələri yerinə yetirsək

$$v_c = v_l - \left(\frac{m}{m+M}\right) v_l = v_l \left(\frac{M}{m+M}\right) \quad (3.1.15)$$

$$E'_m = E_i \left(\frac{M}{m+M}\right)^2 = \eta_2^2 E_i \quad (3.1.16)$$

$$T = \frac{1}{2} \frac{4mM}{(m+M)^2} E_i (1 - \cos\phi) \quad (3.1.17)$$

Əgər $m=1$ və $M=A$ qəbul etsək onda kinetik enerji yalnız ϕ bucağından asılı olacaqdır. Bütün riyazi yaxınlaşmalar və modeləşdirilmiş təcrübi analiz nəticələri göstərir ki, elastiki qarşılıqlı təsir zamanı atoma ötürülən enerji orta yekun qiymətini aşağıdakı kimi yazmaq olar.

$$T = \frac{4A}{(1+A)^2} \frac{E_i}{2} = \gamma \frac{E_i}{2} \quad (3.1.18)$$

Yuxarıda verilən (3.1.18) ifadəsindən istifadə edərək B_4C , B_6Si , BN və B_2O_3 birləşmələrində elastiki toqquşma zamanı ötürülən enerjini hesablamaq mümkündür

(Cədvəl 3.1.1).

Cədvəl 3.1.1. B, Si, C, N və O atomlarına elastiki toqquşma zamanı ötürülən ortalama enerjisi.

Atom	Neytronun enerjisi, MeV	γ	Ötürülən enerji, MeV
B	1	0.3340	0.1670
C		0.2840	0.1420
Si		0.1332	0.0666
N		0.3840	0.1920
O		0.2215	0.1107
B ₄ C		-	0.3090
B ₆ Si		-	0.2336
BN		-	0.3590
B ₂ O ₃		-	0.2777

Neytronun atom nüvəsi ilə qeyri-elastiki səpilməsi yeni nüvə reaksiyaları ilə xarakterizə olunur. Yeni hissəciklərin buraxılması, nüvədə udulan kinetik enerji müxtəlif hadisələrin və nüvənin həyəcanlaşması ilə nəticələnən hadisələrin baş verməsinə səbəb olur. Qeyri-elastiki toqquşma zamanı neytron nüvə tərəfindən udularaq nüvənin tərkibində formalaşması nəticəsində neytronların, qamma şüaların, sərbəst elektronların və s, buraxılması ilə yekunlaşır. Ardıcıl reaksiyalarda yalnız bir enerjili qamma kvantının buraxılmasından fərqli enerjili qamma kvantlarının buraxılması və qarşılıqlı təsir prosesi müddətində davam edir. Qeyri-elastiki səpilmədə çarpaz səpilmənin effektiv en kəsiyini mümkün və qeyri-mümkün rezonans komponentləri şəklində bölmək olar [72]. Hədəf nüvənin rezonans faktorunu təyin etmək üçün çarpaz səpilmənin effektiv en kəsik funksiyası və nüvədən əks olunan

qamma enerjisinin qiymətinin təyini ilə bağlıdır. Elastiki səpilmə zamanı kinetik enerjini xarakterizə edən (3.1.13) ifadəsi qeyri elastiki səpilmə zamanı kənara çıxmalar aşkar olunur. Qeyri elastiki səpilmə zamanı tam enerjinin saxlanması diqqət yönəldilməsi tələb olunur. Hədəf nüvənin laboratoriya sistemində tərpənməz yerləşməsi və hissəciyin müəyyən başlanğıc enerjiyə malik olmasını nəzərə alsaq, balanslaşdırılmış enerjinin saxlanmasıdan istifadə etməklə rezonans halları üçün sistemə ötürülən kinetik enerji və effektiv en kəsiyin sahəsini qeyd etmək lazımdır (Cədvəl 3.1.2).

Cədvəl 3.1.2. Elastiki və qeyri-elastiki səpilmə və rezonans halları üçün sistemə ötürülən kinetik enerji və effektiv en kəsiyin sahəsi.

Elastik səpilmə	$T = \gamma \frac{E_i}{2} (1 - \cos\phi)$
Elastik səpilmə	$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\sigma_s(E_i)}{\gamma E_i}$
Qeyri elastiki səpilmə	$T(E_i, Q_j, \phi) = \gamma \frac{E_i}{2} - \frac{\gamma}{2} \left[E_i \left(E_i + Q_i \frac{A+1}{A} \right)^{\frac{1}{2}} \cos\phi + \frac{Q_i}{A+1} \right]$
Rezonans region	$\sigma_{s,j}(E_i, Q_j, T) = \frac{\sigma_{s,j}(E_i, Q_j)}{\gamma E_i \left(1 + Q_i \frac{A+1}{A} \right)}$
n, 2n	$T = \frac{A}{A-1} \frac{\eta_1}{\eta_2} E_m'' - \frac{A}{A-1} T_l - 2 \left(\frac{\eta_1}{\eta_2} \right)^{\frac{1}{2}} (T_l E_m'')^{\frac{1}{2}} \cos\phi$
n, γ	$T = \frac{E_i^2}{4(M+m)c^2}$
Effektiv en kəsiyi	$\sigma_{n,\gamma}(E_i) = \sigma_0 \sqrt{\frac{E_0}{E_i} \left\{ \frac{1}{[(E_i - E_0)/(\Gamma/2)]^2 + 1} \right\}}$

Ədəbiyyat materiallarında (n, 2n) model reaksiyaları geniş tətqiq edilmiş, atom nüvəsində baş verən təsirlərin nəticəsində nüvənin transmutasiyaya məruz

qalmasının əsasları göstərilmişdir [70, 72]. Digər sinif reaksiyalarda isə (n, γ) neytronla paralel gamma şüaların buraxılması ilə xarakterizə olunur. Foton selinin buraxılması kifayət edir ki, struktur qəfəsdə atomların koordinatlarının dəyişməsi həcmdə yeni kaskad formalaşmasına səbəb olur. Ən əsas amil sürətli neytronlarla şüalandırılmış tədqiqat nümunələrində əlavə gamma təsirlərin nəzərə alınması vacib faktorlardan biridir. Tədqiq olunan nümunələr sırasında ən mürəkkəb nüvə çevrilməsi B atomu ilə baş verir [5, 84, 194, 224]. Nəzərə alsaq ki, bu prosesdə geniş intervalda enerji keçidləri mövcuddur (Cədvəl 3.1.3).

Cədvəl 3.1.3. Bor atomu ilə neytronun çevrilmə reaksiyası.

İzotop	Neytronun tutulma reaksiyası	σ , en kəşik
^{10}B	$B^{10} + n \xrightarrow{94\%} \alpha(1.47 \text{ MeV}) + Li^7(0.84 \text{ MeV}) + \gamma(0.48 \text{ MeV}) \xrightarrow{6\%} \alpha(1.78 \text{ MeV}) + Li^7(1.01 \text{ MeV})$	3840
^6Li	$n + Li^6 \rightarrow H^3(2.72 \text{ MeV}) + \alpha(2.05 \text{ MeV})$	940
^3He	$n + He^3 \rightarrow H^3(191 \text{ keV}) + p(573 \text{ keV})$	5330

Cədvəl 3.1.4. Mümkün elastiki və qeyri-elastiki səpilmə və rezonans halları üçün Si atomu ilə neytronun qarşılıqlı təsir halları.

Reaksiya	Neytronun enerji, (MeV)	Əlavə
$n+^{28}\text{Si}\rightarrow n+^{28}\text{Si}$	0.00	Elastiki səpilmə
$n+^{28}\text{Si}\rightarrow p+^{25}\text{Al}$	4.00	
$n+^{28}\text{Si}\rightarrow\alpha+^{25}\text{Mg}$	2.75	
$n+^{28}\text{Si}\rightarrow\alpha+\alpha+^{21}\text{Ne}$	12.99	
$n+^{28}\text{Si}\rightarrow p+p+^{27}\text{Mg}$	13.90	
$n+^{28}\text{Si}\rightarrow\alpha+p+^{24}\text{Na}$	15.25	
$n+^{28}\text{Si}\rightarrow n+^{12}\text{C}+^{16}\text{O}$	16.70	
$p+^{28}\text{Si}\rightarrow p+^{28}\text{Si}$	0.00	Elastiki səpilmə
$p+^{28}\text{Si}\rightarrow p+^{25}\text{Al}$	7.99	
$p+^{28}\text{Si}\rightarrow\alpha+p+^{24}\text{Mg}$	10.34	
$p+^{28}\text{Si}\rightarrow p+p+^{27}\text{Al}$	12.00	
$p+^{28}\text{Si}\rightarrow p+^{12}\text{C}+^{16}\text{O}$	16.70	
$p+^{28}\text{Si}\rightarrow\alpha+\alpha+^{21}\text{Na}$	17.48	
$p+^{28}\text{Si}\rightarrow n+p+^{27}\text{Si}$	17.80	
$\gamma+^{28}\text{Si}\rightarrow n+^{27}\text{Al}$	16.97	
$\gamma+^{28}\text{Si}\rightarrow n+p+^{26}\text{Al}$	24.60	
$\gamma+^{28}\text{Si}\rightarrow n+n+^{27}\text{Si}$	30.50	
$\gamma+^{28}\text{Si}\rightarrow\alpha+^{24}\text{Mg}$	17.10	

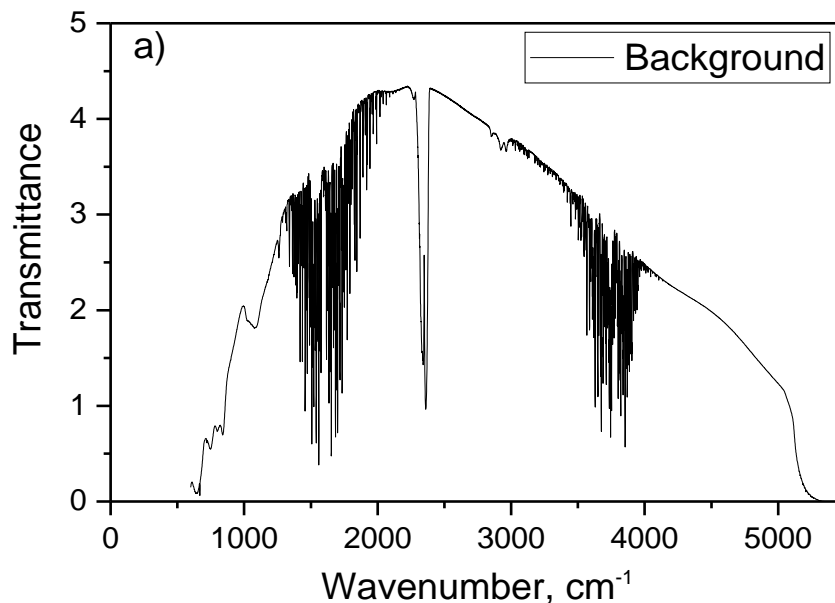
Cədvəl 3.1.5. Mümkün elastiki və qeyri-elastiki səpilmə və rezonans halları üçün C atomu ilə neytronun qarşılıqlı təsir halları

Reaksiya, $E > 5$ MeV	Reaksiya sürəti $\times 10^{-2}$,	Parçalanma məhsulu
$n(^{12}\text{C}, 3\alpha) n$	10	He qazı
$^{12}\text{C} (n, t) ^{10}\text{B}$	3	Tritium radioaktiv qazı
$^{12}\text{C} (n, d) ^{11}\text{B}$	0.7	Deyterium qazı
$^{12}\text{C} (n, p) ^{12}\text{B}$	0.2	Hidrogen qazı
$^{16}\text{C} (n, \alpha) ^{13}\text{C}$	10	He qazı
$^{12}\text{C} (n, n', x) ^{12}\text{B}$	2.4×10^{-4}	-

3.2 Sürətli neytron selinin təsiri altında defekt əmələgəlmə mexanizminin optik əsasları

Müxtəlif enerji və intensivlikli neytron seli ilə şüalandırılmış bərk cisimlər, mikro və nano kristal sistemlər, karbon nanoborular və digər birləşmələrin nano halında kompleks qarışıqlarının optik xassələrin tədqiqi olduqca maraqlı fiziki xassələrin meydana gəlməsinə və onların öyrənilməsinə səbəb olur [2, 4, 13, 24, 30]. Geniş intervalda tədqiq olunan Raman- və İQ-spektroskopik (infraqırmızı) tədqiqatlar kristal strukturun molekulyar dinamikasını (sp^2 və sp^3 karbon birləşmələri üçün hibridləşmə reaksiyaları daxil olmaqla), amorflaşma və oksidləşmə mexanizminin kinetikasını əsaslı şəkildə izah etməyə əsas verir.

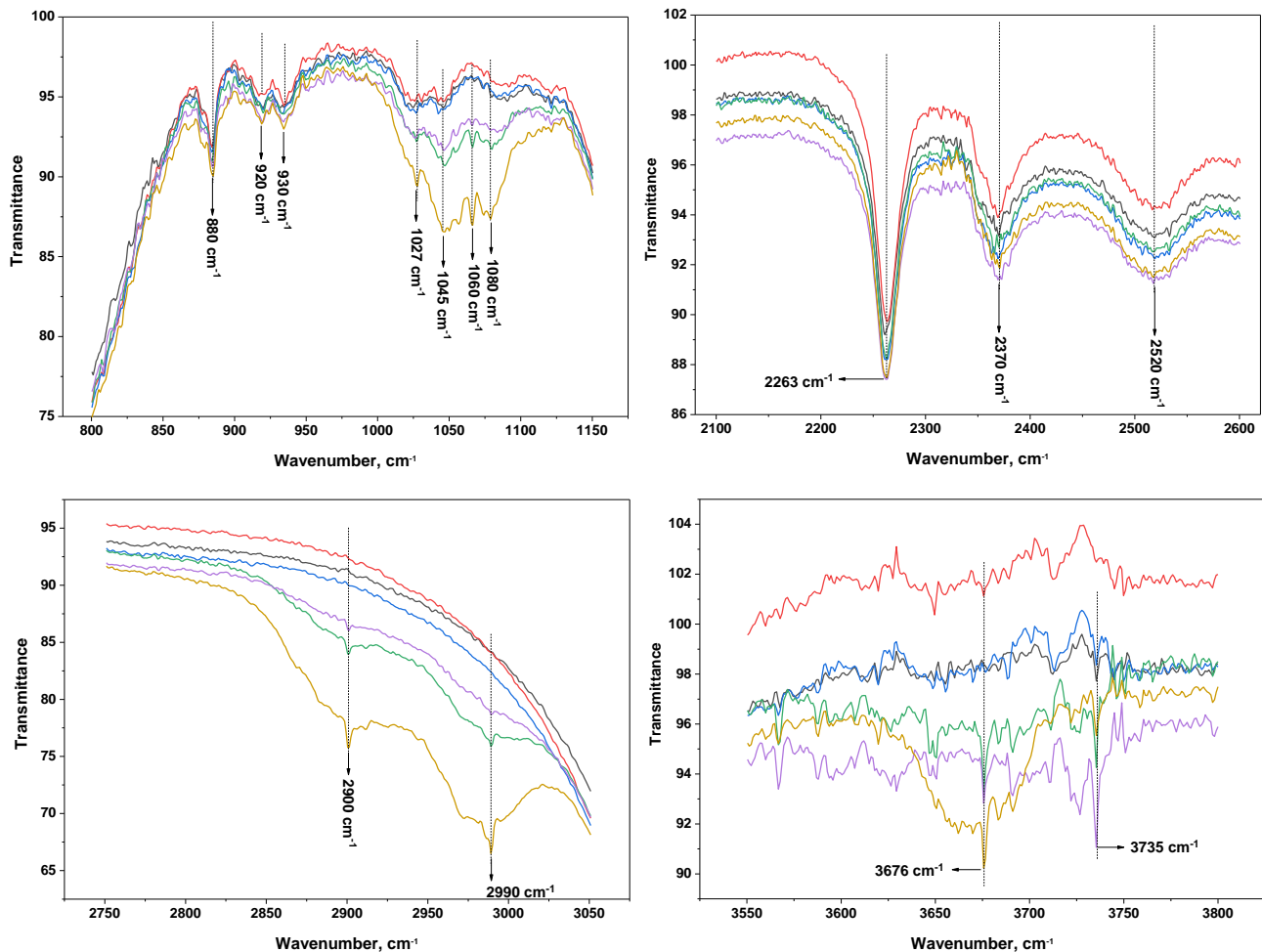
Eksperimental tədqiqatın məqsədindən asılı olaraq seçilmiş lazerin dalğa uzunluğunun və enerjisinin dəyişməsindən asılı olaraq şüalanmanın təsiri altında amorflaşma kinetikasi və hissəciyin ölçü dinamikası haqqında məlumat əldə etmək mümkündür [140]. Tədqiqat nümunələrindən olan 80 nm B_2O_3 kristalı 1 MeV enerjili sürətli neytronlarla 4.0×10^{12} n/sm², 8.0×10^{12} n/sm², 1.3×10^{13} n/sm², 4.0×10^{14} n/sm² və 1.0×10^{15} n/sm² şüalanmadan sonra Raman və İQ spektroskopik tədqiqatları yerinə yetirilmişdir. Şəkil 3.2.1.(a)-da eksperimental dəqiqlik üçün əvvəlcə fon rejiminin 5500 sm⁻¹ tezliyinə qədər infraqırmızı spektroskopik spektri verilmişdir.



Şəkil 3.2.1. Fən rejiminin 5500 cm^{-1} tezliyinə qədər infraqırmızı spektri.

Şəkil 3.2.1-dən aydın müşahidə olunur ki, 4000 cm^{-1} -ə qədər qeyd olunan infraqırmızı spektroskopiya modaları havada mövcud su və OH funksional qruplarını göstərir. Şəkil 3.2.2-də nano bor oksid kristalının müxtəlif hissələrdə 4000 cm^{-1} tezliyə qədər BO_3 , BO_4 , B(OH) və OH qruplarının kiçik və böyük vibrasiya modaları verilmişdir. Böyük vibrasiya qrupuna daxil olan birinci funksional qruplarının 630 cm^{-1} və 700 cm^{-1} B-O-B modaları BO_3 borat qruplarının müxtəlif bucaqlar altında əyilmə rəqslərinə, ikinci qrupa daxil olan tezliklər 880 cm^{-1} , 920 cm^{-1} , 930 cm^{-1} , və 1195 cm^{-1} isə BO_4 , B-O dartılmış rəqslərinə uyğun gəlir. 1027 cm^{-1} , 1045 cm^{-1} , 1057 cm^{-1} , 1066 cm^{-1} və 1079 cm^{-1} isə di-borat və tetra borat BO_4 qrupunun B-O dartılmış rəqslərini xarakterizə edir.

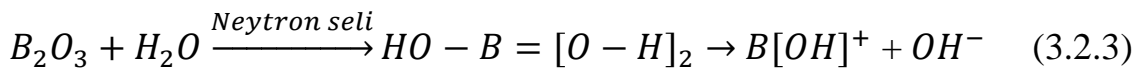
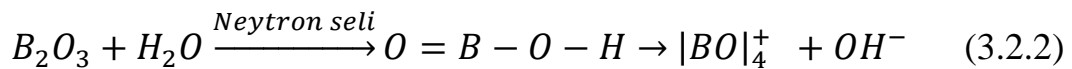
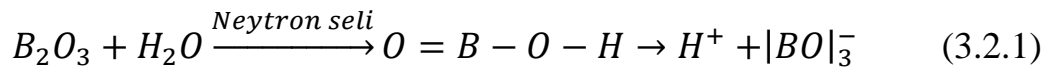
Əlavə olaraq, 1253 cm^{-1} və 1470 cm^{-1} $\text{BO}_{\text{sim}}\text{B-O}_{\text{sim}}$ simmetrik dartılmış piro və orto borat qruplarının müşahidə olunmamışdır. Kiçik tezliklərdə 2263 cm^{-1} , 2369 cm^{-1} , və 2519 cm^{-1} müşahidə olunan funksional qruplar B-(OH) rəqs modaları ilə üst üstə düşür. Yuxarıda sadalanan bütün funksional qruplar ədəbiyyat materialları ilə uyğunluq təşkil edir [69, 287, 290]. Lakin neytron şüalanmanın təsiri hərəkət modalarının intensivliyini artırır və yeni 2900 cm^{-1} , 2989 cm^{-1} , 3676 cm^{-1} , və 3735 cm^{-1} funksional qrupların yaranmasına səbəb olur. Neytron selinin $1.3 \times 10^{13} \text{ n/cm}^2$ qiymətindən başlayaraq OH funksional qruplarını aydın müşahidə etmək mümkündür.



Şəkil 3.2.2. İlk və müxtəlid intensivliklərdə otaq temperaturunda sürətli neytronlarla şüalanmış nano B₂O₃ kristalının infraqırmızı spektrləri (qara-ilkin, qırmızı- 4.0×10^{12} n/sm², göy- 8.0×10^{12} n/sm², yaşıl- 1.3×10^{13} , cəhrayı- 4.0×10^{14} n/sm² və sarı - 1.0×10^{15} n/sm²).

Neytron selinin təsiri altında nümunələrdə elastiki səpilmə, qeyri-elastiki, (n, 2n), (n, γ) və radiasiya tutulması nəticəsində nano kristalın B₂O₃ quruluşunda müxtəlif kimyəvi və fiziki çevrilmələr baş verir. Məhz, neytron selinin təsiri ilə nüvələrarası qarşılıqlı təsir prosesi, B¹⁰ izotopu ilə baş verən çevrilmələr (${}_5\text{B}^{10} + {}_0\text{n}^1 \rightarrow 2{}_2\text{He}^4 + {}_1\text{H}^3$ and ${}_5\text{B}^{10} + {}_0\text{n}^1 \rightarrow {}_2\text{He}^4 + {}_3\text{Li}^7 + 2.4 \text{ MeV}$) [64] və elastiki səpilmə nəticəsində sistemə verilən enerjinin miqdarı xətti artır. Artan enerji miqdarı hidrat və hidrogen qrupunun sərbəst, parçalanmış fazalarını yaradır ki, spektrdə sərbəst qrupların yaratdığı effektləri aydın müşahidə etmək olur. Şüalanma selindən asılı olaraq yaranan yeni effektlər udulan enerji ilə paralel xəttidir. Neytron selinin 1.3×10^{13} n/sm²-dən 1.0×10^{15} n/sm²

qiymətlərində hidrokسيد qrupu kristal quruluşda anion və kation halda qalmaqda davam edir. Yüksək kimyəvi aktivliyə malik nano B_2O_3 kristalları radiasiyaya davamlı OH^- hidrokسيد qrupunu saxlaya bilir. Məlumdur ki, müxtəlif enerjili neytronların kristal ilə elastiki səpilməsi zamanı enerjinin ötürülmə mexanizmi qarşılıqlı təsirdə olduğu kristal təşkil edən atomun kütləsindən asılıdır. B^{10} izotopu ilə qarşılıqlı təsirdən əlavə 2.4 MeV enerjinin ayrılması [194] və qarşılıqlı təsir zamanı neytron selinin enerji itgisi hidrogen nüvəsi və su molekulları üçün maksimum qiymətə malikdir. Neytronun enerjisi B_2O_3 quruluşunda formalaşan $B(OH)_3$ və HOB O birləşmələrində hidrogen və su molekullarına aşağıdakı mexanizimlə ötürülür və parçalanma prosesi baş verir.



Yaranmış H^+ ionlarının bir qismi həcmdə neytron selinin təsiri ilə formalaşmış aktiv mərkəzlər tərəfindən tutulur. Digərləri strukturda birləşərək molekulyar hidrogenə çevrilir və parçalanma məhsulu kimi ayrılır. Neytron şüalanmasından sonra mövcud yeni və yaranmış qruplarda atomlararası kimyəvi rəbitənin qüvvə sabiti cədvəl 3.2.1- də göstərilmişdir. Bütün spektrlərdə qüvvə sabiti (3.2.4) tənliyi vasitəsi ilə təyin olunmuşdur.

$$k = \bar{v}^2 (2\pi c)^2 \mu \quad (3.2.4)$$

Burada v - vibrasiya tezliyi, sm^{-1} ; c işıq sürəti, sm/san ; μ kimyəvi rəbitədə iştirak edən elementlərin kütləsidir.

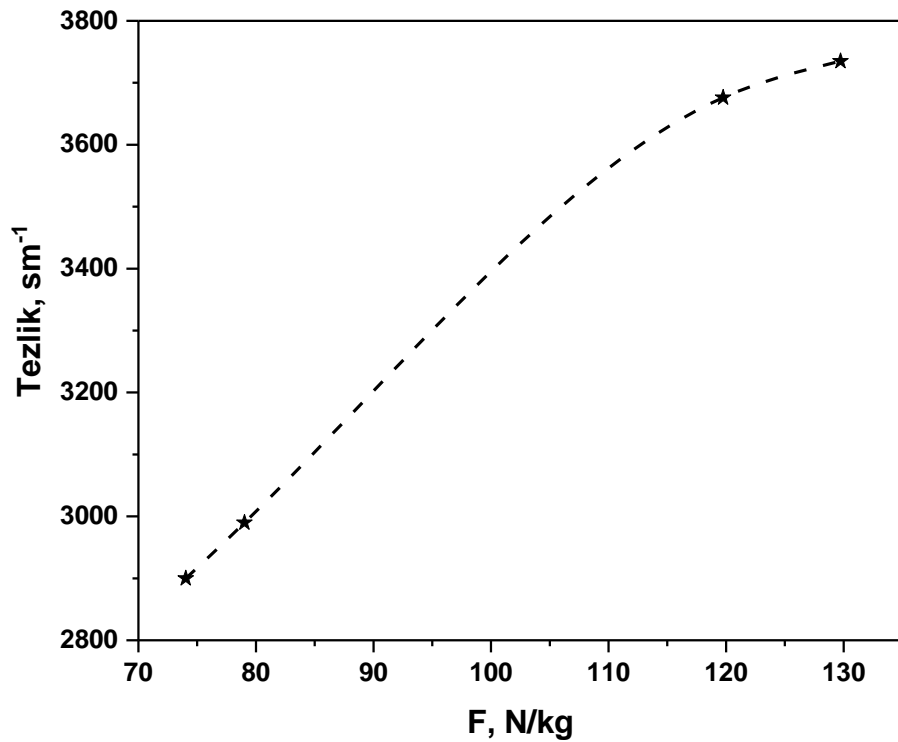
$$\mu = \frac{M_1 \times M_2}{M_1 + M_2} \quad (3.2.5)$$

Cədvəl 3.2.1. Nano B₂O₃ kristalında müxtəlif neytron selinin təsiri altında funksional qruplar və qüvvə sabitləri.

Tezlik, sm ⁻¹	Qruplar	Qüvvə sabiti, N/kg	Neytron şüalanma, n/sm ²	
630	O-B-O	24.2	Neytron selinin bütün qiymətlərində	
708	O-B-O	30.6		
883	B-O	47.6		
919	B-O	51.5		
935	B-O	53.3		
1027	B-O-H	64.3		
1045	O-B-O	66.6		
1050 (yeni)	B-O-H	67.2		Yalnız 10 ¹⁵ n/sm ²
1056	B-O	68.0		-
1066	B-O	69.3	-	
1074	B-O	70.4	-	
1079	O-B-O	71.0	-	
1195	B-O	87.1	-	
1439	B-O	126	-	
2263	B-OH	303.2	-	
2369	B-OH	333.6	-	
2519	B-OH	376.1	-	
2900 (yeni)	O-H	75.4	1.3×10 ¹³ -10 ¹⁵ n/sm ²	
2990 (yeni)	O-H	80.2	1.3×10 ¹³ -10 ¹⁵ n/sm ²	
3194	O-H	91.5	-	
3676 (yeni)	O-H	121.5	1.3×10 ¹³ -10 ¹⁵ n/sm ²	
3735 (yeni)	O-H	125.8	1.3×10 ¹³ -10 ¹⁵ n/sm ²	

Cədvəl 3.2.1-dən görüldüyü kimi, qüvvə sabitinin ən böyük qiyməti OH funksional qrupları üçün, ən kiçik qiymət isə BO₄ dartılmış qrupları üçün təyin

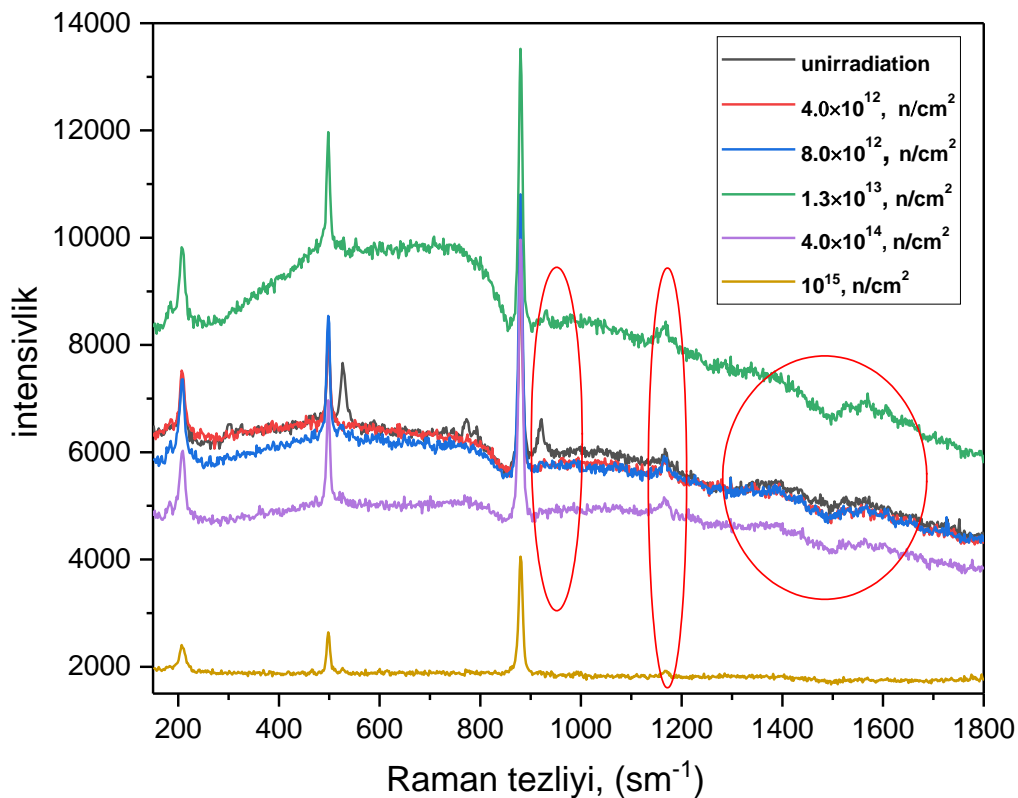
olunmuşdur. Neytronun ötürülmə mexanizminə əsaslanaraq yeni formalaşmış qrupların qüvvə sabiti təyin olunmuşdur. Cədvəl 3.2.1-də OH funksiyonal qrupları üçün qüvvə sabitinin yüksək qiymətə malik olmasını göstərir və BO_4 uzanan qrupları üçün ən aşağı qiymət müəyyən edilmişdir. Yeni yaranan qruplarda qüvvət sabitinin qiyməti və məhdudluğu neytron enerjisinin ötürülməsi mexanizmi əsasında müəyyən edilmiş və hidrokسيد qruplarının 2800-3800 sm^{-1} tezlik intervalında qüvvə dinamikası şəkil 3.2.3-də göstərilmişdir.



Şəkil 3.2.3. $[\text{OH}]^-$ funksional qrupları üçün qüvvə sabiti.

Yüksək neytron axınının təsiri altında yeni B-O kovalent kimyəvi rabitənin formalaşması və zəncirvari proses zamanı bor atomunun bir p-elektronu oksigen atomuna ötürülür. Bor atomları elektron ötürülməsi ilə oksidləşmə reaksiyasına məruz qalırlar və onların reduksiya reaksiyasının xüsusiyyətləri üstünlük təşkil edir. Strukturda B-(OH) kimyəvi rabitələrin yaranması neytron şüalanması nəticəsində meydana gələn funksional qrupların (anion $[\text{OH}]^-$) B atomuna elektron verməsi ilə əlaqədardır. Nano B_2O_3 kristalında molekulyar dinamikanın öyrənilməsi məqsədi ilə He-Ne lazerinə malik, dalğa uzunluğu 633 nm olan Raman spektrometrindən istifadə

edilmişdir. Şəkil 3.2.4-də otaq temperaturunda müxtəlif neytron selinin təsiri altında nano B_2O_3 kristalında 207 sm^{-1} , 498 sm^{-1} , 527 sm^{-1} , 883 sm^{-1} , 921 sm^{-1} , və 1165 sm^{-1} tezliklərdə Raman pikləri müşahidə edilmişdir.



Şəkil 3.2.4. Müxtəlif intensivlikli neytron selinin təsiri altında nano B_2O_3 kristalının Raman spektrləri.

Şüalanmayan nano B_2O_3 kristalında yeni Raman tezlikləri, 527 sm^{-1} və 921 sm^{-1} -də müşahidə olunmuşdur. Ədəbiyyata görə, verilmiş tezliklər və yaxud kimyəvi rabitələr 883 sm^{-1} , 921 sm^{-1} və 1165 sm^{-1} bor turşusunu və B-O rabitəsini xarakterizə edir [149]. Həm bor turşusunda həm də bor oksid yüksək neytron seli ilə şüalanma zamanı kristalın səthində degradasiya pozğunluqlarının olduğunu göstərir. 498 sm^{-1} və 1165 sm^{-1} ilə qeyd olunan piklər B_2O_3 fazasının B-O-B uyğun rəqslərinin mövcudluğunu göstərir. Raman spektrlərində 207 sm^{-1} -də əlavə bir qrup rəqslərinin ortaya çıxdığı aydın olur və təəssüf ki, İQ spektrlərində xarakterik pik aşkar olunmamışdır. “Synchrotron radiation technic” metodu ilə quruluş dinamikasında kristallik ölçünün L_a təyin edilməsi üçün müxtəlif yanaşmalar mövcuddur [48]. Ən dəqiq metodlardan biri hesab edilən Scherrer yaxınlaşması ilə kristal ölçүнünü

şüalanmadan sonra təyini mümkündür (3.2.6).

$$L_a = \frac{1.84\lambda}{\beta \cos\theta} \quad (3.2.6)$$

λ -“synchrotron radiation”nin dalğa uzunluğu (0.120 nm), θ -pikin pozisiyası, β -pikin yarımənidir. Bir sıra təcrübələr üçün pikin yarıməninin riyazi ifadəsi (3.2.7) şəklində qeyd olunur.

$$\beta = \sqrt{\beta_m^2 - \beta_{Si}^2} \quad (3.2.7)$$

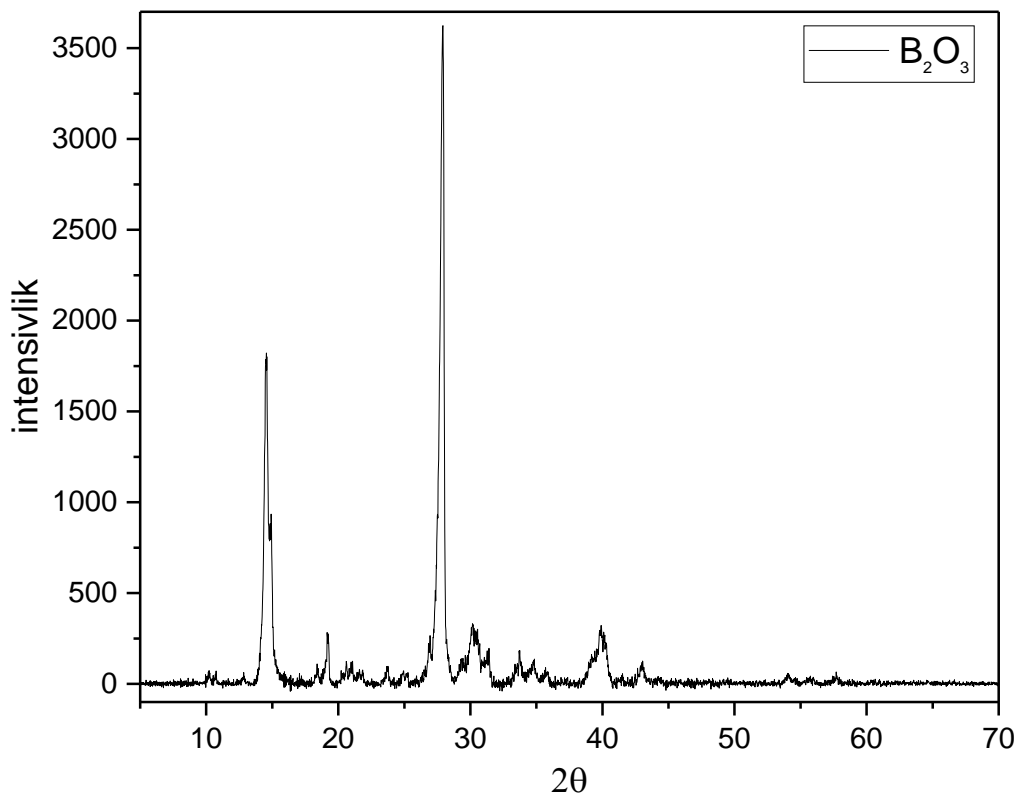
Burada β_m –tədqiq olunan kristalın pikinin yarıməni, β_{Si} – standart ölçmələr üçün Si elementinin pikinin yarımənindən istifadə olunur. Umumilikdə kristalın ölçünün təyin edilməsi üçün “X-ray diffraction” profili standart model kimi geniş istifadə olunur. Lakin təcrübələrin nəticələrdən alınan qiymətlər bir sıra faktorlarla bağlı olduğu üçün assimetrik profildə aşağı dəqiqlikli nəticələr alınır. Məhz “synchrotron radiation technic” metodu prespektivli yaxınlaşma kimi istifadə olunmaqdadır. İkinci yanaşma STM (Scanning Tunneling Microscopy) metodudur ki, strukturda baş verən ölçü dinamikasını əyani təsvir etmək mümkündür. Lakin sadalanan bütün yanaşmalardan ön sırada Raman spektrometrik analiz metodudur. Şüalanmış nümunələrdə optik spektroskopik tədqiqatlar zamanı Raman tədqiqatları kristalın struktur haqqında daha dəqiq məlumatlar verir və alınan təcrübə nəticələrin dəqiqliyi lazerin enerjisindən bilavasitə asılıdır. Şəkil 3.2.4-də verilmiş nano B_2O_3 kristalın kristalın ölçüsünün yüksək sel sıxlığında neytron şüalanmadan asılı olaraq dəyişməsi piklərin $\left(\frac{I_s}{I_0}\right)$ nisbətindən və lazerin enerjisindən asılıdır. Cancado tədqiqatlarında kristalın ölçünün piklərin intensivlik nisbəti arasında riyazi uyğunluq yaratmışdır [49]. Lakin lazerin enerjisindən və şüalanma zamanı neytron selinin və enerjisinin (3.2.8) riyazi ifadəsi ilə sinxronlaşdırılması vacib parametrlərdən biri hesab olunur.

$$L_a(\text{nm}) = \frac{560}{E_{lazer}^4} \left(\frac{I_s}{I_0}\right)^{-1} \quad (3.2.8)$$

E_{lazer} –Raman təcrübələrində istifadə olunan lazerin eV ilə enerjisidir. Bir sıra təcrübi tədqiqatlarda lazerin dalğa uzunluğundan istifadə olunur (3.2.9).

$$L_a(\text{nm}) = (2.40 \cdot 10^{-10}) \cdot \lambda_l^4 \left(\frac{I_s}{I_0} \right)^{-1} \quad (3.2.9)$$

Lazerin enerjisi üçün sabit parametrlərdən 2.54 eV, 13.5 nm dalğa uzunluğu və 1 MeV enerjili müxtəlif (4.0×10^{12} n/cm², 8.0×10^{12} n/cm², 1.3×10^{13} , 4.0×10^{14} n/cm² və 10^{15} n/cm²) neytron seli seçilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, neytron selinin artması ilə nano B₂O₃ kristalında kristallik ölçüsü 90 nm-dən 138 nm-ə qədər böyüyür. Amorflaşma, atomların koordinatlarının dəyişməsi ötürülən kinetik enerjinin paylanmasını təcrübi göstərir.



Şəkil 3.2.5. Nano B₂O₃ kristalının roentgen difraksiya spektri

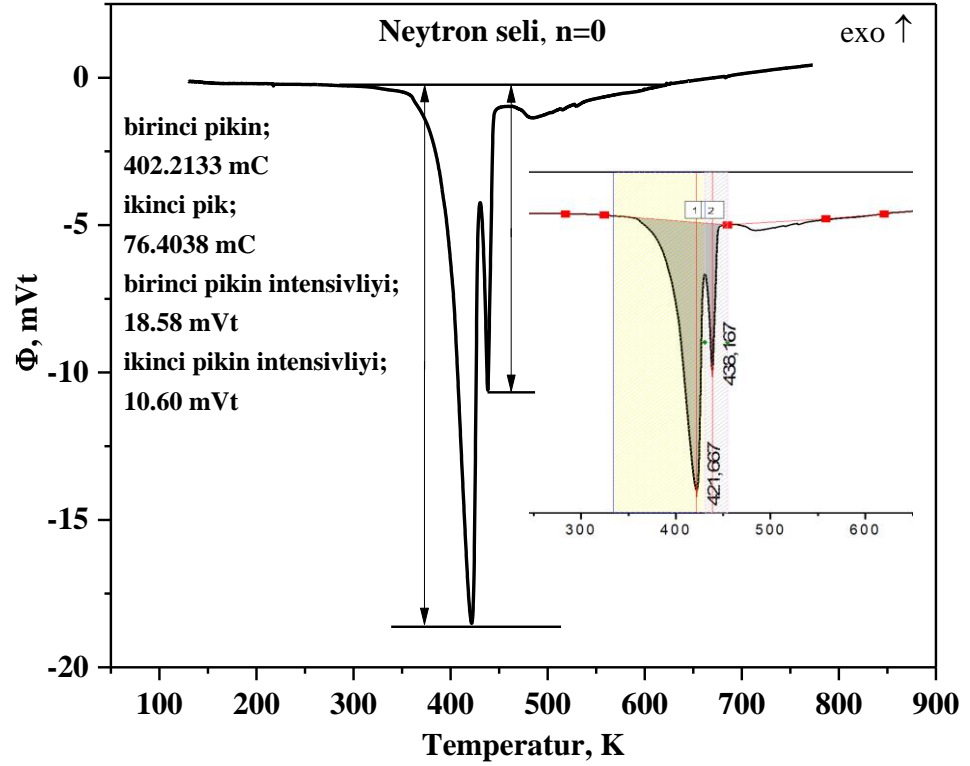
Nəticədə, yüksək sel sıxlığına malik sürətli neytronların təsiri altında nano B₂O₃ optik təsirləri İQ və Raman spektroskopiyası texnikası ilə araşdırılmış, neytron şüalanma mexanizmi nano B₂O₃ kristalının səthində (neytron şüalanma selindən asılı olaraq) funksional qrupları artırır. Şəkil 3.2.5-də rentgen struktur analizi ilə tədqiq olunmuş B₂O₃ nano kristalının difraksiya spektri verilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki,

difraksiya spektri $Cmc2$ fəza qrupuna, $a=0.4613$ nm, $b=0.7803$ nm və $c=0.4129$ nm qəfəs parametrlərinə malik β - B_2O_3 modifikasiyaya uyğundur [234-235] və spektrdə B(OH) fazalarının olması yuxarıda sadalanan struktur analizləri ilə uyğunluq təşkil edir.

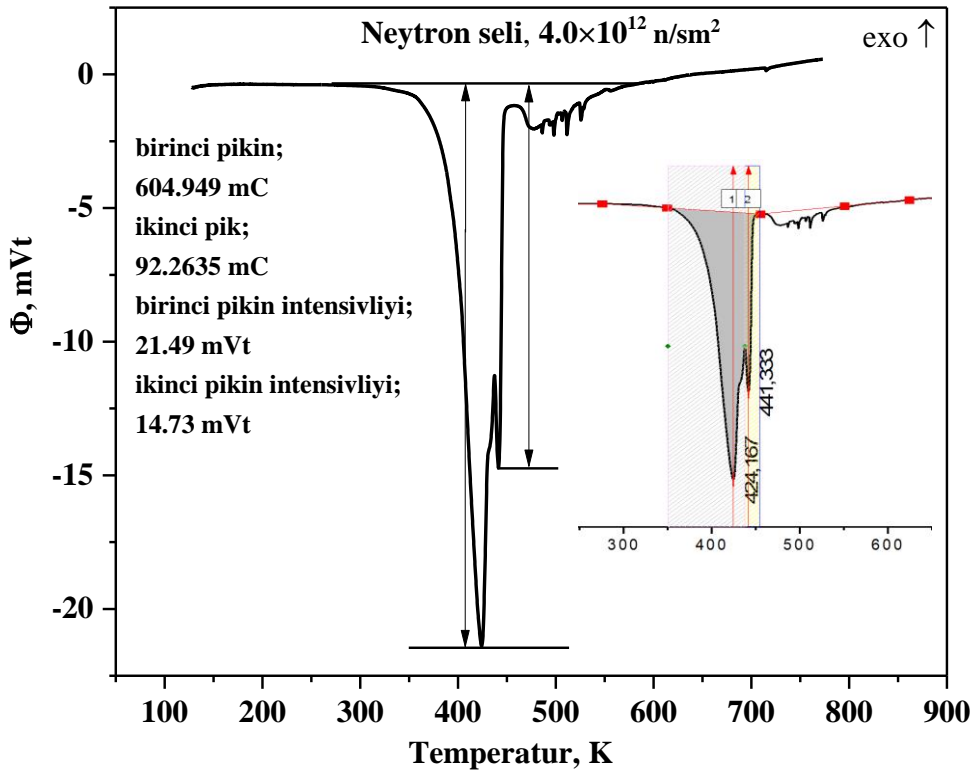
3.3 Termofiziki parametrlərin sürətli neytron selinin təsiri altında dəyişməsi

Termofiziki xassələrin analizi və təyin edilməsi üçün müasir analitik tədqiqatlara daxil olan DSC metodu “istilik seli” funksiyası, istilik tutumu və digər termofiziki parametrlərin təyin edilməsi üçün ən dəqiq metodlardan biri hesab edilməkdədir [237, 296, 300]. Temperatur funksiyası olan istilik seli bərk cisimlərdə keyfiyyət, təmizlik dərəcəsi, istilik çevrilmələri, kimyəvi reaksiyalar, termodinamik parametrlər, enerji itgisi və o cümlədən istilik selinin ötürmə mexanizminin təyin edilməsində geniş istifadə olunmaqdadır [68, 200]. (3.3) tədqiqat başlığında sürətli neytronlarla müxtəlif sel sıxlıqlarında şüalandırılmış B_2O_3 , B_4C , B_6Si və BN kristallarında istilik sel funksiyası, istilik tutumu və termodinamik funksiyaların dəyişməsi tədqiq olunmuş, fəsilə yalnız B_2O_3 və BN analiz nəticələri göstərilmişdir.

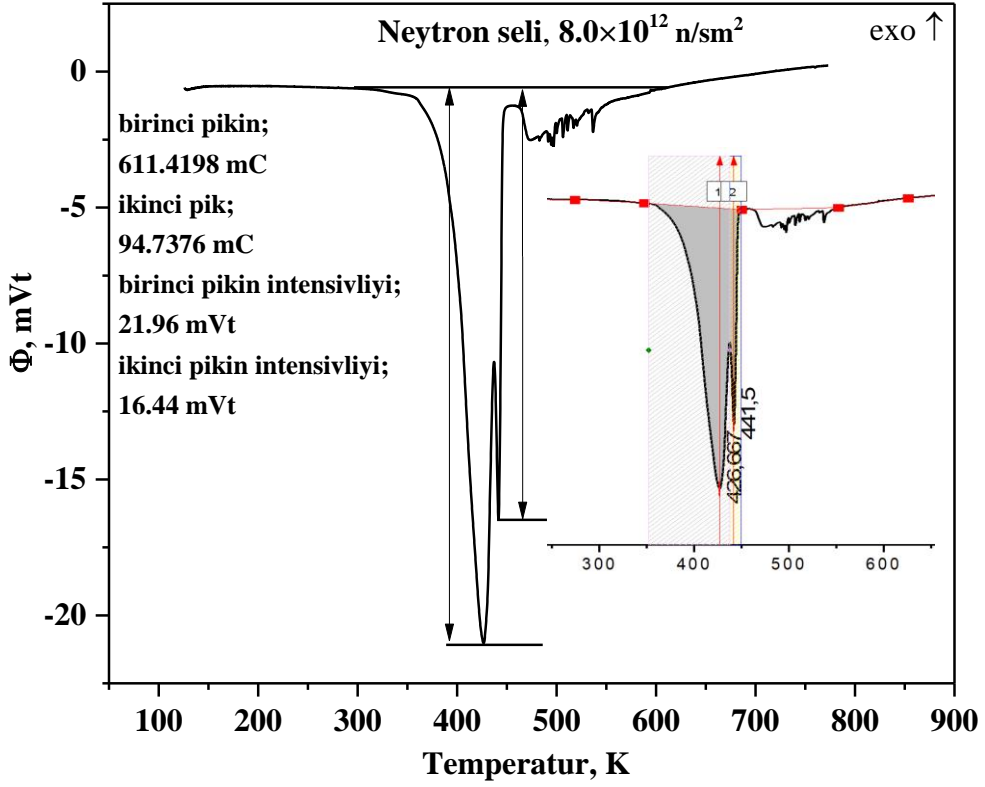
Şəkil 3.3.1-3.3.6-da 4.0×10^{12} n/cm², 8.0×10^{12} n/cm², 1.3×10^{13} , 4.0×10^{14} n/cm² və 1.0×10^{15} n/cm² neytron selində şüalandırılmış B_2O_3 kristalının $100 \leq T \leq 800$ K temperatur intervalında istilik selini xarakterizə edən spektrlər verilmişdir.



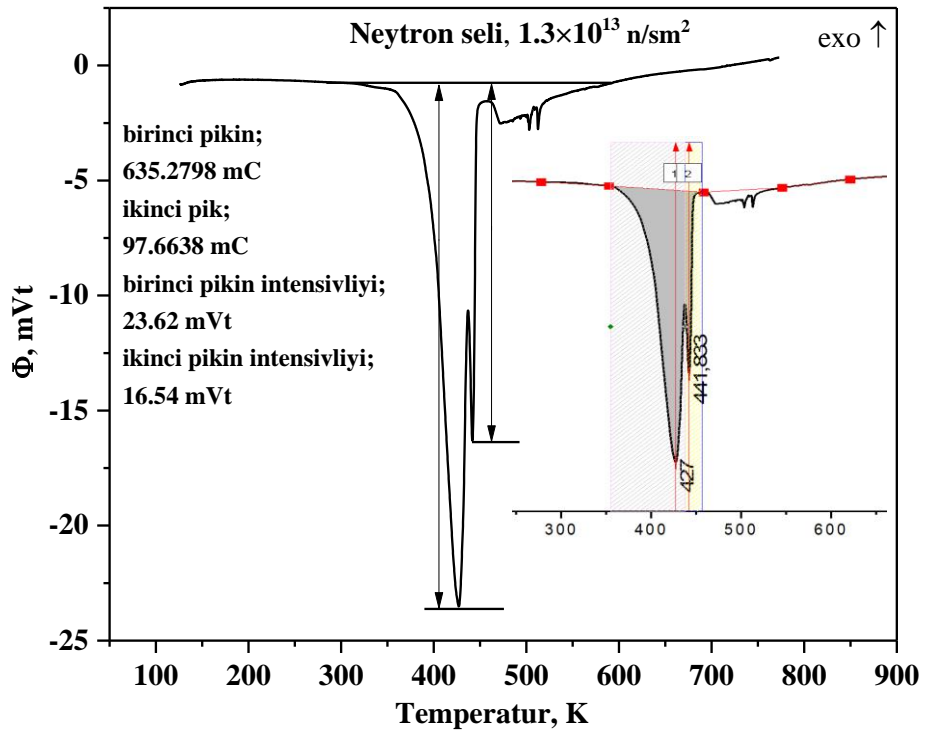
Şəkil 3.3.1. Şüalanmamış B_2O_3 kristalının $100 \leq T \leq 800$ K temperatur intervalında DSC spektri.



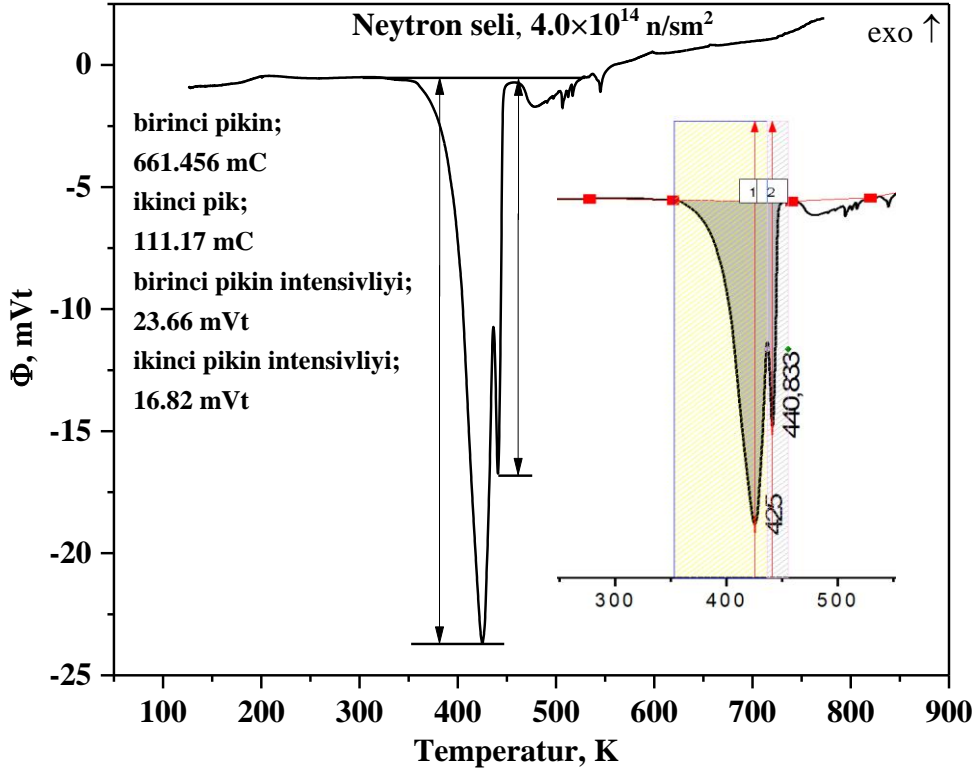
Şəkil 3.3.2. 4.0×10^{12} n/sm² neytron selində şüalandırılmış B_2O_3 kristalın $100 \leq T \leq 800$ K temperatur intervalında DSC spektri.



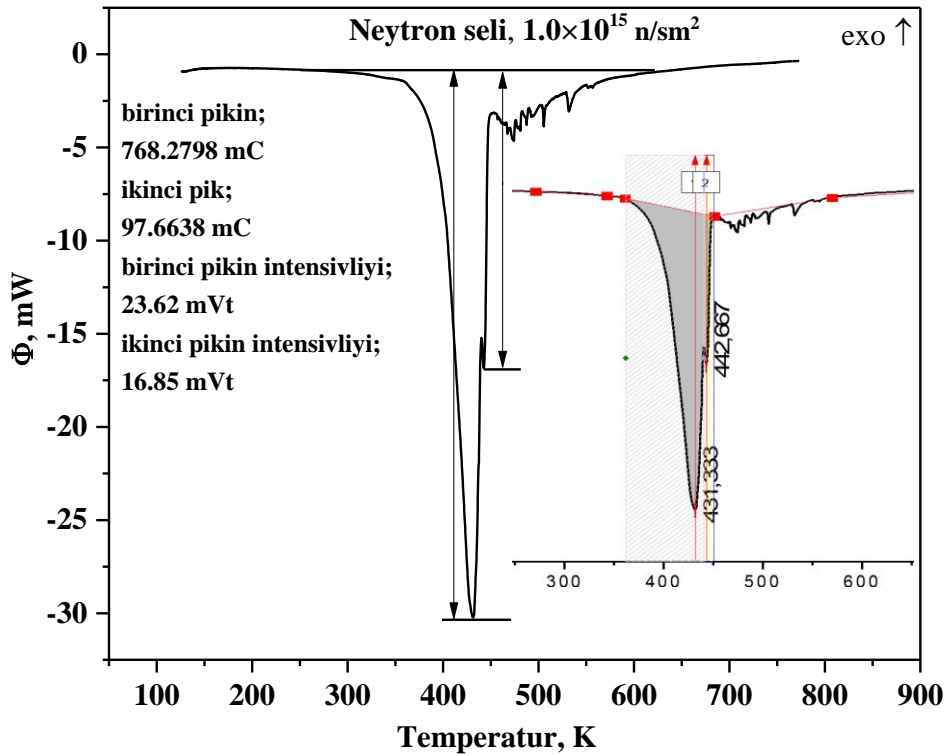
Şəkil 3.3.3. 8.0×10^{12} n/sm² neytron selində şüalandırılmış B₂O₃ kristalın $100 \leq T \leq 800$ K temperatur intervalında DSC spektri.



Şəkil 3.3.4. 1.3×10^{13} n/cm² neytron selində şüalandırılmış B₂O₃ kristalın $100 \leq T \leq 800$ K temperatur intervalında DSC spektri.



Şəkil 3.3.5. 4.0×10^{14} n/sm² neytron selində şüalandırılmış B₂O₃ kristalın $100 \leq T \leq 800$ K temperatur intervalında DSC spektri.

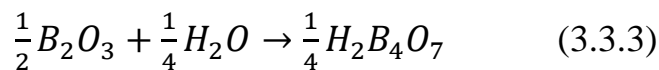
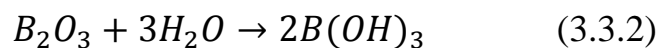


Şəkil 3.3.6. 1.0×10^{15} n/sm² neytron selinin şüalandırılmış B₂O₃ kristalın $100 \leq T \leq 800$ K temperatur intervalında DSC spektri.

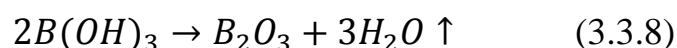
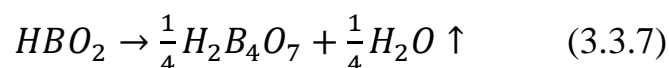
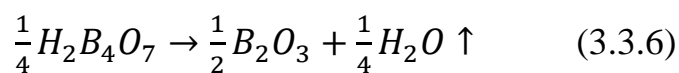
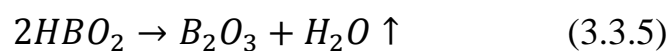
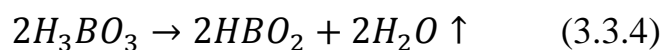
Nano B_2O_3 kristalı üçün istilik seli funksiyasının kinetikasını üç hissəyə bölmək olar.

- $422 \leq T \leq 443$ K - HBO_2 və $B(OH)_3$ nümunələrinin parçalanma reaksiyası
- $456 \leq T \leq 600$ K - H_2O və OH qruplarının parçalanma reaksiyası
- $T \geq 600$ K sabit temperatur intervalı və yaxud dayanıqlı oblast

Temperaturun 443 K qiymətinə qədər dublet endo effektləri meydana gəlir, 456 K -dən sonra istilik sürəti daha mürəkkəb və yaxud çox pikli şəkildədir. Yekun proses sabit temperatur aralığına keçir. Ədəbiyyat nəticələri də göstərir ki, bor oksid kristalında $B_2O_3 \leftrightarrow HBO_2 \leftrightarrow B(OH)_3$ mexanizmi ilə keçid reaksiyaları baş verir [96, 117]. Nəzərə alsaq ki, B_2O_3 kristalının sintez və saxlanma şəraitindən asılı olaraq açıq havada su molekulları ilə müxtəlif “thermochemical” (aşağıda qeyd olunmuş keçid mexanizmləri üzrə) kimyəvi reaksiyalar baş verir [117].

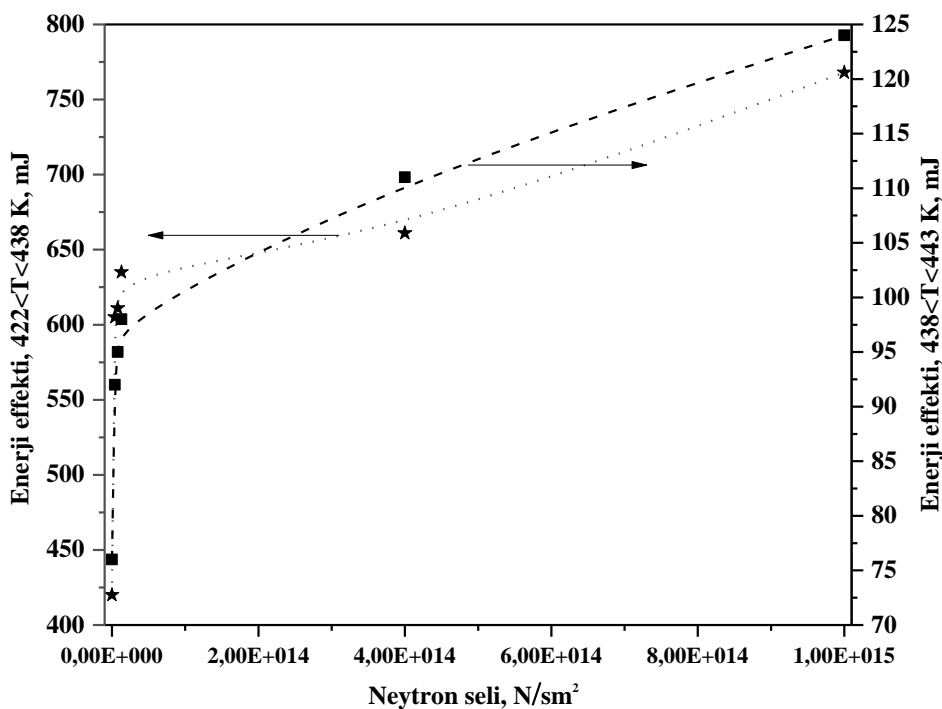


Temperatur faktorunun təsiri nəticəsində isə aşağıdakı parçalanma reaksiyalarının baş verir.



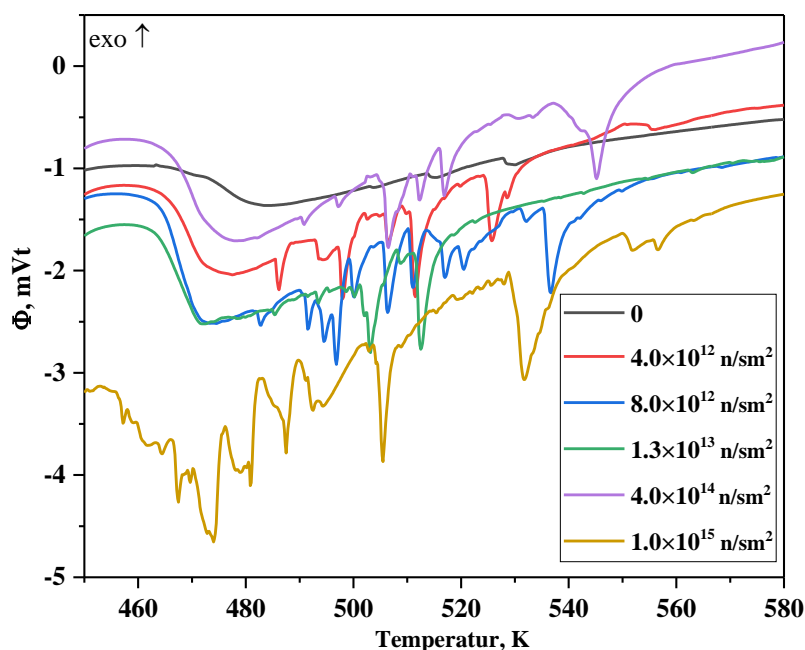
Yuxarıda verilən bütün ədəbiyyat nəticələrini nəzər alsaq, şüalanmamış və neytron selinin təsiri altında şüalanmış bor oksid kristallarında baş verən hidratatsiya və dedidratatsiya reaksiyaların mexanizmi daha da mürəkkəb halda olması aydın

görünməkdədir. Kristalda dublet effektlər 422 K-də $\text{HBO}_2 \rightarrow \text{B}_2\text{O}_3$ parçalanma reaksiyasını və 438 K-də boric acid $\text{B}(\text{OH})_3 \rightarrow \text{B}_2\text{O}_3$ mexanizmi uzrə baş verən parçalanma reaksiyasını göstərir. Əsas parçalanma məhsulu OH qrupunun və struktur suyun ayrılması ilə gedən mürrəkəb reaksiyalarıdır. Şəkil 3.3.1-3.3.6-dən görüldüyü kimi, nano bor oksid kristalında parçalanma reaksiyasını xarakterizə edən dublet effektlərin sahələri neytron selindən asılı olaraq artır. Şüalanmamış kristalda formalaşmış pikin intensivliyi müxtəlif sel sızlıqlarında şüalandırılmış kristallarla müqayisədə 1.614 dəfə kiçikdir. Effektin sahəsinin və neytron selinin artması kinetik prosesin tamamlanması üçün böyük miqdarda enerji tələb olunduğunu göstərir. Hər bir neytron selindən sonra sərbəst halda OH qrupu və radikallar artır ki, temperaturun təsiri altında reaksiya məhsullarının daha da sürətli fazada parçalanması baş verir. Neytron selinin qiymətindən asılı olaraq kristalda $422 \leq T \leq 438$ K və $438 \leq T \leq 443$ K temperatur intervalında dublet effektlərdə parçalanma reaksiyası üçün tələb olunan enerjinin dəyişməsi şəkil 3.3.7-də verilmişdir.



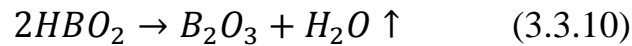
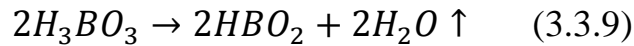
Şəkil 3.3.7. $422 \leq T \leq 438$ K və $438 \leq T \leq 443$ K temperatur intervalında şüalanmamış və müxtəlif neytron seli ilə şüalandırılmış B_2O_3 nano kristalında enerji effektləri.

Aydın görünür ki, neytron selinin qiymətindən asılı olaraq $4.0 \times 10^{12} \text{ n/sm}^2 \leq n \leq 1.3 \times 10^{13} \text{ n/sm}^2$ intervalında faza çevrilmə enerjisi bir-birinə yaxındır. Lakin, $n \geq 4.0 \times 10^{14} \text{ n/sm}^2$ neytron selinin qiymətindən başlayaraq faza keçidinin enerjisi xətti artır. Bir daha aydın olur ki, mürəkkəb mexanizimlə baş verən çevrilmə reaksiyasında neytron seli sərbəst halda su molekullarının parçalanmasını və hidooksid qruplarının sayını artırır. Yüksək neytron selində su buxarlarının və OH qruplarının parçalanma reaksiyası tamamlanmır və enerjinin dəyişməsi stabil olur. Bunun üçün isə yüksək neytron selinə malik tədqiqat nüvə reaktorunda təcrübə tədqiqatların yerinə yetirilməsinə ehtiyac duyulur. Şəkil 3.3.8-də $450 \leq T \leq 580 \text{ K}$ temperatur intervalında neytron selindən asılı olaraq kristalda ardıcıl və müxtəlif növ qarşılıqlı təsirdə olan fərqli qrupların mürəkkəb parçalanma reaksiyalarının kalorimetrik spektrləri verilmişdir.



Şəkil 3.3.8. $450 \leq T \leq 580 \text{ K}$ temperatur intervalında şüalanmamış və müxtəlif neytron seli ilə şüalandırılmış B_2O_3 kristalında istilik selinin effektləri.

Şəkil 3.3.8.-də aydın görünür ki, yüksək neytron seli parçalanma mərkəzlərinin sayını artır və $450 \leq T \leq 580 \text{ K}$ temperatur intervalında yüksək kimyəvi aktivliyə malik nano bor oksid kristalının səthində $\text{B}_2\text{O}_3 \rightarrow \text{H}_3\text{BO}_3$ mexanizmi üzrə baş verən ardıcıl çevrilmə reaksiyaları baş verir.



Şəkil 3.3.8-də neytron selinin artması ilə yeni endo mərkəzlər formalaşır. Neytron şüalanma hesabına formalaşmış yeni endo mərkəzlər temperaturun təsiri altında hidrat və hidrooksid qrupunun parçalanma fazasını təcrübi göstərir. Şüalanmamış kristalda mərkəzi piki 503, 515, və 530 K temperaturla uyğun gələn endo effektlərin sayı şüalanmadan sonra artır. Şüalanma selindən asılı olaraq endo effektlər temperaturun kiçik 457 K və yüksək 556 K qiymətlərinə doğru dəyişməsi yuxarıda söylənilən fikirləri təsdiq edir. Nano kristal nümunələrdə istilik tutumunun kalorimetrik metod ilə təyini və istilik selinin ortalama qiymətinin təyin olunması haqqında bəzi ədəbiyyatlarda məlumat verilmişdir [45]. Lakin istilik selinin təcrübi qiymətinin təyin olunması üçün bir sıra faktorlardan asılılığı nəzərə alınmalı, dəqiq təyin olunmuş istilik seli istilik tutumunun və termodinamik funksiyaların qiymətlərinin hesablanmasına təsir edir. Aşağıda sadalan hər bir faktor istilik selinin həqiqi qiymətinin dəqiq təyin olmasına təsir edir.

- İstilik sel funksiyasının nümunəsiz pəndəki dinamikası- $\Phi_{boş}$
- İstilik sel funksiyasının standart nümunə üçün dinamikası - $\Phi_{standart}$
- Həm standart həm də kütlə olmadan nümunənin istilik selinin dinamikası- $\Phi_{cəm}$
- Standart və müəyyən kütləli nümunənin istilik selinin iyməti- $\Phi_{təcrübi}$
- İstilik selinin itgisi- Φ_{itgi}

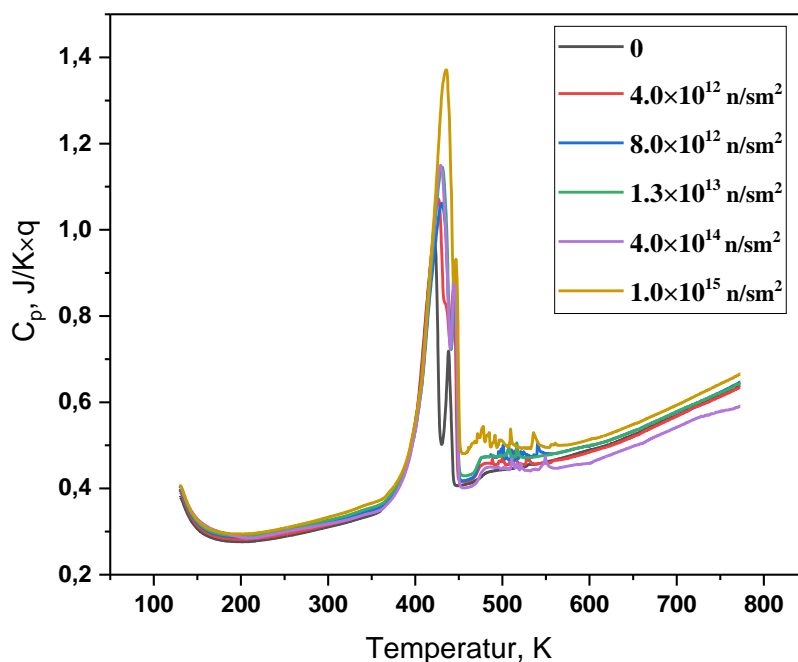
Bütün bunları nəzərə alsaq istilik selinin qiyməti üçün aşağıdakı ifadəni almış olarıq.

$$\Sigma\Phi = \Phi_{boş} + \Phi_{stan} + \Phi_{cəm} + \Phi_{təcr} \quad (3.3.11)$$

$$C_p = K_{\Phi}(T) \cdot \frac{\Phi_N - (\Phi_{boş} + \Phi_{cəm})}{\Phi_S - (\Phi_{boş} + \Phi_{cəm})} \cdot \frac{m_S}{m_N} \cdot C_S + \frac{m_S - m_N}{m_N} \cdot C_P \quad (3.3.12)$$

$$K_{\Phi}(T) = \frac{\Phi_{həqiqi}}{\Phi_{təcr} - \Phi_{boş}} \quad (3.3.13)$$

Burada $K_{\Phi}(T)$ kalibrasiya faktoru istilik funksiyasından və temperaturdan asılıdır; m_S - standartın kütləsi, m_N -nümunənin kütləsi, C_S -standart və tədqiq olunan nümunənin istilik tutumu, C_P -pənin istilik tutumudur. Bunula paralel istilik selinin temperaturdan asılı olan funksiyalarında həqiqi qiymət, kalibrasiya faktoru və istilik tutumunun təyini ilə termodinamik funksiyalara keçid mümkündür. Şəkil 3.3.9-də $300 \leq T \leq 600$ K temperatur intervalında nano bor oksid kristalında baş verən parçalanma reaksiyası üçün xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığı verilmişdir. Eyni ilə istilik selinin temperatur asılılığında baş verən kinetika istilik tutumunun temperatur asılılığında da özünü göstərməkdədir. Kiçik temperaturlarda istilik selinin təyini zamana xətlərin böyük olmasını nəzərə alaraq, bir sıra riyazi hesablamalarda xətanın düzgün təyin olunmaması, daşıyıcı qazın istilik selinin böyük hissəsini neytrallaşdırması kimi səbəblərdən baş verməsi mümkündür.



Şəkil 3.3.9. $100 \leq T \leq 600$ K temperatur intervalında şüalanmamış və müxtəlif neytron seli ilə şüalandırılmış B_2O_3 kristalında istilik tutumu

İstilik tutumunun temperatur asılılığında 100 K kristalın istilik tutumu şüalanmamış nümunə üçün 0.310 C/K×q müxtəlif 4.0×10^{12} n/sm², 8.0×10^{12} n/sm², 1.3×10^{13} n/sm², 4.0×10^{14} n/sm² və 1.0×10^{15} n/sm² neytron seli ilə şüalandırmadan sonra uyğun olaraq 0.315 C/K×q, 0.317 C/K×q, 0.322 C/K×q, 0.326 C/K×q və 0.333 C/K×q

təyin olunmuşdur. Temperaturun 600 K qiymətində şüalanmamış kristalın istilik tutumu $0.458 \text{ C/K}\cdot\text{q}$, seçilmiş neytron seli ilə şüalandırılmış nümunələr üçün isə uyğun olaraq $0.483 \text{ C/K}\cdot\text{q}$, $0.488 \text{ C/K}\cdot\text{q}$, $0.497 \text{ C/K}\cdot\text{q}$, $0.501 \text{ C/K}\cdot\text{q}$ və $0.513 \text{ C/K}\cdot\text{q}$ qədər artır.

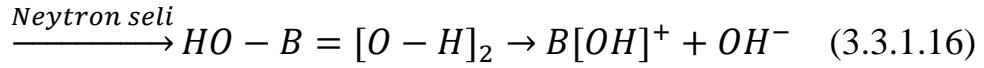
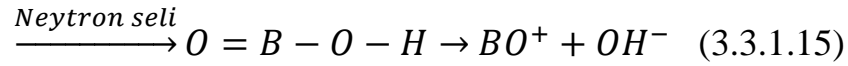
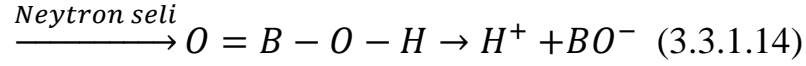
Neytron selinin təsiri altında kristalda elastik səpilmə və radiasiya tutulması nəticəsində nano bor oksid kristalının quruluşunda müxtəlif kimyəvi və fiziki eyni zamanda nüvə çevrilmələr baş verir. Məhz, neytron selinin təsiri ilə nüvələr arası qarşılıqlı təsir prosesi, B^{10} izotopu ilə baş verən çevrilmələr və elastiki səpilmə nəticəsində sistemə verilən enerjinin miqdarı neytron selindən asılı olaraq xətti artır. Artan enerji miqdarı hidrat və hidrokسيد qrupunun sərbəst, parçalanmış fazalarını yaradır ki, temperaturun təsiri altında sərbəst qrupların yaratdığı endo effektlər müşahidə etmək olur. Şüalanmanın seli yaranan yeni endo xarakterli effektlər üçün udulan enerjini artır (Cəvəl 3.3.1).

Cəvəl 3.3.1. Şüalanma selindən asılı olaraq yaranan yeni endo xarakterli effektlərdə udulan enerjinin qiymətləri

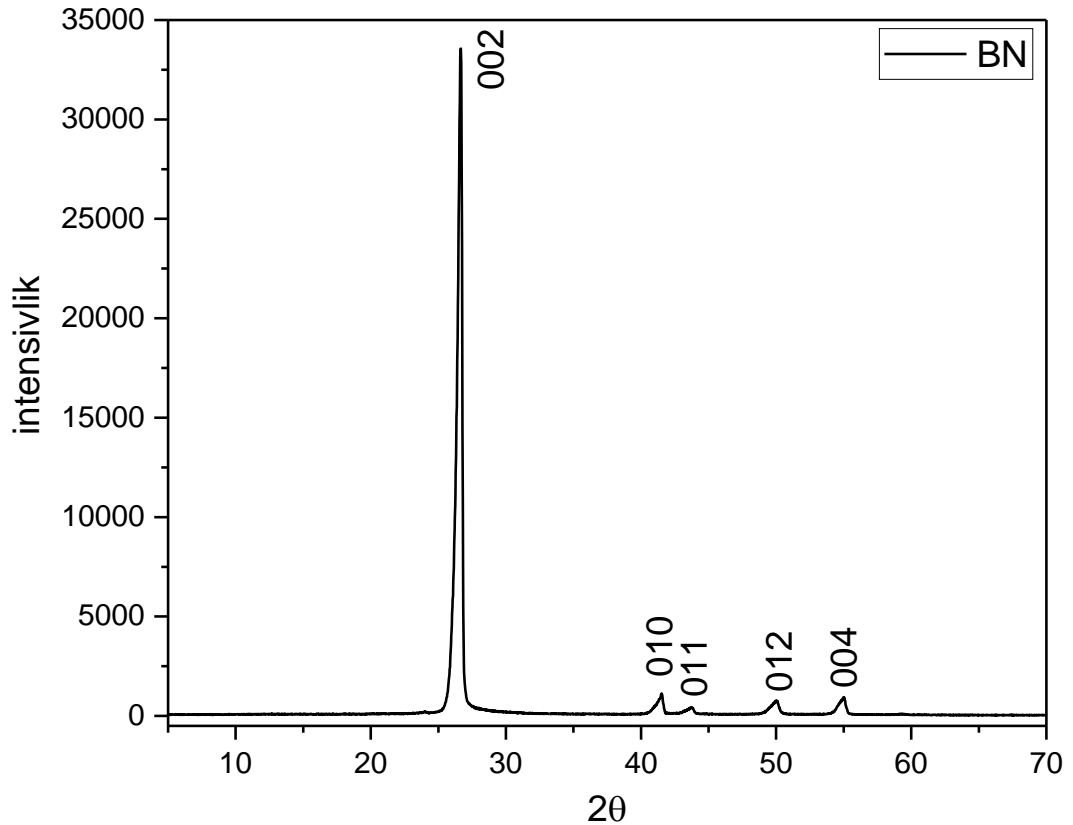
Kristal	Neytron seli	Faza keçidin entalpiyası, C/q
B_2O_3	şüalanmamış	118.095
	$4.0 \times 10^{12} \text{ n/sm}^2$	165.952
	$8.0 \times 10^{12} \text{ n/sm}^2$	168.095
	$1.3 \times 10^{13} \text{ n/sm}^2$	174.524
	$4.0 \times 10^{14} \text{ n/sm}^2$	183.809
	$1.0 \times 10^{15} \text{ n/sm}^2$	201.028

Maksimum neytron selində ($1.0 \times 10^{15} \text{ n/cm}^2$) şüalanma göstərir ki, səthdə radiasiyaya davamlı hidrokسيد qrupları struktur quruluşda anion və kation halda qalmaqda davam edir. Bu onu göstərir ki, yüksək kimyəvi aktivliyə malik nano bor oksid kristalları radiasiyaya davamlı OH^- hidrokسيد qrupunu saxlaya bilir. Məlumdur ki, müxtəlif enerjili neytronların mühidə nümunə ilə elastiki səpilməsi zamanı enerjinin ötürülmə mexanizmi qarşılıqlı təsirdə olduğu nümunənin atom kütləsindən asılıdır. Həmdə B^{10} izotopu ilə qarşılıqlı təsirdən əlavə 2.4 MeV enerjinin ayrılması və

qarşılıqlı təsir zamanı neytron selinin enerji itgisi hidrogen nüvəsi və su molekulları üçün maksimum qiymətə malikdir. Aydın şəkildə ifadə etsək neytronun enerjisi B_2O_3 quruluşunda formalaşan $B(OH)_3$ və HBO_2 birləşmələrində hidrogen və su molekullarına aşağıdakı mexanizimlə ötürülür və parçalanma prosesi baş verir.



Reaksiya məhsulu kimi yaranmış H^+ atomları müəyyən miqdarda həcmdə neytron selinin təsiri ilə formalaşmış aktiv mərkəzlər tərəfindən tutulur. Digər tərəfdən radikal şəkildə H^+ atomları birləşərək molekulyar hidrogen formasına keçir və parçalanma məhsulu kimi ayrılır.

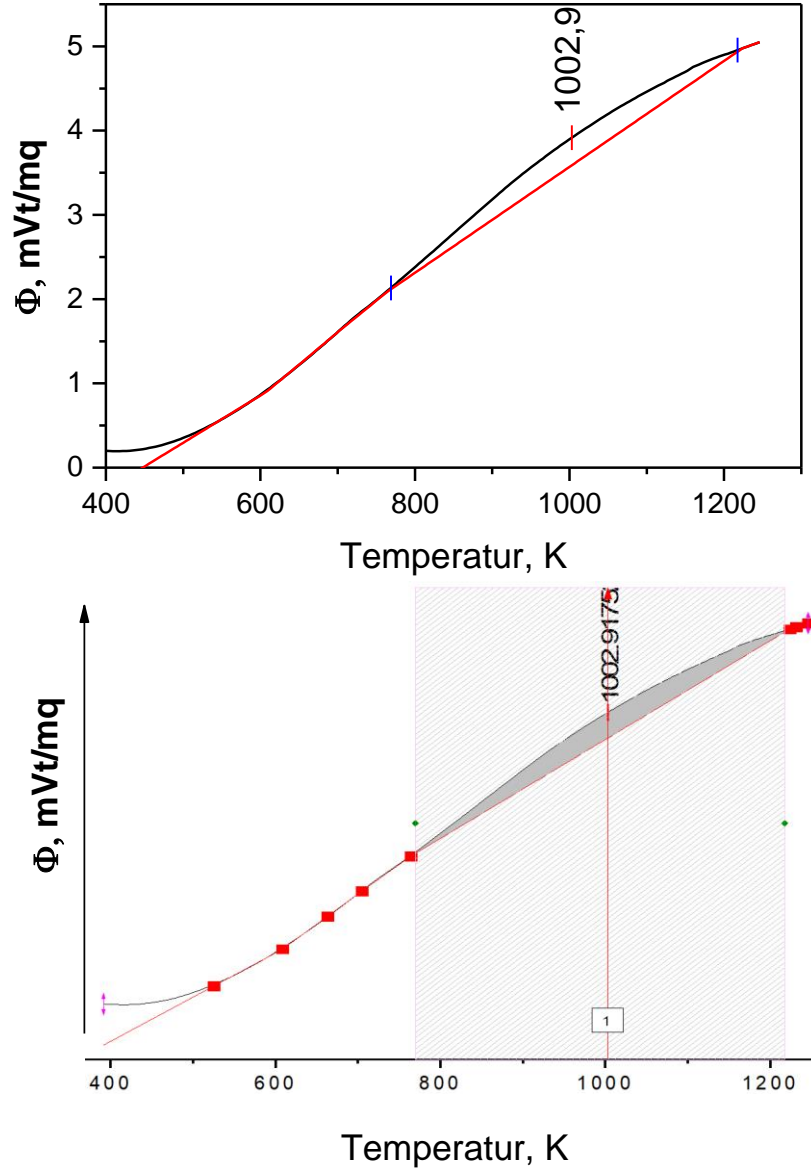


Şəkil 3.3.10. BN kristalının rentgen difraksiya spektri.

Altıbucaqlı bor nitrid (h-BN) mikro kristalının difraksiya spektri şəkil 3.3.10-da göstərilmişdir. Difraksiyası spektrlərinə analitik yaxınlaşma və faza identifikasiyasından istifadə olunmaqla kristal strukturun ölçüləri haqqında məlumat əldə etmək mümkün olmuşdur. Analiz nəticələri göstərir ki, bor nitrid kristal hissəciklərinin quruluş və səth modifikasiyasında dəyişiklik mövcud deyil. $2\theta = 26.6, 41.6, 43.8, 50.1, 55.1$ və 75.8 -dəki pikləri heksaqonal bor nitridi xarakterizə edir və bor nitrid üçün mövcud müstəvi difraksiyalarına aiddir. Piklər borun altıbucaqlı fazasının (002), (100), (101), (102), (004) və (110) müstəvilərinə tam uyğundur. BN-in qəfəs parametrləri (Şerrer düsturundan istifadə etməklə) müvafiq olaraq 2.5092 nm və 6.6762 nm olduğu, fəza qrupu: P-6, $a=2,5092$; $c= 6,6762$; $\alpha= 90^\circ$; $\gamma=120^\circ$ müəyyən edilmişdir. Neytron detektoru kimi [136, 159, 182, 217, 230, 276] geniş istifadə olunan bor nitrid birləşməsinin kristal quruluşunda neytron selinin təsiri altında B-N kimyəvi rabitənin dağılması və rabitələr arası müxtəlif defektlərin formalaşması baş verir [279]. Yaranmış hər bir defekt energetik xarakterinə görə “stored energy və yaxud saxlanılan enerji” adlandırmaq olur. Saxlanılan enerji qiymətinin dəyərləndirilməsi üçün ən yaxşı metodlardan biri temperaturun təsiri altında istilik seli funksiyasını analiz etməkdən ibarətdir. Temperaturun təsiri altında kristal quruluşdakı energetik səviyyələr üzrə qruplara bölünən defektlər aktivləşmə enerjisinə görə müxtəlif energetik səviyyələrə migrasiya edirlər. Bir qism defektlərin kristal quruluşda hərəkətliliyi geniş temperatur intervalında baş verir. Lakin müəyyən tip defektlər var ki, onların kristal quruluşda migrasiyası konkret temperatur intervalında dəyişir. Neytron selinin təsiri altında yaranan defektlərin “rekombinasiyası” prosesi kifayət qədər yüksək sürətlidir [104]. Temperatura 300°C kimi təyin olunan toplanan enerji ədəbiyyatda “two-hundred-degree-peak” adlandırılır [46]. Yüksək temperaturlarda toplanan enerjinin qiyməti bir başa prosesin aktivləşmə enerjisindən asılıdır [109]. Viqner enerjisinin qiyməti temperatur və sərbəst buraxılan defektin qiymətindən asılıdır. Əlavə olaraq, buraxılan enerjinin kinetikasi temperatur və şüalanma selinin böyük təsiri vardır. Buraxılan enerjinin riyazi ifadəsini aşağıdakı tənliklə yazmaq olar.

$$\frac{\partial S}{\partial \tau} = f \left\{ D, A(S) e^{-\frac{E_A}{kT}} \right\} \quad (3.3.1.17)$$

Burada S verilmiş zaman intervalında Viqner enerjisinin dəyişməsi, $f(D)$ neytron süalanması zamanı, $A(S)$ -eksperimental yolla təyin olunmuş əmsal, E aktivləşmə enerjisi, k Bolsman sabitinin qiyməti (8.61×10^{-5} eV/K), T temperatur və τ eksperiemtin baş verdiyi zaman müddətidir.



Şəkil 3.3.11. Şüalanmamış bor nitrid kristalının istilik seli funksiyasının analizi; Qara xətt- istilik axını funksiyası, qırmızı iz- kalorimetrik əyrilərin təməl xətti və Viqner effektinin sahəsi.

Şəkil 3.3.11-də istilik axını funksiyasının ölçülmüş DSC əyriləri, DSC əyrilərinin əsas xətti, DSC -nın pik mərkəzləri, şüalanmamış bor nitrid kristalının

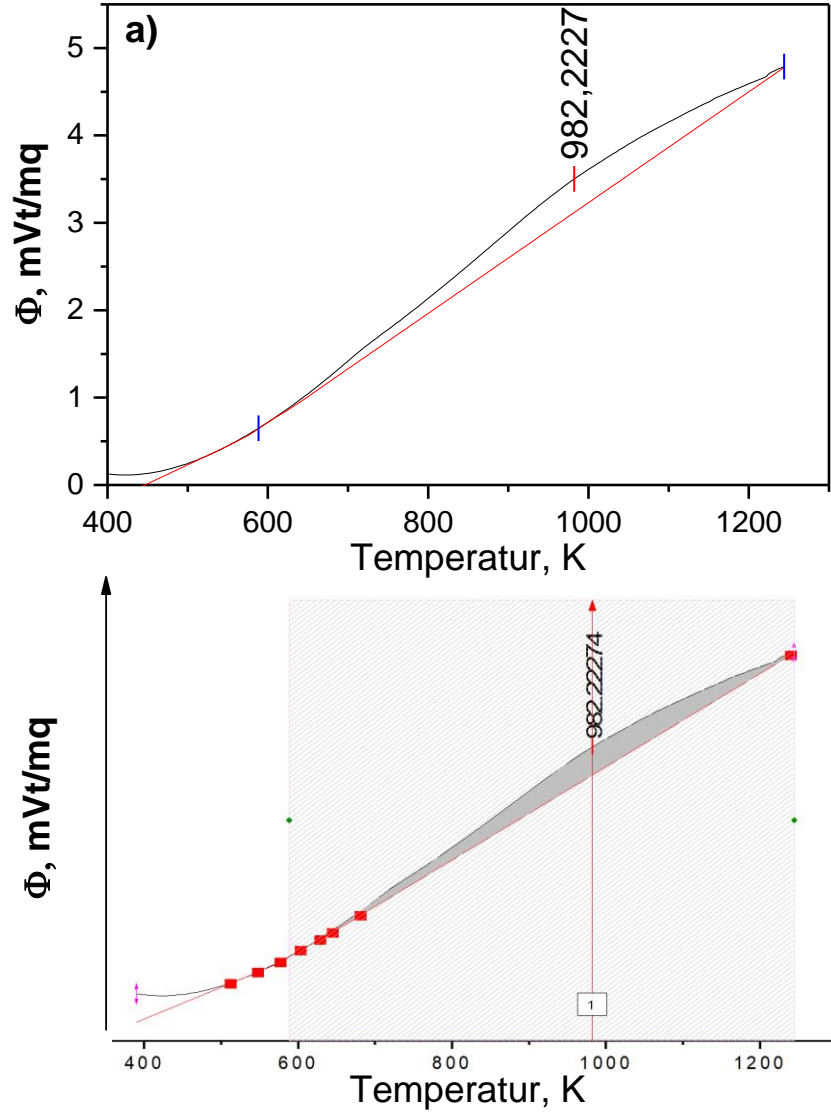
$400 \leq T \leq 1300$ K temperatur aralığında əsas mərkəzləri və 5 °C/dəq istilik sürəti ilə silikon karbid pənlərdə təsirsiz Ar qazının axını altında göstərilmişdir. Temperaturun 400 K qiymətinə qədər istilik seli funksiyası dəyişmir, bununla birlikdə, sərbəst buraxılan Viqner enerjisinin kinetikasi bir bölgəni əhatə edir və $770 \leq T \leq 1220$ K temperatur intervalında "Viqner enerji" təyin olunur. Bor nitridində baş verənlər və ilkin kristal quruluşda defekt mərkəzləri hesabına formalaşır. Bu nəticələr [46] və digər müəlliflərin nəticələrində verilmişdir [45]. Cədvəl 3.3.2-də heksaqonal bor nitridə aid olan bir sıra nəticələr tədqiqat işində alınmış nəticələr ilə uzlaşdırılmışdır.

Cədvəl 3.3.2. Altıbucaqlı bor nitrid kristalında müxtəlif ədəbiyyat nəticələrindən alınan Viqner enerjisinin qiyməti.

Nümunə	Mərkəzi pik, K	Baza qiyməti	Viqner enerjisi, C/q	Viqner enerjisi, kC/mol	Viqner enerjisi, eV/atom	Ədəbiyyat
h-BN	623	300-1173 K	93.89	233.22	56	[44-46]
	598	525-584 K	95.85	245.89	58.9	[44-46]
	1002.9	770-1220 K	94.49	239.76	57.89	Tədqiqat işi

DSC analizlərinin nəticələri (oksidləşmə reaksiyası daxil) göstərir ki, bor nitridin kristal stukturunda sintez şəraitindən və yaxud digər təsirlərdən həcmdə və yaxud səthində xarakterik defektlər formalaşır. Defektlərin formalaşma mexanizmindən və onların miqراسiyasından asılı olaraq Viqner effektləri fərqli temperatur intervalında baş verir. Viqner effektinin fərqli mexanizmlərlə dəyişməsi eksperimental şəraitdən asılıdır. Birinci amil kimi müxtəlif istilik sürətlərində N_2 , O_2 , Ar və vakuüm mühitində yerinə yetirilən bütün təcrübələr fərqli enerjilərin yaranmasına səbəb olur. Vakuüm mühitində yerinə yetirilən bütün eksperimental tədqiqatlarda Viqner enerjisinin qiyməti minimum olur. Əlavə olaraq, istilik selinin qiyməti maksimum 5 mW-ə qədər artır. Müəyyən olunmuşdur ki, $770 \leq T \leq 1220$ K temperatur intervalında mərkəzi piki

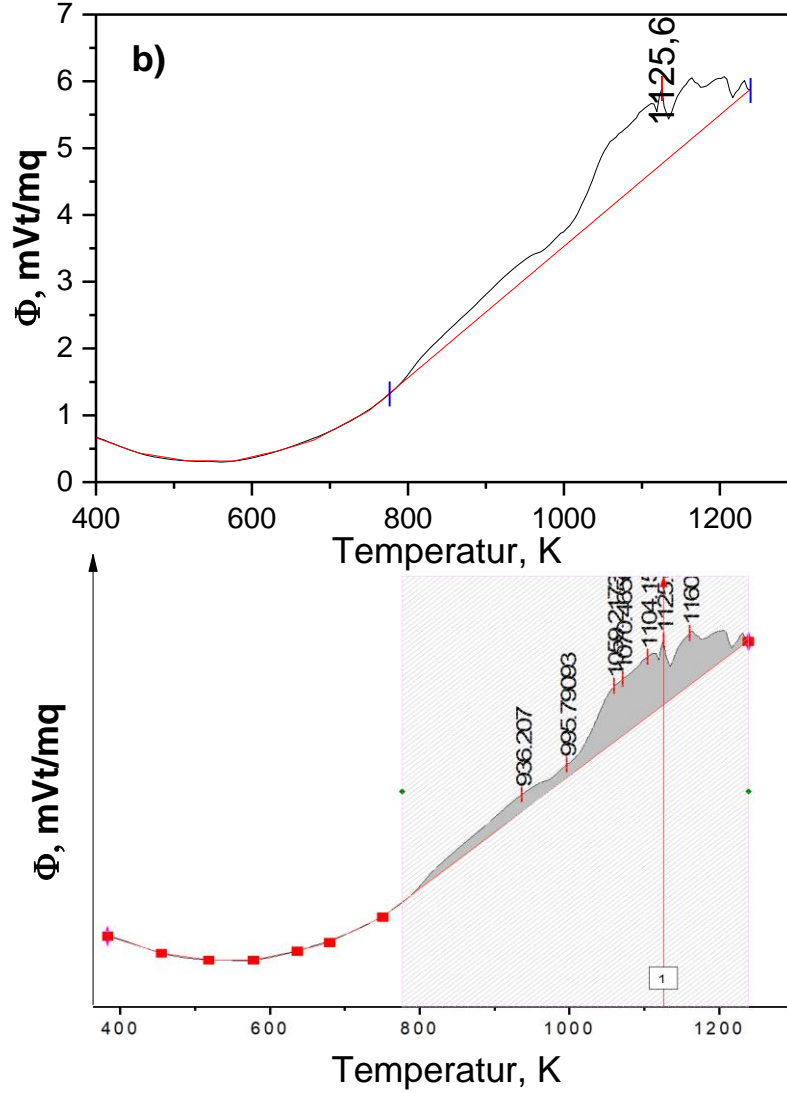
1002 K olan şüalanmamış kristalda Viqner enerjisinin qiyməti 94.49 C/q-a uyğundur və bu qiymət ədəbiyyat nəticələri ilə uyğunluq təşkil edir [46].



Şəkil 3.3.12(a). 8.0×10^{12} n/sm² neytron selində şüalandırılmış bor nitrid kristalında istilik seli funksiyasının analizi; Qara xətt- istilik axını funksiyası, qırmızı iz-kalorimetrik əyrilərin təməl xətti və Viqner effektinin sahəsi.

Şəkil 3.3.12(a)-da 8.0×10^{12} n/sm² neytron selində şüalandırılmış bor nitridin DSC əyriləri (istilik axını funksiyasının DSC əyriləri, DSC əyrilərinin başlanğıcı, DSC -nin pik mərkəzləri və baza qiymətləri) təqdim edilmişdir. 440 K temperatúra qədər istilik selinin qiyməti sabit 0.13 mVt bərabərdir. Lakin $T \geq 440$ K temperaturundan başlayaraq mərkəzi piki 982 K olan istilik selinin qiyməti 4.77 mVt qədər artan yayılmış effektdir. $440 \leq T \leq 1240$ K temperatur

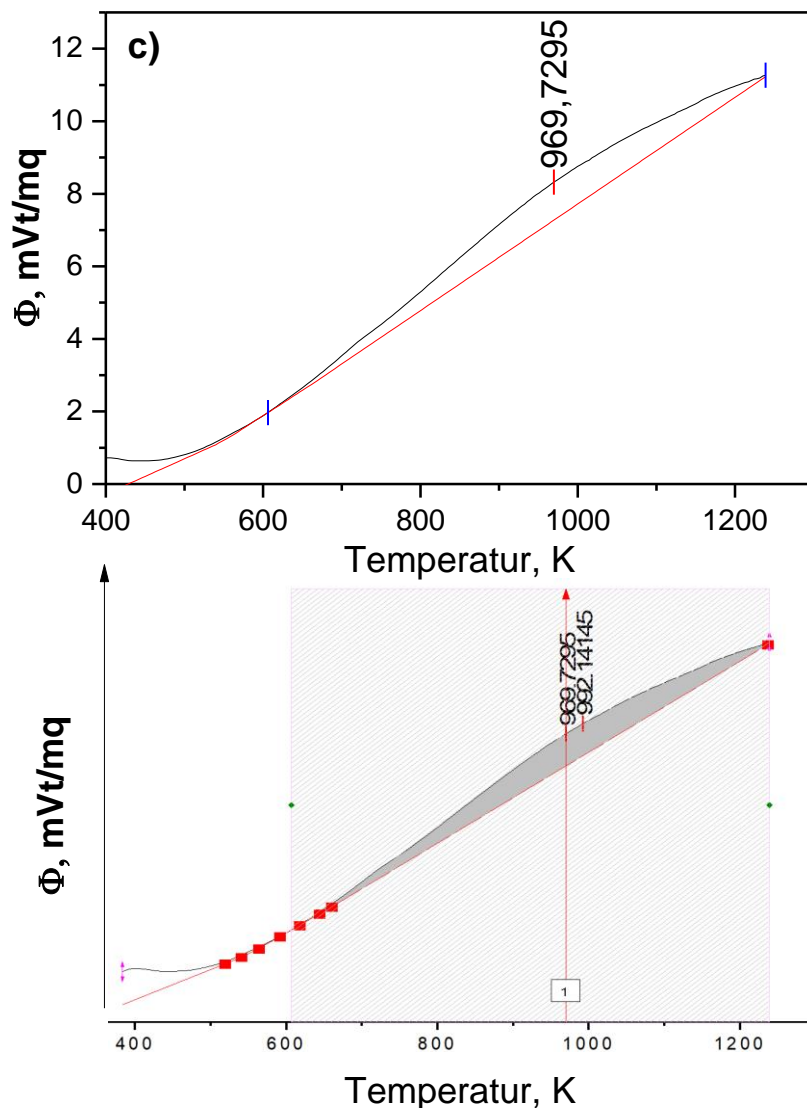
intervalında baza funksiyası ilə təcrübi funksiya arasında formalaşan sahənin qiyməti 133.106 C/q bərabərdir. Şəkil 3.3.12(b)-də $1.3 \times 10^{13} \text{ n/sm}^2$ neytron selində şüalandırılmış BN kristalını istilik funksiyasının temperatur asılılığı verilmişdir.



Şəkil 3.3.12(b). $1.3 \times 10^{13} \text{ n/sm}^2$ neytron selində şüalandırılmış bor nitrid kristalının istilik seli funksiyasının analizi; Qara xətt- istilik axını funksiyası, qırmızı izkalorimetrik əyrilərin təməl xətti və Viqner effektinin sahəsi.

580 K temperatúra qədər istilik selinin qiyməti 0.65 mVt-dan 0.32 mVt-a qədər azalır. $T \geq 580 \text{ K}$ temperaturdan başlayaraq istilik selinin qiyməti artaraq 6.04 mVt-a çatır. Seçilmiş neytron selində DSC əyrisində mərkəzi pik müxtəlif hissələrə bölünür. Ən intensiv pik (1125 K) şəkil 3.3.12-də göstərilmişdir. $580 \leq T \leq 1240 \text{ K}$ temperatur intervalında baza funksiyası ilə təcrübi funksiya arasında formalaşan sahənin qiyməti 207.98 C/q -a bərabərdir. Şəkil 3.3.12 (c)-də $4.0 \times 10^{14} \text{ n/sm}^2$ sel sıxlığında neytronlarla

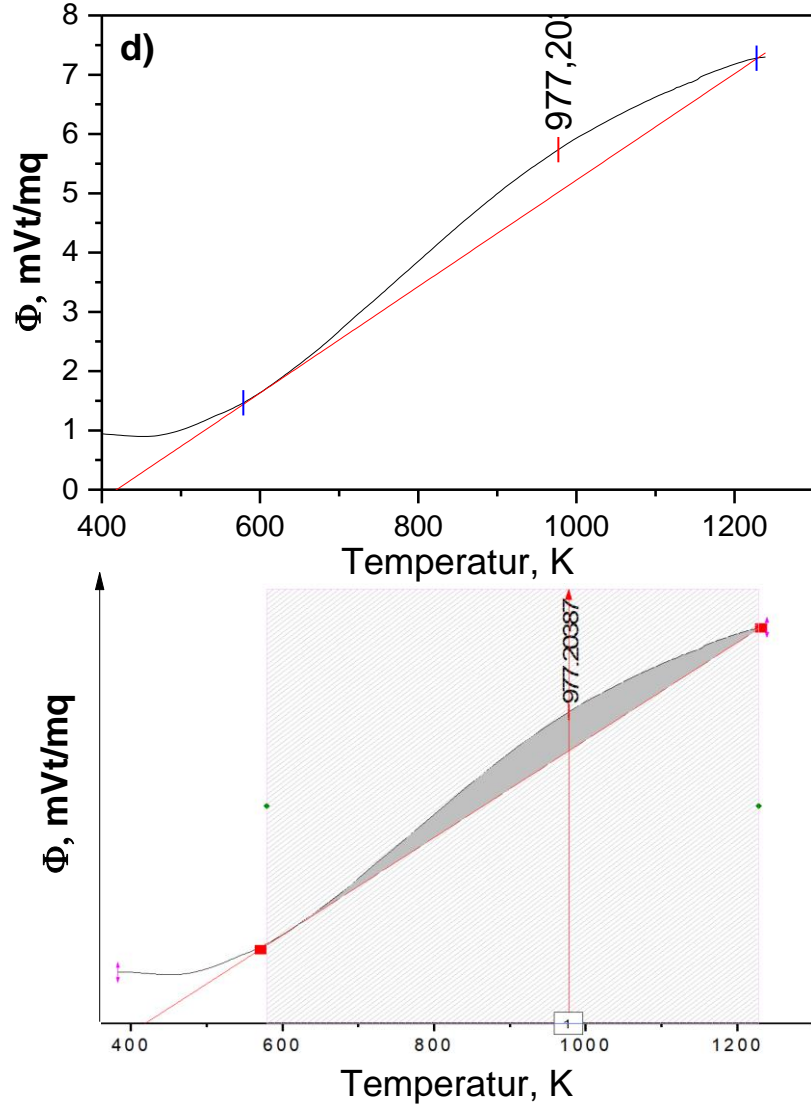
şüalandırılmış bor nitrid istilik selinin funksiyasının temperatur asılılığı təsvir edilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, BN sürətli neytronlarla şüalanmadan sonra mərkəzi piki 969 K olan və $440 \leq T \leq 1240$ K temperatur intervalında baza funksiyası ilə təcrübi funksiyası arasında formalaşan sahənin qiyməti 259.364 J/q-a bərabərdir.



Şəkil 3.3.12(c). 4.0×10^{14} n/sm² neytron selində şüalandırılmış bor nitrid kristalının istilik seli funksiyasının analizi; Qara xətt- istilik axını funksiyası, qırmızı iz-kalorimetrik əyrilərin təməl xətti və Viqner effektinin sahəsi.

Maksimum dozada şüalandırılmış (1.0×10^{15} n/sm²) bor nitrid kristalında istilik selinin qiyməti 467 K-ə qədər stabil 0.66 mVt qalır (şəkil 3.3.12 d). Lakin

467 K-dən başlayaraq istilik selinin qiyməti şüretli artaraq 11.25 mVt-a çatır. Mərkəzi piki 969 K-də formalaşan effektin enerjisi 373.609 J/q-a bərabərdir.

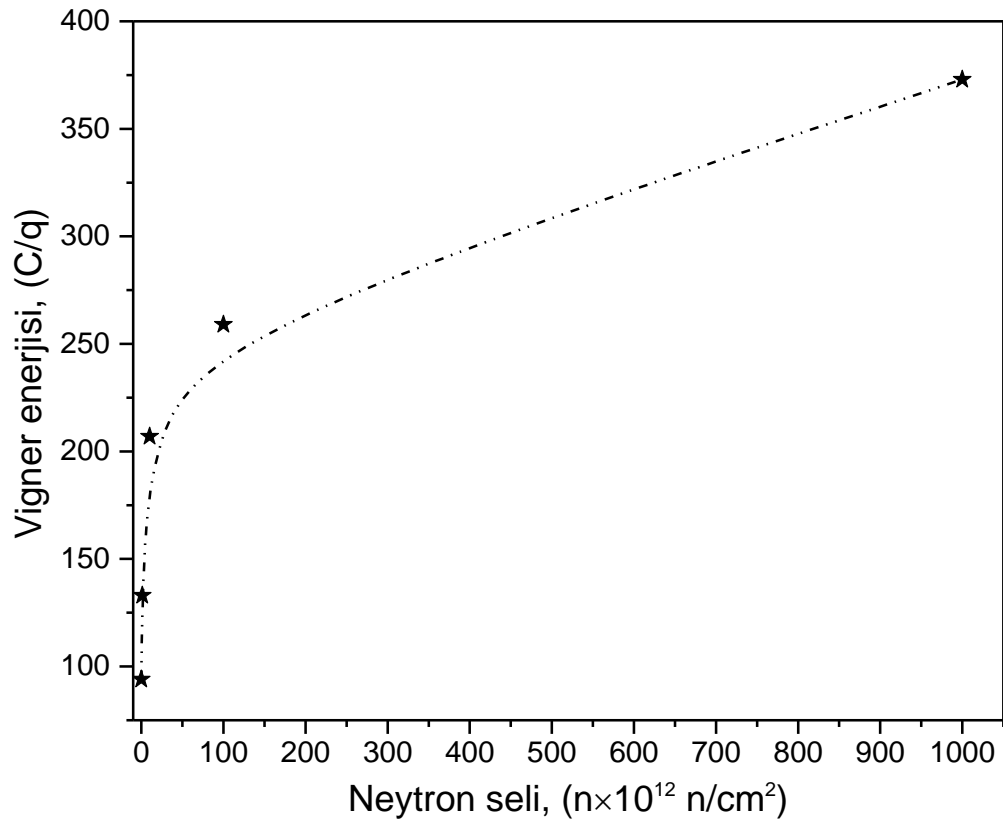


Şəkil 3.3.12(d). 1.0×10^{15} n/sm² neytron selində şüalandırılmış bor nitrid kristalının istilik seli funksiyasının analizi; Qara xətt- istilik axını funksiyası, qırmızı iz-kalorimetrik əyrilərin təməl xətti və Viqner effektinin sahəsi.

Təcrübi nəticələr göstərir ki, şüalanma dozasının qiymətinin artması ilə bor nitrid kristalında toplanan enerjinin miqdarı artır. Viqner enerjisi bor nitridin kristal strukturunda defektlərin konsentrasiyası və defektlərin əmələgəlməsi ilə düz mütənasibdir və 3.3.1.15 ifadəsi ilə təyin olunur.

$$W_E = 94 + 278 \left(1 - \left(\exp \left(-\frac{N_D}{95} \right) \right) \right) \quad (3.3.1.15)$$

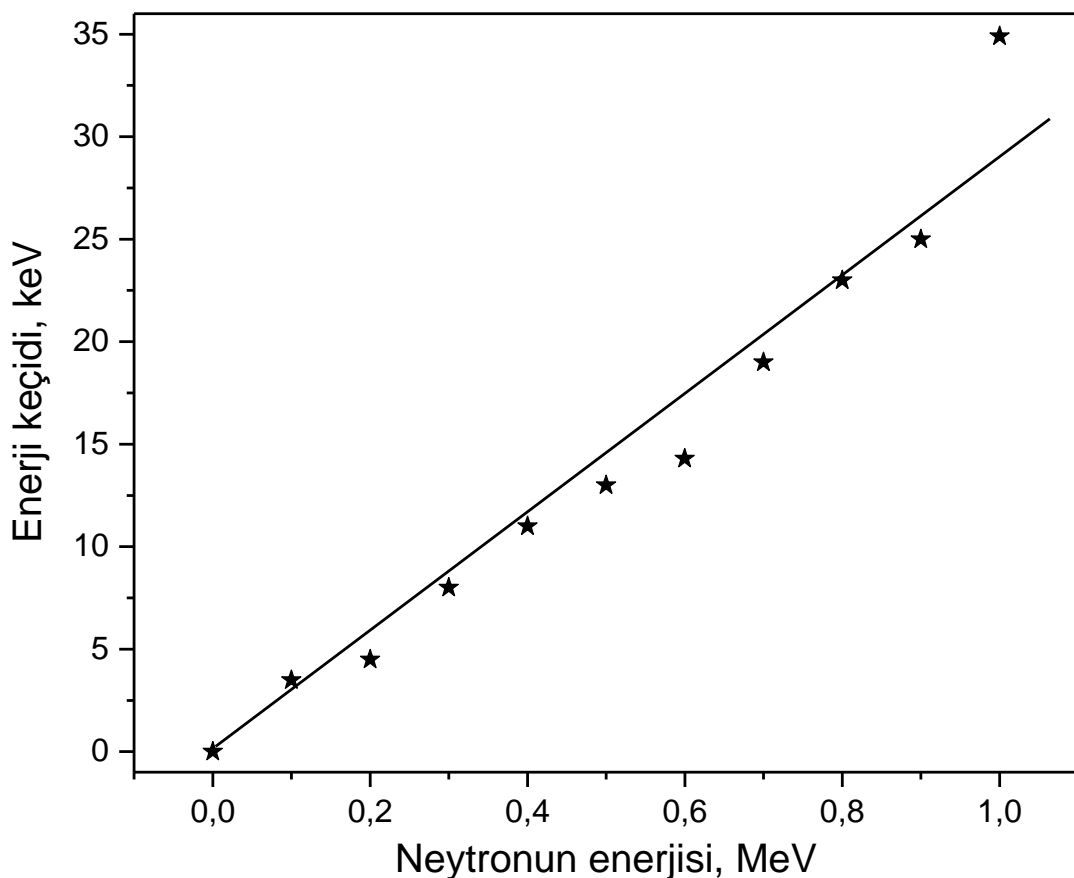
Həmçinin heksaqonal bor nitrid kristal strukturunda defektlərin formalaşması eksponensial olaraq artır. Şəkil 3.3.13. –də müxtəlif neytron selində şüalanmalarda BN kristalında toplanan enerjisinin asılılığı verilmişdir. Göründüyü kimi, təcrübə olaraq şüalanmanın seli artması ilə kristal quruluşda toplanan enerji artır. Neytron selinin bor və azot nüvələrindən elastik səpilmə və radiasiya tutulması nəticəsində kristal quruluşunda müxtəlif növ defekt mərkəzlər formalaşdırır. Neytron selinin B^{10} radioizotopu ilə qarşılıqlı təsiri prosesində ${}^2\text{He}^4$ ionunun üç enerjili xətt boyunca (1.47 MeV, 1.78 MeV və 2.05 MeV), ${}^3\text{Li}^7$ ionunun iki enerjili xətti (1.01 MeV və 0.84 MeV), 0.48 MeV qamma şüalarının, ${}^1\text{H}^3$ ionunun iki enerjili (2.72 MeV və 191 keV) və 573 keV enerjili deuteriumun h-BN quruluşunda böyük miqdarda defekt mərkəzlər formalaşdırır.



Şəkil 3.3.13. h-BN kristalı üçün neytron axını əsasında saxlanılan enerji qrafikinə dəyişməsi.

Əlavə olaraq, neytron selinin ${}^{14}\text{N}$ nüvəsi ilə qarşılıqlı təsiri zamanı 40 keV ${}^{14}\text{C}$ və 580 keV enerjili ${}^1\text{H}$ proton izotoplarının alınması da öz növbəsində yeni növ defektlər yaradır. Həmçinin neytron selinin artması ilə kristal quruluşu

verilən enerjinin miqdarı artır. Böyük miqdarda defekt mərkəzlər böyük miqdarda enerjinin toplanmasını yaradır. Şüalanmamış kristallarda ana defektlərin hesabına yaranan toplanan enerjinin miqdarı 94.49 C/q olduğu halda 8.0×10^{12} n/sm² dən 4.0×10^{14} n/sm² qədər olan neytron selində toplanan enerjinin qiyməti 133.106 C/q dən 259.364 C/q qədər artır. Lakin maksimum neytron 1.0×10^{15} n/sm² şüalanması göstərir ki, toplanan enerjinin qiyməti daha sürətli artaraq 373.609 C/q-a çatır. Bu bir daha təcrübi olaraq yüksək şüalanma seli yüksək Viqner enerjisinə ekvivalentdir.



Şəkil 3.3.14. h-BN kristalında elastiki qarşılıqlı təsirdə enerji ötürmə asılılığı

Neytron şüalanma dozası artdıqca kristalların Viqner enerjisinin qiyməti artmışdır. 1 MeV enerjili müxtəlif sürətli neytronların təsiri altında altıbucaqlı bor nitridə ötürülən enerjinin qiyməti (Şəkil 3.3.14) də verilmişdir. Neytron seli səth morfologiyasında müəyyən dəyişikliklər yaradır. Bor karbid kristalında istilik seli funksiyası şüalanmamış və 1 MeV enerjili sürətli neytronlarla implus rejimində şüalandırılmış kristallarında temperatur asılılığından alınmış nəticələrdən məlum olduğu kimi B₂O₃ və BN kristallarında neytron selinin təsiri altında strukturda

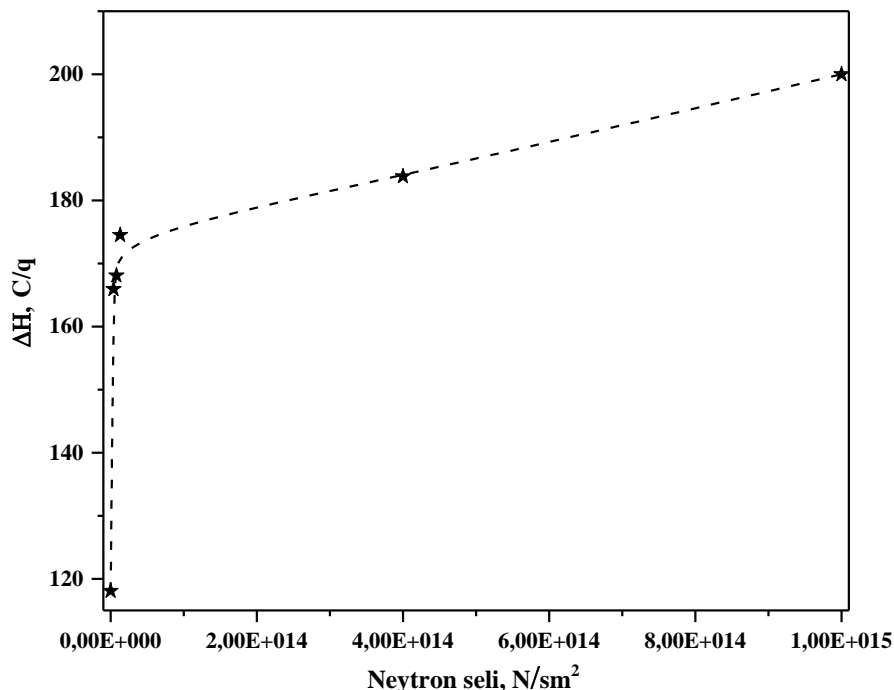
formalaşan defektlərin enerji mənbəyi kimi qiymətləndirilməsi, temperaturun təsiri altında miqrasiya və rekombinasiyası qanuna uyğunluğu ilə baş verir. Defektlərin rekombinasiyası 550 K temperatūra qədər əsas defektlərin rekombinasiyası haqqında bir sıra ədəbiyyat materiallarına rast gəlmək mümkündür. Müəyyən olunmuşdur ki, şüalanmanın B₄C kristalın strukturunda toplanan defekt enerjisinin başlangıç nöqtəsi 105.58 °C başlayaraq 247.52 °C temperaturda tamamlanır. Tamamlanmış strukturda çox kiçik qiymətli sahə enerjisi 57.44 mC formalaşır. Təyin olunmuş enerjinin quruluşda mövcud olan əsas defektlərlə bağlamaq olmaz.

Mikro və nano ölçülü bor karbid kristallarında aparılan tədqiqat nəticələri göstərir ki, səthdə zəyif formalaşan və qarşılıqlı təsirdə olan su molekullarının parçalanması ilə də bağlıdır. Lakin parçalanmalar üçün sərf olunan enerji miqdarı paylanma funksiyasını və qiymətinin təyini olduqca mürəkkəb qanuna uyğunluqla dəyişir. Şüalanma dozasının artması ilə strukturda formalaşan defektlərin rekombinasiyası üçün enerjinin qiyməti də dəyişir. 4.0×10^{12} n/sm² neytron seli ilə şüalandırılmış nümunədə effektin başlangıç temperaturu 110 °C başlayaraq 280 °C tamamlanır. 350 °C -dən başlayaraq 500 °C tamamlanan ikinci effektin daha dərin energetik səviyyələrdə olan defektlərin rekombinasiyası ilə əlaqələndirmək mümkündür və ümumilikdə sahənin formalaşma enerjisi 485.46 mC bərabərdir. 8.0×10^{12} n/sm² neytron seli üçün eyni mexanizimlə prosesin baş verdiyi müşahidə edilir.

3.4 Kristalların termodinamik funksiyaları sürətli neytron selinin təsiri altında

İstilik tutumunun temperaturdan asılı olaraq müəyyən olunması zamanı istilik selinin məlum qiymətlərindən istifadə edərək digər parametrlərə keçid etmək və verilmiş funksiyasından müxtəlif neytron selinin dəyişməsi üçün geniş istifadə olunmaqdadır. İstilik tutumunun $100 \leq T \leq 600$ K temperatur intervalında dəyişməsi şüalanmamış nano bor oksid kristalında istilik tutumunun qiyməti 0.3 C/K×q-dan 0.5 C/K×q-a qədər artır. Eyni zamanda parçalanma xarakterli

effektlərdə bu qiymət maksimum $1.35 \text{ C/K} \times q$ -a qədər artması müəyyən olunmuşdur. İstilik selinin məlum qiymətlərinə əsaslanaraq $100 \leq T \leq 800 \text{ K}$ temperatur intervalında entolpiyanın temperatur asılılığını hesablamaq mümkündür. Lakin $360 \leq T \leq 458 \text{ K}$ temperatur intervalında nano bor oksid kristalında baş verən effektin kinetikasi göstərir ki, həmin intervalda $A \rightarrow B \pm \Delta H$ mexanizmi üzrə baş verən parçalanma reaksiyasının entalpiyası $0.3325\text{-}0.7951 \text{ C/q}$ intervalında dəyişir.



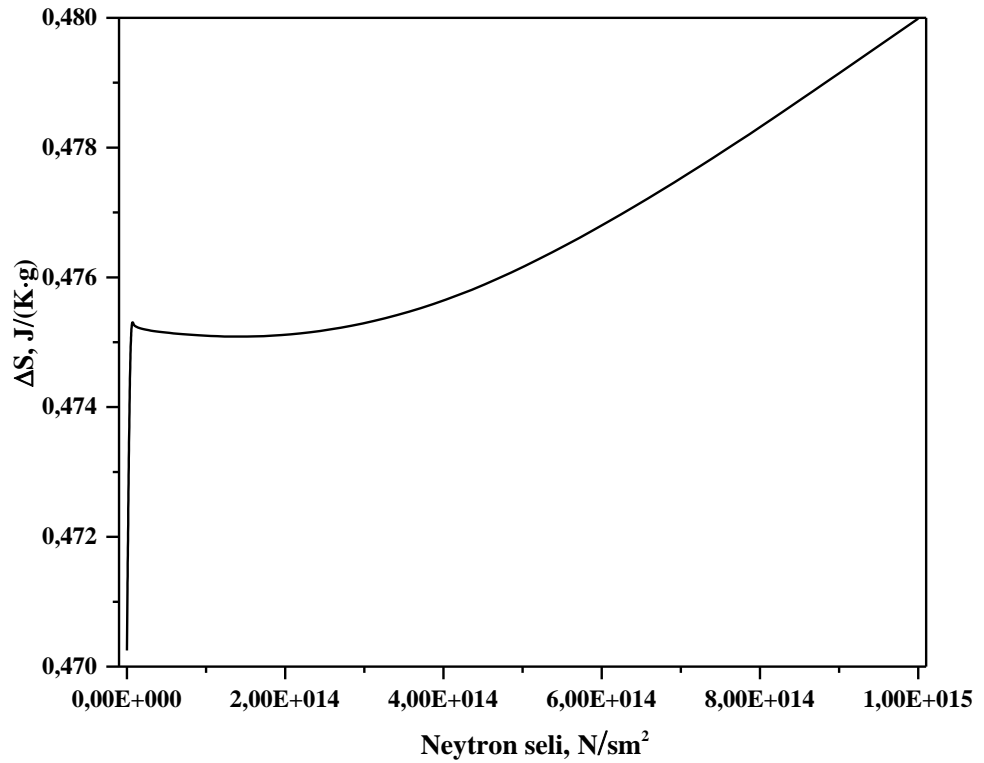
Şəkil 3.4.1. $100 \leq T \leq 800 \text{ K}$ temperatur aralığında şüalanmamış və fərqli neytron seli ilə şüalandırılmış nano bor oksid kristalında entalpiyasının dəyişməsi.

Fərqli sel sıxlığına malik neytronların kristala ötürdüyü kinetik enerjinin mexanizmi HBO_2 nümunəsinin 422 K və boric acid $B(OH)_3$ nümunəsinin 438 K temperaturda parçalanma mexanizimi ilə yekun birləşmələrində hidrogen və su molekullarına ötürülürək parçalanmasına əsaslanır və mərkəzi piki 422 K və 438 K temperaturlarda olan endo effektlərin entolpiyasının şüalanmanın sel sıxlığından asılılığı hesablanmışdır. Müəyyən olunmuşdur ki, $100 \leq T \leq 800 \text{ K}$ temperatur intervalında nano bor oksid kristalında entalpiyanın dəyişmə kinetikasi şüalanmamış kristal üçün 118.095 C/q , müxtəlif neytron seli ilə şüalandırdıqda $4.0 \times 10^{12} \text{ n/sm}^2$, $8.0 \times 10^{12} \text{ n/sm}^2$, $1.3 \times 10^{13} \text{ n/sm}^2$, $4.0 \times 10^{14} \text{ n/sm}^2$ və $1.0 \times 10^{15} \text{ n/sm}^2$ uyğun olaraq 165.952 C/q , 168.095 C/q , 174.524 C/q , 183.809 C/q və 201.028 C/q kimi dəyişir.

Istilik tutumunun temperatur asılılığından alınan funksiya riyazi yaxınlaşmasından istifadə edərək müəyyən olunmuşdur ki, entropiya üçün aşağıdakı ifadə alınır (3.4.1).

$$\Delta S = \int_{T_i}^{T_f} \left\{ \frac{0.00487T + 0.165}{T} \right\} dT \quad (3.4.1)$$

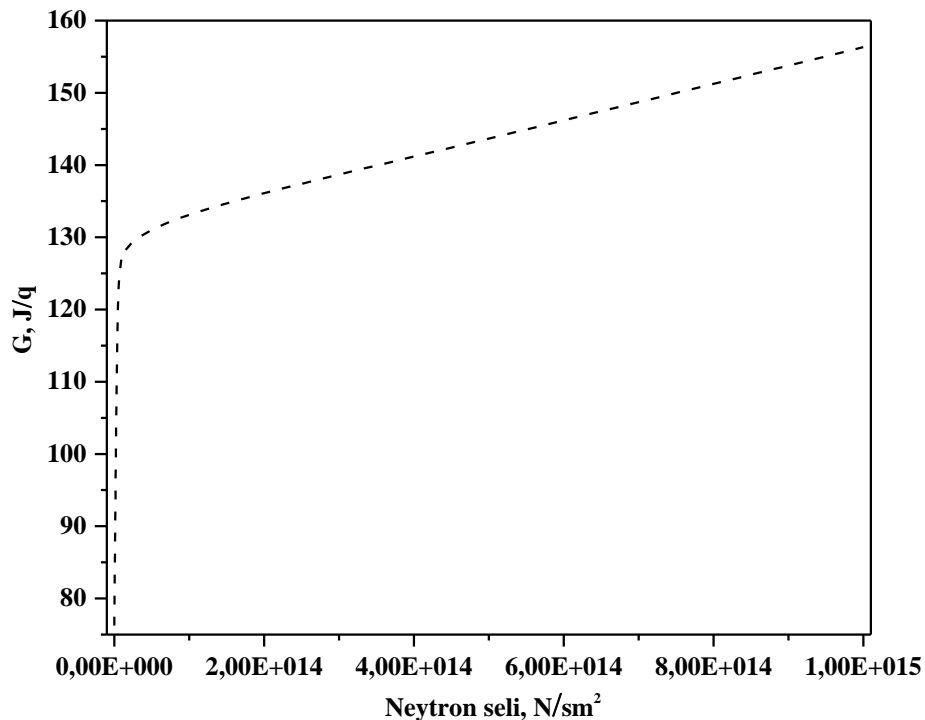
Burada T_b başlanğıc temperatur, T_s parçalanma reaksiyasından sonra tamamlanan temperaturdur.



Şəkil 3.4.3. $100 \leq T \leq 800$ K temperatur aralığında şüalanmamış və fərqli neytron seli ilə şüalandırılmış nano bor oksid kristalının entropiya dəyişməsi.

Müəyyən olunmuşdur ki, $100 \leq T \leq 800$ K temperatur intervalında nano bor oksid kristalında entropiya dəyişməsi şüalanmamış kristal üçün $0.4702 \text{ C}/(\text{K} \times \text{q})$, müxtəlif neytron selində şüalandırıldıqda $4.0 \times 10^{12} \text{ n}/\text{sm}^2$, $8.0 \times 10^{12} \text{ n}/\text{sm}^2$, $1.3 \times 10^{13} \text{ n}/\text{sm}^2$, $4.0 \times 10^{14} \text{ n}/\text{sm}^2$ və $1.0 \times 10^{15} \text{ n}/\text{sm}^2$ sonra uyğun olaraq $0.4754 \text{ C}/(\text{K} \times \text{q})$, $0.4763 \text{ C}/(\text{K} \times \text{q})$,

0.4771 C/(K×q), 0.4789 C/(K×q) və 0.4829 C/(K×q) kimi dəyişir (Şəkil 3.4.3.). Entropiya və entolpiyadan məlum qiymətindən sonra Gibbs enerjisinin qiymətlərini almaq mümkündür.



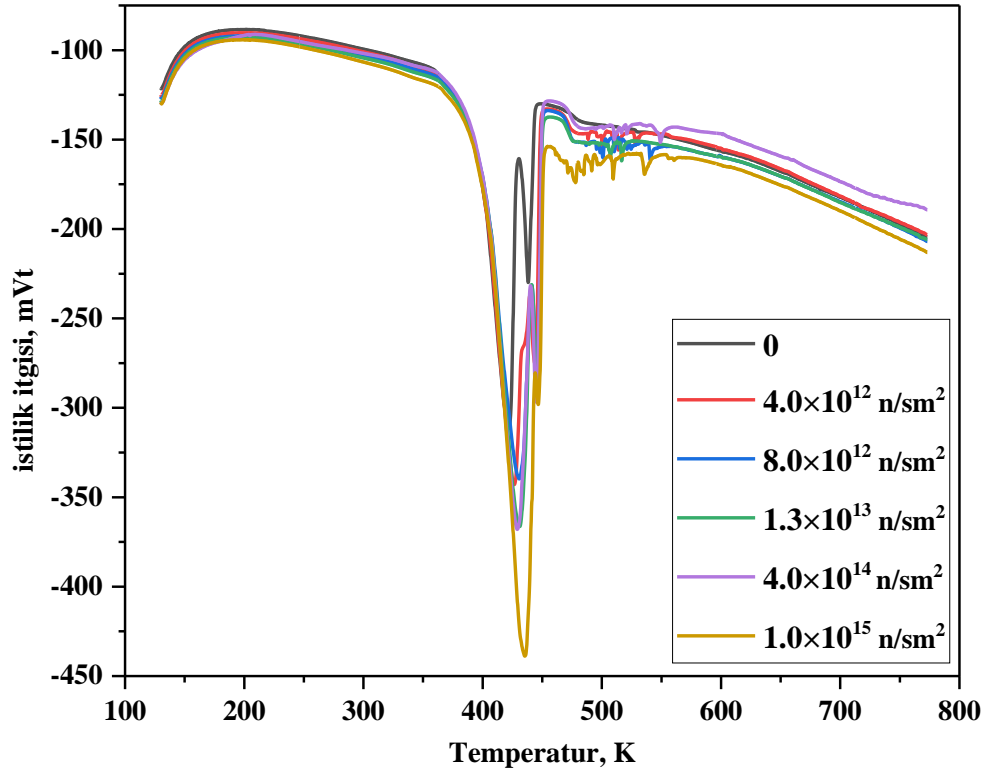
Şəkil 3.4.4. 100≤T≤800 K temperatur aralığında şüalanmamış və fərqli neytron seli ilə şüalandırılmış nano bor oksid kristalının Gibbs enerjisinin dəyişməsi.

Müəyyən olunmuşdur ki, 100≤T≤800 K temperatur intervalında, nano bor oksid kristalında Gibbs enerjisinin dəyişmə kinetikasi şüalanmamış kristal üçün 76,243 J/q, müxtəlif neytron seli ilə şüalandırıldıqdan 4.0×10^{12} n/sm², 8.0×10^{12} n/sm², 1.3×10^{13} n/sm², 4.0×10^{14} n/sm² və 1.0×10^{15} n/sm² sonra uyğun olaraq 123.166 C/q, 125.318 C/q, 131.763 C/q, 141.065 C/q və 156.321 C/q kimi dəyişir (Şəkil 3.4.4.). Bütün hesablanmış termodinamik funksiyalardan sonra istilik selinin itgisinin aşağıdakı ifadədən hesablanmış olar.

$$\Phi_{loss} = \Sigma\Phi - m_s \cdot C_p \cdot \beta \quad (3.4.2)$$

Burada m_s kristalın kütləsi, C_p -kristalın xüsusu istilik tutumu, β -istilik sürəti və Φ - istilik selinin funksiyası müxtəlif hallar üçün nəzərdə tutulur. Bütün təcrübələrdə istilik funksiyalarının qiymətləri təyin olunur. Təyin olunmuş qiymətlərdən və istilik

tutumunun məlum qiymətindən istifadə olunaraq nano bor oksid kristalı üçün istilik itgisinin temperatur asılılığı müəyyən olunmuşdur (Şəkil 3.4.5.).



Şəkil 3.4.5. $100 \leq T \leq 800$ K temperatur aralığında şüalanmamış və fərqli neytron seli ilə şüalandırılmış nano bor oksid kristalında istilik itgisinin qiyməti.

Şüalanmamış və müxtəlif intensivlikli neytron selinin təsiri altında şüalanmış bor oksid kristallarında kimyəvi təmizliyin hesablanması və bu nəzəriyyəyə və termodinamik parametrlərin tamamlanmış qiymətlərinə əsaslanaraq təyin olunmuşdur. Bunun üçün (3.4.3) tənliyindən istifadə olunmuşdur.

$$\ln x = \frac{1}{R} \int_{T(p)}^T \frac{\Delta H(T)}{T^2} dT \quad (3.4.3)$$

Burada R universal qaz sabiti 8.31 C/mol, $\Delta H(T)$, təmiz komponentin T temperaturunda faza keçid entalpiyası, $T_{(p)}$ faza keçidinin temperaturudur. Müxtəlif neytron selində şüalandırılmış kristalların $422 \leq T \leq 443$ K və $456 \leq T \leq 600$ K temperatur intervalında parçalanma reaksiyalarını xarakterizə edir ki, bu reaksiyalarda faza keçidlərinin cəmlənmiş entolpiyasının alınan qiymətlərindən istifadə edərək kimyəvi

təmizlik dərəcəsi hesablanmışdır. Şüalanmamış və müxtəlif dozalarda şüalandırılmış kristalların kimyəvi təmizlik yalnız udulmuş su buxarları ilə xarakterizə olunur. Bütün təcrübələrin yekunu kimi demək olar ki, neytron ilə şüalanma kristallarda su buxarı ilə qarşılıqlı təsiri müxtəlif enerjili neytronların mühitdə nümunə ilə elastiki səpilməsi zamanı enerjinin ötürülmə mexanizmindən asılıdır. Böyük intensivliklərdə ötürülən enerjinin böyük miqdarda su molekulunun parçalanması kimi ifadə etmək olar.

IV FƏSİL

YÜKSƏK ELEKTRON SELİ İLƏ ŞÜALANDIRILMIŞ B_4C , BN , B_6Si VƏ B_2O_3 KRİSTALLARININ TERMOFİZİKİ XASSƏLƏRİNİN ÖYRƏNİLMƏSİ

Dördüncü fəsildə tədqiqat kristalları 2.5 MeV enerjili $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$ və $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron seli ilə otaq temperaturunda şüalandırılmışdır. Təcrübi tədqiqatlar Özbəkistanın Daşkənd şəhərində yerləşən Özbəkistan Elmlər Akademiyasının Nüvə Fizikası İnstitutunda yerinə yetirilmişdir. Tədqiqat materiallarının quruluş strukturunda yerləşən atomları ilə elektron selinin mümkün elastiki və qeyri-elastiki qarşılıqlı təsir mexanizminin nəzəri və təcrübi əsasları analiz edilmiş və kristalın həcmə ötürülən enerjinin mexanizmi müəyyən edilmişdir. Şüalandırılmış kristalların quruluş strukturunda baş verən radiasiya effektləri Rentgen struktur və Raman spektroskopik analaiz metodları ilə öyrənilmişdir. $100 < T < 300 \text{ K}$ temperatur intervalında kristalların istilik seli funksiyasının dəyişməsi, istilik tutumunun təyini və termofiziki parametrlərin öyrənilməsi verilmişdir.

4.1 Elektron selinin tədqiqat kristalları ilə qarşılıqlı təsirinə nəzəri əsasları

Yüksək enerjili elektron selinin bərk cisimlər, yarımkeçirici, seqnoelektrik və nazik təbəqəli materiallarla qarşılıqlı təsiri müxtəlif proses, tədqiqat materiallarının fiziki xassələrinin, sıxlığının və mexaniki parametrlərində dəyişikliklər yaradır [77, 95, 126, 162, 201, 227, 289]. Nazik təbəqələr fizikasında yüksək enerjili elektronların hərəkət kinetikasi və onların yaratdığı təsirlərin ehtimalı ilə kifayət qədər böyük qalınlıq və sıxlıq malik nümunələrdə baş verən proseslərin mexanizmi fərqlidir. Qarşılıqlı təsiri xarakterizə edən ən vacib parametrlərdən biri elektronun kristaldan elastiki və qeyri-elastiki səpilməsidir. Elastiki səpilmə zamanı elektronun hərəkət trayektoriyası və enerji dəyişməsi ilə təhlil olunur. Difraksiya etmiş və əks səpilmə ilə xarakterizə olunan hadisələr elastiki səpilməsinin əsas komponentlərindən biridir. Elektronların əks olunması prosesi daha çox kiçik enerji xarakterli hadisələrə aid etmək mümkündür. Tətbiqi xarakterli məsələlərin həlli zamanı, yüksək ayırdetmə

qabiliyyətinə malik elektron selindən geniş istifadə olunur. Əlavə olaraq analitik tədqiqatlarda yüksək enerjiyə malik qeyri-elastiki səpilmə ilə xarakterizə olunan elektronlardan da istifadə olunur. Qeyri-elastiki səpilmənin təsiri ilə fərqli tipdə prosesləri mövcuddur; fotonların həyəcanlaşması, valent elektronların birlikdə həyəcanlaşması (plazma həyəcanlaşma), zonalar arasındakı keçid, daxili elektron təbəqəsinin həyəcanlaşması, sərbəst elektronların həyəcanlaşması (ikinci növ elektronların həyəcanlaşması) və kəsilməz spektrlərdə tormuzlanmış rentgen şüalarının emissiyası kimi fundamental hadisələrlə müşahidə olunmaqdadır. Hər bir həyəcanlaşma prosesi üçün konkret enerji diapazonu təyin etmək mümkündür. Elmi ədəbiyyatda enerji diapazonunun təyini metodikası (Elektron Energy Loss Spectroscopy) adlanır. Elektronların kristaldan səpilmə növləri və proseslərin ehtimalı tədqiq olunan materialın təşkil edən kimyəvi tərkibindən və elektronların enerjisindən asılıdır. Elektronların səpilmə xarakteristikasını bir neçə fundamental aspektlərin baxışından izah etmək mümkündür. Elektronların kəmiyyətə səpilməsini çarpaz səpilmə ilə geniş şərh etmək mümkündür. Çarpaz səpilmənin ən kəsiyini aşağıdakı kimi ifadə etmək olar.

$$\sigma = \frac{N}{n_m n_e} \quad (4.1.1)$$

(4.1.1) ifadəsindəki N bir sm^3 -da baş verən səpilmə hadisələrinin sayını, n_m bir sm^3 -da olan atomların sayını, n_e bir sm^3 -da olan elektronların sayını xarakterizə edir. Ümumiyyətlə, çarpaz kəsik hər bir səpilmə prosesində nəzəri olaraq müxtəlif fiziki parametrlərlə (səpilmə bucağını və qarşılıqlı təsirdə itirilmiş enerjinin qiyməti) təyin etmək mümkündür. Çarpaz səpilmənin ən kəsiyi bütün növdə təsvir olunan qarşılıqlı səpilmələri və nəzəri olaraq fiziki parametrlərlə təyin olunan qiymətləri özündə əks etdirir. Səpilmə bucağını və itirilmiş enerjinin qiymətini birlikdə tam səpilmənin ən kəsiyi ilə təyin etmək mümkündür. Əks çarpaz səpilmənin ən kəsiyini məhdud şərtlər daxilində təyin etmək mümkündür. Səpilmə bucağı üçün konkret təyin olunmuş və itirilmiş enerjinin qiyməti üçün seçilmiş interval və bütün bunlarla birlikdə proporsial çarpaz səpilmənin ən kəsiyi adlanır. Elastiki səpilmədə çarpaz ən kəsik birinci elektronların atom nüvəsinin ətrafında keçdiyi zaman nüvənin kulon sahəsində meyl

etməsi ilə xarakterizə etmək mümkündür. Bir sıra elmi ədəbiyyatlarda bu hadisəni elektronların nüvədən səpilməsi və yaxud Rutherford səpilməsi adlandırılır [289]. Rutherford səpilməsində çarpaz en kəsiyi relyativistik effekt kimi nəzərə alınır və daxili elektron təbəqəsinin nüvə ilə ekranlaşdırılması ədəbiyyatda təhlil olunmuş və riyazi ifadəsi verilmişdir.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{16E^2} \cdot \left\{ \sin^2 \left(\frac{\Theta}{2} \right) + \left(\frac{\Theta_0^2}{4} \right) \right\}^{-2} \cdot \left\{ 1 - \beta_r^2 \sin^2 \left(\frac{\Theta}{2} \right) + \pi \alpha \beta_r \left[\sin \left(\frac{\Theta}{2} \right) - \sin^2 \left(\frac{\Theta}{2} \right) \right] \right\} \quad (4.1.2)$$

(4.1.2) tənliyində $d\Omega$ tam bucaq adlandırmaq olar,

$$d\Omega = 2\pi \sin\Theta d\Theta \quad (4.1.3)$$

Bundan əlavə, Θ ($0 \leq \Theta \leq \pi$) intervalında yerləşən səpilmə bucaqlarından ibarətdir və difraksiya bucağı ilə riyazi şəkildə aşağıdakı kimi bağlıdır.

$$\Theta = 2\theta \quad (4.1.4)$$

(4.1.2) tənliyində, Z -elementin atom nömrəsi, E -düşən elektronların enerjisi (keV), Θ_0^2 ekranlaşdırma parametri və e -elektronun yüküdür.

$$\beta_r = \left\{ 1 - \left[1 + \frac{E}{511} \right]^{-2} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (4.1.5)$$

(4.1.5) tənliyində 511 keV enerjiyə uyğun həyəcanlanmış elektronların enerjisinə uyğundur. (4.1.2) tənliyində $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)$ elektronun tam bucağı üçün elastiki səpilmənin differensial çarpaz en kəsiyi adlandırılır. Ekranlaşma və digər parametrlərin, sabitlərin qiymətləri materialı təşkil edən atomların nömrəsindən və düşən elektronların enerjisindən asılıdır. Elastiki səpilmənin differensial çarpaz en kəsiyi sadəcə $\left(\frac{Z^2}{E^2} \right)$ ilə proporsional olmasından ibarət deyil. Ümumi şəkildə ifadə etsək elastiki səpilmənin differensial çarpaz en kəsiyi tədqiq olunan kristalın atom nömrəsinin böyüməsi ilə artır və yaxud sürətləndiricinin gərginliyinin azaldılması ilə bu proses baş verə bilər. Həmçinin qeyd olunması tələb olunan vacib olan məqamlardan biri atomdan səpilmə faktorunu intensiv difraksiya analizi üçün istifadə olunması və dalğa funksiyasının hesablanmasıdır. Dalğa funksiyası elastiki səpilmənin

differentensial çarpaz en kəsiyi ilə riyazi bağlıdır.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \quad (4.1.6)$$

Çarpaz səpilmənin bağlı olduğu səpilmə növlərindən biri qeyri-elastiki səpilmənin çarpaz en kəsiyidir. Yüksək enerjili elektronların maddə ilə qarşılıqlı təsiri zamanı çoxlu formada baş verən proseslər mövcuddur. Çarpaz səpilmənin bağlı olduğu səpilmə növlərindən biri qeyri-elastiki səpilmənin çarpaz en kəsiyinin təyin edilməsidir.

Yüksək enerjili elektronların maddə ilə qarşılıqlı təsiri zamanı çoxlu formada fiziki proseslər mövcuddur. Baş verən bütün fiziki proseslərin hər biri üçün ayrı ayrılıqda məxsusi en kəsiyinin təyin olunması vacibdir. (4.1.7) tənliyi qeyri-elastiki səpilmənin plazma həyəcanlaşması üçün differentensial çarpaz en kəsiyi verilmişdir.

$$\frac{d\sigma(\Theta)}{d\Omega} = \frac{1}{2\pi a_0} \frac{\Theta_p}{\Theta^2 + \Theta_p^2} \quad (4.1.7)$$

Burada a_0 –bor radiusu (0.0529 nm), $\Theta_p = \frac{\Delta E_p}{2E}$ E-həyəcanlaşmış plazma enerjisi, ΔE_p –bir necə eV səviyyəsindən 30 keV-ə qədər arta bilir ki, qeyri-elastiki səpilmədə iştirak edən elektronların azlıq təşkil etdiyini göstərir. Beləliklə, qeyri-elastiki səpilmənin çarpaz en kəsiyi səpilmə bucağının böyüməsi zamanı plazma həyəcanlaşması kəskin şəkildə düşür. Daxili elektron təbəqəsi (qeyri-elastiki səpilmənin en kəsiyi həyəcanlaşması) üçün (4.1.8) tənliyi şəkilində qeyd etmək mümkündür.

$$\sigma = \frac{\pi e^4 b_s n_s}{\left(\frac{m_0 v^2}{2}\right)_{E_c}} \left\{ \log \left[c_s \left(\frac{m_0 v^2}{2} \right) / E_c \right] - \log(1 - \beta_r^2) - \beta_r^2 \right\} \quad (4.1.8)$$

Burada E_c -ionizasiya enerjisi, n_s –daxili elektron təbəqəsinin elektronların sayı, m_0 – həyəcanlaşmış elektronların kütləsi, v və e düşən elektronların sürəti və elementar elektron yükünə uyğundur. c_s və b_s qiymətləri daxili elektron təbəqəsinin (K, L, M, və s.) növündən asılıdır. Beləliklə, qeyri-elastiki səpilmənin çarpaz en kəsiyi qiyməti önəmli dərəcədə c_s və b_s qiymətlərindən asılıdır. Elektronun nümunədə yaratdığı əsas fiziki proseslərdən biri elektronun nümunədə sərbəst yolunun orta uzunluğunun təyini. Elektronun nümunədə hərəkət trayektoriyasının orta uzunluğu

səpilmə zamanı elektronların nümunədən keçməsi ilə xarakterizə olunur və elektronun sərbəst yolun orta uzunluğu kimi adlandırılır.

$$\lambda = \frac{A}{\sigma N_0 \rho} \quad (4.1.9)$$

(4.1.9) tənliyi elektronun kristalda sərbəst yolunun orta uzunluğu ilə çarpaz səpilmənin en kəsiyi arasındakı riyazi əlaqəni aşağıdakı kimi ifadə etmək olar. (4.1.9) tənliyi elektronun kristalda sərbəst yolunun orta uzunluğu təyin olunmuş çarpaz en kəsiklə təyin edilməsi mümkündür. Elektronun kristal daxilində dağılması ilə baş verən proseslər, elektronun kristal daxilində sərbəst yolun orta uzunluğunun qiyməti kiçilir nəyinki digər fiziki parametrlərdən asılı olaraq. Elektronun kristal daxilində bir neçə dəfə səpilməsi ilə baş verən proseslərdə elektronun kristal daxilində sərbəst yolun uzunluğu artır. Nümunəyə kiçik en kəsiyinə malik elektronların daxil olması ilə struktur daxilində elektronların genişlənməsi və yaxud səpilmə prosesi baş verir.

Ədəbiyyat nəticələrində kiçik səpilmələrlə baş verən proseslərin mexanizmi və kinetikasi təhlil edilmişdir. Riyazi modelləşmə prosesi \underline{d} qalınlığa malik birləşmədə təsvir edilmiş və sxematik təsviri şəkil (4.1.1)–də verilmişdir. Nəzərə alsaq ki, elektron selinin genişlənməsi nümunənin çıxışındakı konusun uzunluğunda 90 % səpilən elektronların iştirakı mövcuddur. Səpilən elektronların konus uzunluğunu aşağıdakı kimi ifadə etmək olar.

$$b = 6.25 \times 10^2 \left(\frac{\rho}{A}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{Z}{E}\right) d^{\frac{3}{2}} (sm) \quad (4.1.10)$$

\underline{b} və \underline{d} qiymətlərinin ölçüləri sm-lərlə qeyd olunmuşdur. A və B, ρ bir qram kub santimetrdə, qram mol və kiloelektron volta uyğundur. Aydınır ki, modeldə elektronların genişlənməsi kristalın qalınlığı isə $(\underline{d}^{\frac{3}{2}})$ dərəcəsi ilə proporsionaldır. Həmçinin elektronların genişlənmə qiyməti kristala düşən sürətləndirilmiş elektronların intensivliyindən, lakin düşən elektronların gərginliyindən tərs mütənasib asılıdır. Yüksək enerjili elektron selinin nümunədə kiçik məsafədə keçməsi zamanı, elektron selinin nüfuz etmə dərinliyi elektronun intensivliyindən dI düz mütənasib şəkildə asılıdır. Bu nöqteyi nəzərdən, kiçik d məsafədə nüfuz edən elektronların intensivlikdən asılılığını (4.1.11) tənliyi şəklində qeyd etmək mümkündür.

$$dI = -\mu_0 I dd \quad (4.1.11)$$

μ_0 udulma əmsalı, və udulma əmsalının kristalın sıxlığına olan nisbəti $\frac{\mu_0}{\rho}$ kütlə əmsalı kimi adlandırılır. Kütlə əmsalının nümunənin hazırlanma texnologiyasından və tərkibindən asılı deyil. Elektronun udulma prosesi özündə müxtəlif qeyri-elastiki səpilmə proseslərini birləşdirir və (4.1.11) tənliyində “mənfi” işarəsi düşən elektronların intensivliyini xarakterizə edir. (4.1.11) tənliyini həm intensivlik həm də nümunənin qalınlığına görə inteqral şəkildə yazsaq (4.1.12) riyazi ifadəsin almış olarıq.

$$I = I_0 e^{-i\mu_0 d} \quad (4.1.12)$$

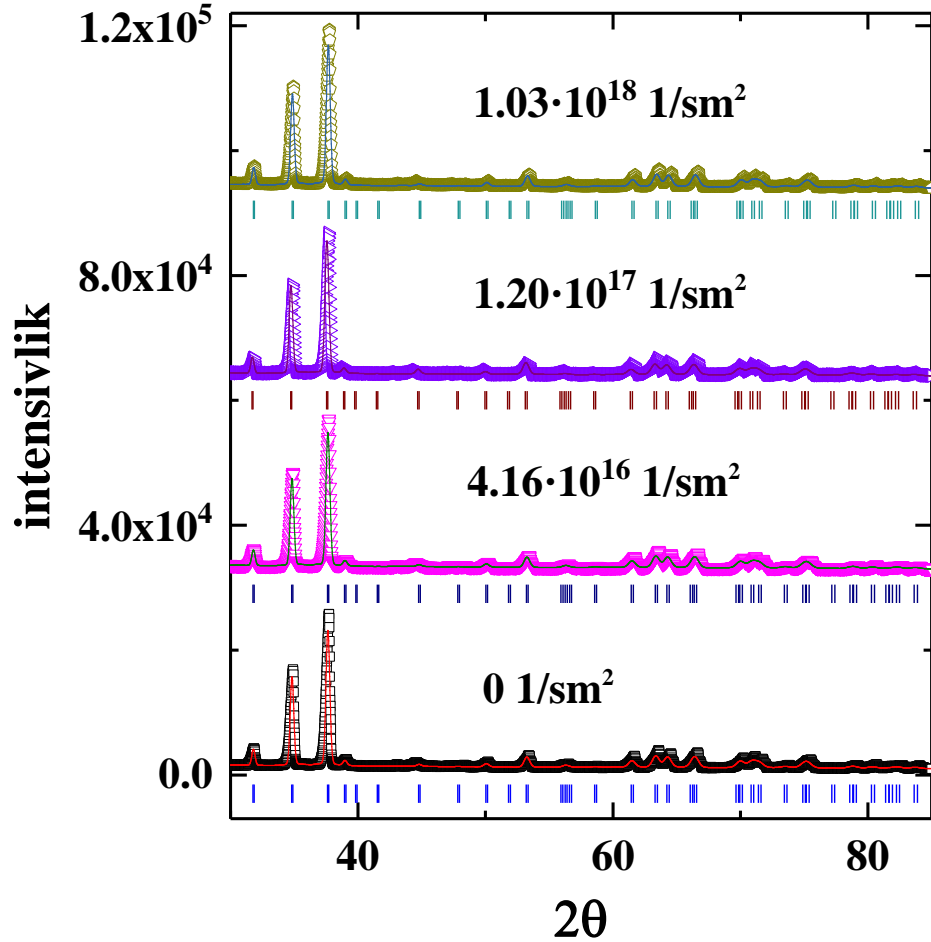
I_0 düşən elektronların intensivliyi, d nüfuz etmə dərinliyidir. Elektronların nüfuz etmə dərinliyi göstərir ki, alınan qiymətlər udulma əmsalının əks qiymətinə bərabərdir.

4.2 Yüksək elektron selinin təsir altında yaranan radiasiya defektlərinin təbiəti

Təcrübələrdə təmizlik dərəcəsi 99.9 %, kristal ölçüsü 1-3 μm , toz halında sıxlığı 1.8 q/sm^3 olan bor karbid kristalından istifadə olunmuşdur. Kristallar 2.5 MeV enerjili xətti elektron sürətləndiricidə otaq temperaturunda $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$ və $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ sel sıxlığında şüalandırılmışdır. Elektron şüalar bor karbid kristalının struktur parametrlərinə təsiri Rentgen struktur analizi və Raman spektroskopik metodla (karbon rabitələrinin deqredasiya mexanizmi) tədqiq olunmuşdur. Rentgen difraksiyası metodu ilə aparılmış quruluş tədqiqatları nəticəsində məlum olmuşdur ki, normal şəraitdə və otaq temperaturunda bor karbid kristalı $(B_{12})\text{CBC}$ kristal quruluşlu R-3m fəza qrupuna daxil olan romboedrik simmetriyaya uyğun gəlir. Struktur analiz nəticələrinə əsaslanaraq maksimum $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron selinin təsiri ilə şüalandırılmış bor karbidin kristal quruluşunda faza keçidi baş vermir.

Raman spektrlərinin dəyişmə dinamikası və $(B_{12})\text{CBC}$ quruluşlu strukturda intensiv və dublet modaların müxtəlif elektron selində analitik təhlili aparılmış və Raman aktivlərində pozulmuş rabitələrin formalaşdığı müəyyən olunmuşdur. Şəkil 4.2.1-də mikro kristal halında olan B_4C otaq temperaturunda normal halda və müxtəlif

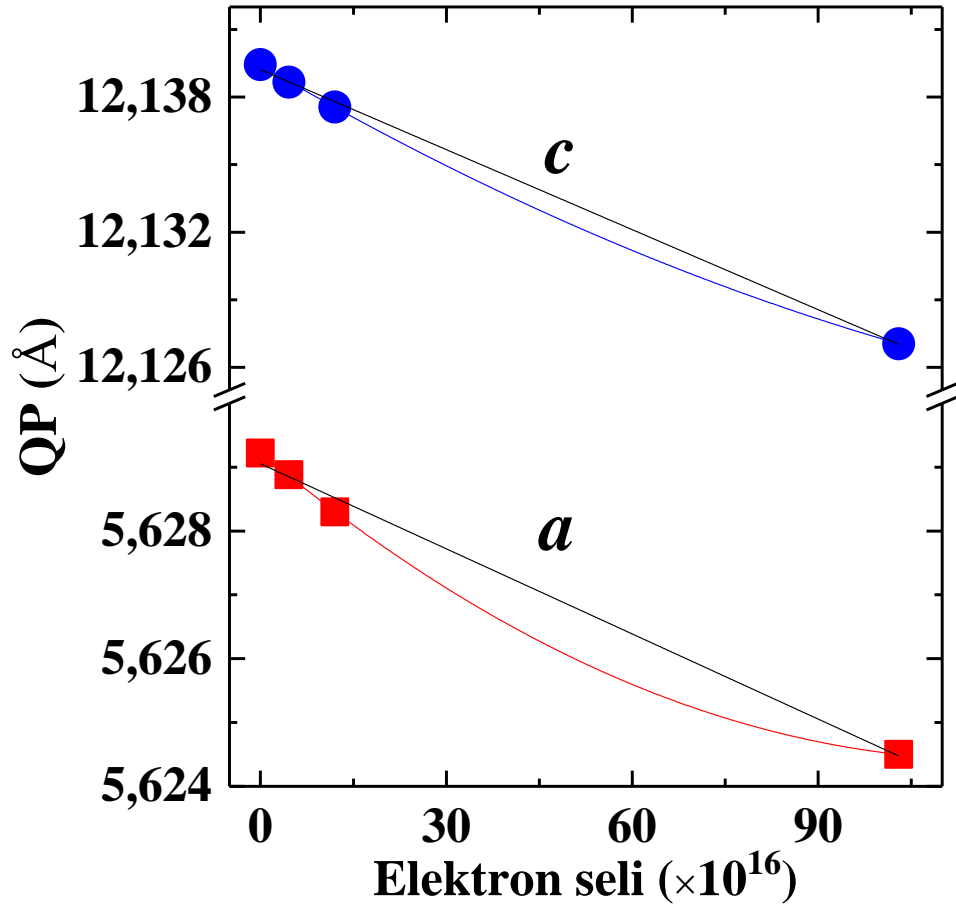
elektron seli ilə şüalandırılmadan sonra alınmış rentgen difraksiyası spektrləri verilmişdir. Spektrlərin analizindən məlum olmuşdur ki, normal şəraitdə və otaq temperaturunda bor karbid R-3m fəza qruplu romboedrik simmetriyalı kristal quruluşa malikdir. Qəfəs parametrləri, $a = 5.62922 \text{ \AA}$ və $c = 12.13944 \text{ \AA}$ təyin olunmuşdur ki, bu da əvvəlki tədqiqat nəticələri ilə uyğunluq təşkil edir [214, 247-248].



Şəkil 4.2.1. B_4C kristalının otaq temperaturunda, normal atmosfer təzyiqində və müxtəlif elektron seli ilə şüalandırılmadan sonra alınmış rentgen difraksiyası spektrləri.

Şüalanmamış, $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$ və $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron selində şüalandırılmış kristalların rentgen difraksiyası spektrlərinin analizi göstərmişdir ki, göstərilən sel sıxlıqlarında B_4C kristal quruluşunda faza çevrilmələri baş vermir (Şəkil 4.2.1). Bütün spektrlər R-3m fəza qrupuna və romboedrik simmetriyaya uyğun gəlir. Yalnız difraksiya maksimumlarının absis oxu boyunca müəyyən qədər sürüşməsi və

intensivliklərin dəyişməsi müşahidə edilmişdir ki, bu da elektron şüalanmasının təsiri ilə qəfəs parametrlərinin və atom koordinatlarının qismən dəyişməsinə uyğun gəlir.



Şəkil 4.2.2. Bor karbid kristalının otaq temperaturunda elektron seli ilə şüalanmadan sonra qəfəs parametrlərinin dəyişməsi.

Şəkil 4.2.2-də qəfəs parametrlərinin şüalanma selindən asılı olaraq dəyişməsindən görünür ki, şüalanma seli artdıqca a və c qəfəs parametrlərinin qiymətlərində xətti (qara xətlər) funksiyaya oxşar olaraq: $a_i = a_0 - k_i D$ qanunu ilə azalma baş verir. a parametri üçün: $a = 5.63 - 4.44 \cdot 10^{-5} \cdot D \cdot 10^{16}$, c parametri üçün isə: $c = 12.14 - 1.18 \cdot 10^{-4} \cdot D \cdot 10^{16}$ qiymətləri alınmışdır. Şüalandırma selinin qiymətinin artması ilə qəfəs parametrlərinin qiymətlərində azalma müşahidə olunur ki, bu da elektron selinin təsiri ilə kristal daxilindəki defektlərin rekombinasiya, zonalar arası elektron keçidlərin olması nəticəsində rabitələrin əvəzlənməsi kimi izah etmək olar.

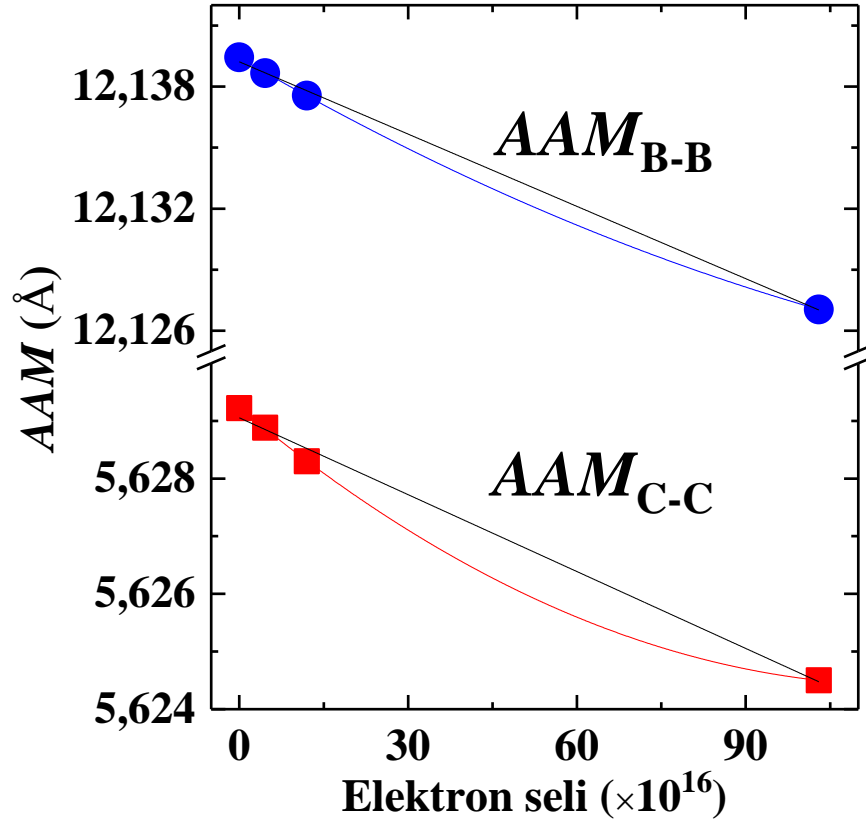
Cədvəl 4.2.1. Fərqli elektron seli ilə şüalandırılmış bor karbid kristallarında atom koordinatları.

Şüalanmamış				$4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$			
Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
B1	0.44190	0.55810	0.04921	B1	0.44188	0.55797	0.04916
C11	0.44190	0.55810	0.04921	C11	0.44188	0.55797	0.04916
B2	0.50471	0.49529	0.19117	B2	0.50466	0.49514	0.19114
B3	0	0	0	B3	0	0	0
C1	0	0	0.12339	C1	0	0	0.12329
B11	0	0	0.05628	B11	0	0	0.05494
$1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$				$1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$			
Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
B1	0.44157	0.55769	0.04399	B1	0.44134	0.55726	0.04355
C11	0.44157	0.55769	0.04399	C11	0.44134	0.55726	0.04355
B2	0.50441	0.49459	0.19085	B2	0.50415	0.49395	0.19076
B3	0	0	0	B3	0	0	0
C1	0	0	0.12322	C1	0	0	0.12312
B11	0	0	0.05374	B11	0	0	0.05315

Qamma kvantlarla şüalanmış bor karbidin şüalanma dozası artdıqca, qəfəs parametrlərinin qiymətlərində azalma baş verir və müəyyən dozadan sonra atomlar arası rəbitələr qırılaraq kristal quruluşa malik fazadan amorf fazaya keçid baş verir [186]. Lakin, tədqiqatlar zamanı müəyyən edildi ki, elektron seli qamma şüalardan fərqli təsirə malik olurlar. Əksinə qəfəs parametrlərinin qiymətlərində azalma baş verir. Bu da onunla əlaqədardır ki, elektron şüalar atomlar arası rəbitələri dəyişmə mexanizmini (rəngli xətlər) yaradır, kristal quruluşda mövcud olan defektləri rekombinasiya olunur. Şəkil 4.2.2-də qəfəs parametrlərinin qeyri xətti asılılıqları göstərir ki, elektron selinin müəyyən qiymətində qərarlaşma baş verə bilər və bu o deməkdir ki, həmin nöqtədə kristal quruluşda mövcud olan bütün defektlər rekombinasiya olunaraq ideal kristal alınacaqdır.

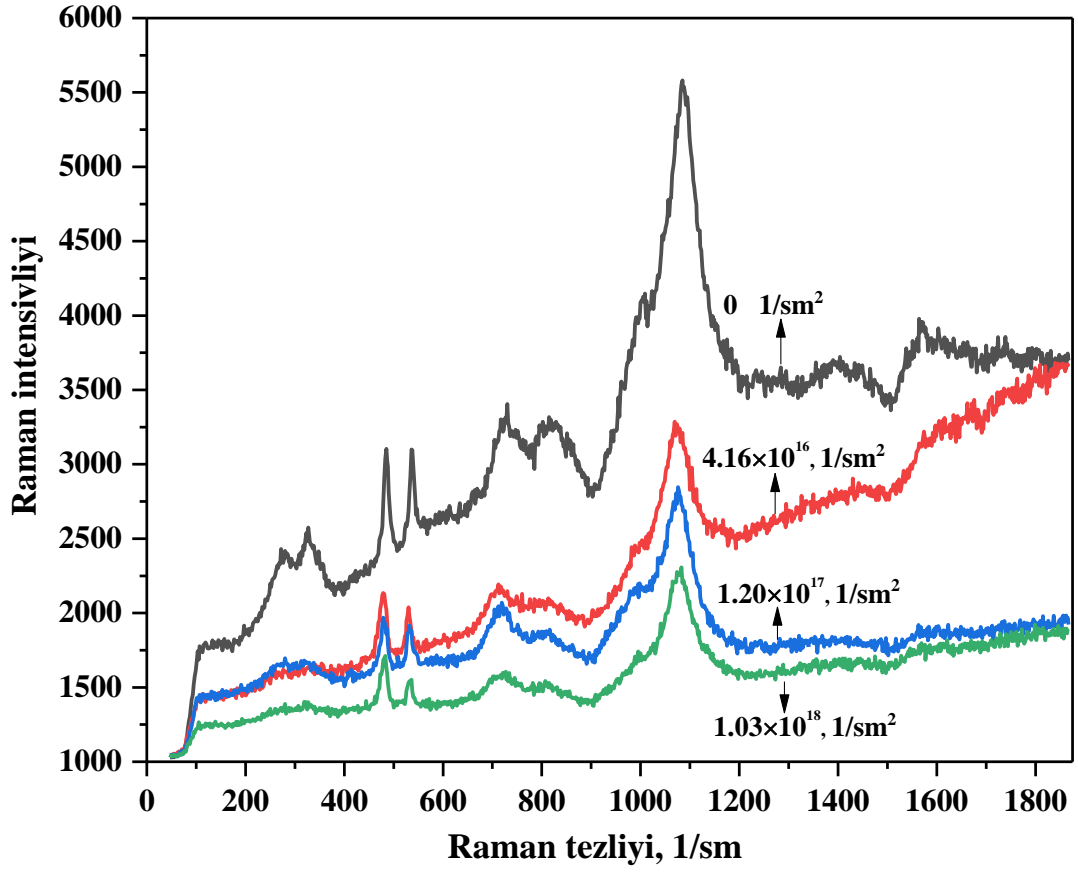
Cədvəl 4.2.1-də şüalandırılmadan əvvəl və sonra bor karbid kristalında müxtəlif kristalloqrafik mövqelərdə yerləşən atomların koordinatları göstərilmişdir. Alınmış qiymətlərdən məlum olur ki, bəzi atomlar öz ideal mövqelərində dayandıqlarına görə elektron seli onlara təsir edə bilmir. Lakin, öz ideal mərkəzlərindən müəyyən qədər sürüşmüş halda dayanmış atomlar elektron şüasının təsiri ilə öz koordinatlarını müəyyən qədər dəyişirlər ki, bu da yekunda atomlar arasındakı məsafələrin və buna uyğun olaraq qəfəs parametrlərinin dəyişməsinə gətirib çıxarır. Atom koordinatlarına nəzərən Diamond 3.2 proqramında atomlar arasındakı məsafələr təyin edilmiş və şüalanmanın sel sızılıqlarından asılılıqları qurulmuşdur. Atomlar arasındakı məsafələrin orta qiymətləri üçün alınmış asılılıqlardan müəyyən edilmişdir ki, qəfəs parametrlərinin qiymətlərinin şüalanma selindən asılılığında olduğu kimi, şüalanma selinin qiyməti artdıqca, atomlar arasındakı məsafələrin qiymətlərində də azalma müşahidə edilir.

Şəkil 4.2.3-də verilmiş qrafiklərdən görünür ki, şüalanma seli artdıqca B – B, B – C və C – C atomlar arasındakı məsafələrin orta qiymətlərində xətti (qara xətlər) funksiyaya oxşar olaraq: $d_i = d_0 - k_i D$ qanunu ilə azalma baş verir. B – B atomları üçün: $d_{B-B} = 5.63 - 4.44 \cdot 10^{-5} \cdot D \cdot 10^{16}$, B – C atomları üçün: $d_{B-C} = 5.63 - 4.44 \cdot 10^{-5} \cdot D \cdot 10^{16}$ və C – C atomları üçün isə: $d_{C-C} = 5.63 - 4.44 \cdot 10^{-5} \cdot D \cdot 10^{16}$ qiymətləri alınmışdır. Mürəkkəb quruluş strukturuna malik bor karbid kristalında bor və karbon atomunun fərqli konsentrasiyalarda raman spektrləri tədqiq olunmuşdur [153]. Tədqiqat isləri B_{12} , $B_{11}C$ icosahedra, C-B-C və C-B-B zəncirlərinin fərqli tezlikdə dinamikası və qəfəsin hərəkəti haqqında daha dolğun məlumat verir. Qrup nəzəriyyəsinə görə $(B_{12})CBC$ və yaxud $(B_{12})CCC$ struktur şəklində formalaşmış bor karbid kristalında mövcud on bir (11) aktiv Raman modalarında beşi (A_{1g}), altısı isə (E_g) simmetriya tipindədir [154, 205, 280, 286]. Bizim tədqiqatlarımızda yüksək elektron selində şüalandırılmış bor karbidin kristal qəfəsin hərəkət dinamikası və disordered (pozulmuş) rabitələrin təbiəti ətraflı tədqiq olunmuşdur.



Şəkil 4.2.3. Atomlar arası məsafənin elektron selinin sıxlığından asılılığı.

Şəkil 4.2.4-də bor karbid kristalının şüalanmamış və müxtəlif elektron selində şüalandırılmış Raman spektrləri verilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, şüalanmamış bor karbid kristalının 11 Raman-aktiv spektri mövcuddur (Cədvəl 4.2.2).



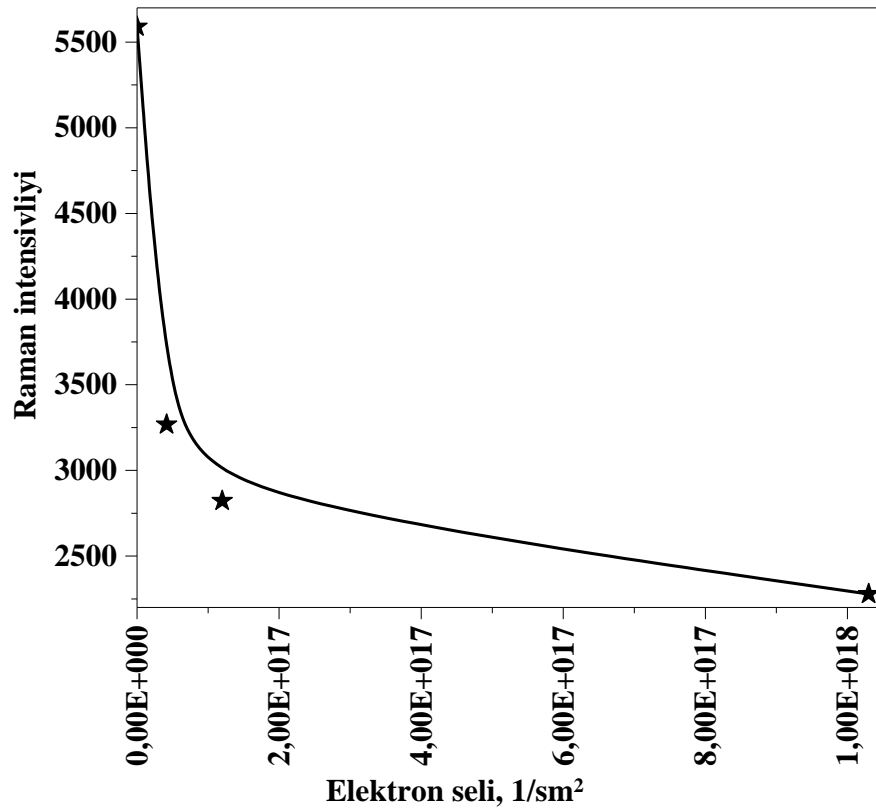
Şəkil 4.2.4 Bor karbid kristalının şüalanmamış və müxtəlif elektron selində şüalandırılmış Raman spektrləri.

Cədvəl 4.2.4. Bor karbid kristalının müxtəlif elektron selində şüalanmadan sonra Raman aktivləri.

Şüalanamış kristal				$4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$			
N	<i>Pikin vəziyyəti</i> (sm^{-1})	<i>Simmetriya tipi</i>	<i>İntensivlik</i>	No	<i>Pikin vəziyyəti</i> (sm^{-1})	<i>Simmetriya tipi</i>	<i>İntensivlik</i>
1	270	A1g	s	1	270	A1g	s
2	323	A1g	s	2	323	A1g	s
3	479	Eg	s	3	479	Eg	s
4	530	Eg	s	4	530	Eg	s
5	730	Eg	s	5	730	Eg	s
6	817	A1g	s	6	817	A1g	s
7	1004	?	s	7	1004	?	s
8	1084	A1g	s	8	1084	A1g	s
9	1390	?	s	9	-	-	-
10	1569	?	s	10	-	-	-
$1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$				$1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$			
N	<i>Pikin vəziyyəti</i> (sm^{-1})	<i>Simmetriya tipi</i>	<i>İntensivlik</i>	No	<i>Pikin vəziyyəti</i> (sm^{-1})	<i>Simmetriya tipi</i>	<i>İntensivlik</i>
1	270	A1g	s	1	-	-	-
2	323	A1g	s	2	-	-	-
3	479	Eg	s	3	479	Eg	s
4	530	Eg	s	4	530	Eg	s
5	730	Eg	s	5	730	Eg	s
6	817	A1g	s	6	817	A1g	s
7	1004	?	s	7	-	-	-
8	1084	A1g	s	8	1084	A1g	s
9	-	-	-	9	-	-	-
10	-	-	-	10	-	-	-

Həmçinin verilmiş Raman aktiv modalarının spektrləri borun digər strukturlu birləşmələri ($B_{10.37}C$, $B_{8.52}C$, $B_{7.91}C$, $B_{6.3}C$ və $B_{4.3}C$) ilə müqayisə edilmiş və müəyyən

olunmuşdur ki, tədqiq etdiyimiz (B₁₂)CBC kristalı yüksək kristallik dərəcəsinə malikdir. Struktur analiz nəticələri bir daha göstərdi ki, bor və karbon atomları 6.5:1 nisbətindədir və B₁₃C₂ struktur şəklində formalaşmışdır. Şəkil 4.2.4-dən görüldüyü kimi Raman spektrləri nazik (intensiv) və yayılmış şəkildədir. Yayılmış effektlər bor karbid kristalında 270, 323, 730, 820, 1007, 1087, 1395 və 1574 sm⁻¹ Raman tezliklərində müşahidə olunmuşdur. Yayılmış spektrlərin daha çox amor fazaya və yaxud qismən pozulmuş kristal struktur haqqında məlumat verir. Həmin Raman spektrlərindən 270/323 sm⁻¹, 730/817 sm⁻¹ və 1004/1084 sm⁻¹ üç növdə dublet piklər müşahidə olunmuşdur. Dublet piklər A_{1g} simmetriya tipinə malik olan üç B-C icosahedranın ekvatorial beş bucaqlı formasını dəqiq modalarıdır. B-B Raman modalarının daha aktiv fazası isə 1072-1084 sm⁻¹ müşahidə olunmaqdadır. Şəkil 4.2.5-də B-B icosahedra modasının intensivliyinin müxtəlif elektron intensivliklərdə asılılıq qrafiki verilmişdir.



Şəkil 4.2.5. B-B icosahedra modasının intensivliyinin müxtəlif elektron sel sıxlıqlarında.

Aydın müşahidə olunur ki, yüksək elektron sel sıxlığında B-B rəqs modaları tamamilə pozulmuş haldadır. Lakin 485 sm^{-1} və 536 sm^{-1} intensiv Raman spektrləri bor karbidin kristalının rəqs modasında $B_{11}C$ zəncirli quruluşun rəqslərinə uyğun gəlir. Yüksək elektron selində şüalandırılmış kristalların Raman spektrlərindən aydın görünür ki, yayılmış bütün spektrlər tamamilə degredasiya halına keçir. Amor fazada olan olan struktur daha yüksək dərəcəli amorf fazaya keçid etmiş olur. İntensiv 485 sm^{-1} və 536 sm^{-1} spektrlərin intensivliyi şüalanmamış kristal ilə nisbətdə 7 dəfə yarım eni isə dəyişmədən qalır. Bor karbid kristalının ekvatorial mərkəzində dayanan bor atomu yaxın beş atomu ilə qarşılıqlı təsirdə olur. Ən yaxın və ən uzaq atomla arası qarşılıqlı təsir qüvvəsi [127] referansında verilmiş riyazi ifadədən istifadə olunaraq hesablanmışdır.

$$f_I = \frac{m}{2(5-\sqrt{5})} (\omega_1^2 + \omega_2^2) \pm \sqrt{(\omega_1^2 + \omega_2^2)^2 - 8\omega_1^2\omega_2^2} \quad (4.2.1)$$

$$f_{IC} = \frac{m}{2} (\omega_1^2 + \omega_2^2) - \frac{(5-\sqrt{5})}{2} f_I \quad (4.2.2)$$

ω_1 və ω_2 dublet modaların uyğun tezlikləridir. $270/323 \text{ sm}^{-1}$, $730/817 \text{ sm}^{-1}$ və $1004/1084 \text{ sm}^{-1}$ dublet Raman spektrlərində qarşılıqlı təsir qüvvəsi hər bir şüalanma seli üçün hesablanmışdır (Cədvəl 4.2.3).

Müəyyən olunmuşdur ki, elektronun selinin intensivliyindən asılı olaraq atomlar arası qarşılıqlı təsir qüvvəsi azalır ki, buda yerinə yetirilmiş təcrübələrin ardıcılığını təsdiq etmiş olur. Rentgen difraksiyası metodu ilə aparılmış quruluş tədqiqatları nəticəsində məlum olmuşdur ki, $B_{13}C_2$ -un kristal quruluşu kifayət qədər mürəkkəb xarakter daşıyır. Ritveld metodu ilə atomların koordinatlarını təyin edərkən müəyyən edilmişdir ki, bəzi karbon atomları (C11 atomları) bor atomları ilə (B1) eyni koordinatda yerləşirlər və onları əvəz edirlər. Bu hadisə baş verdiyi zaman bor atomları (B11 atomları) karbon atomlarını (C1) əvəz edirlər. Buna baxmayaraq, kifayət qədər yüksək simmetriyaya (R-3m – 166) malik olan bor karbid kristalları tədqiq edilən intensivlik intervalında öz kristal quruluşlarını saxlayırlar. Bunun əsas səbəbi, kristal

quruluşun düyünlərində bor atomlarının öz aralarında füllərə bənzər birləşmələri və onların da öz aralarında birləşərək elementar qəfəsi formalaşdırmasıdır.

Cədvəl 4.2.3. Dublet Raman spektrlərində qarşılıqlı təsir qüvvəsi müxtəlif elektron selində.

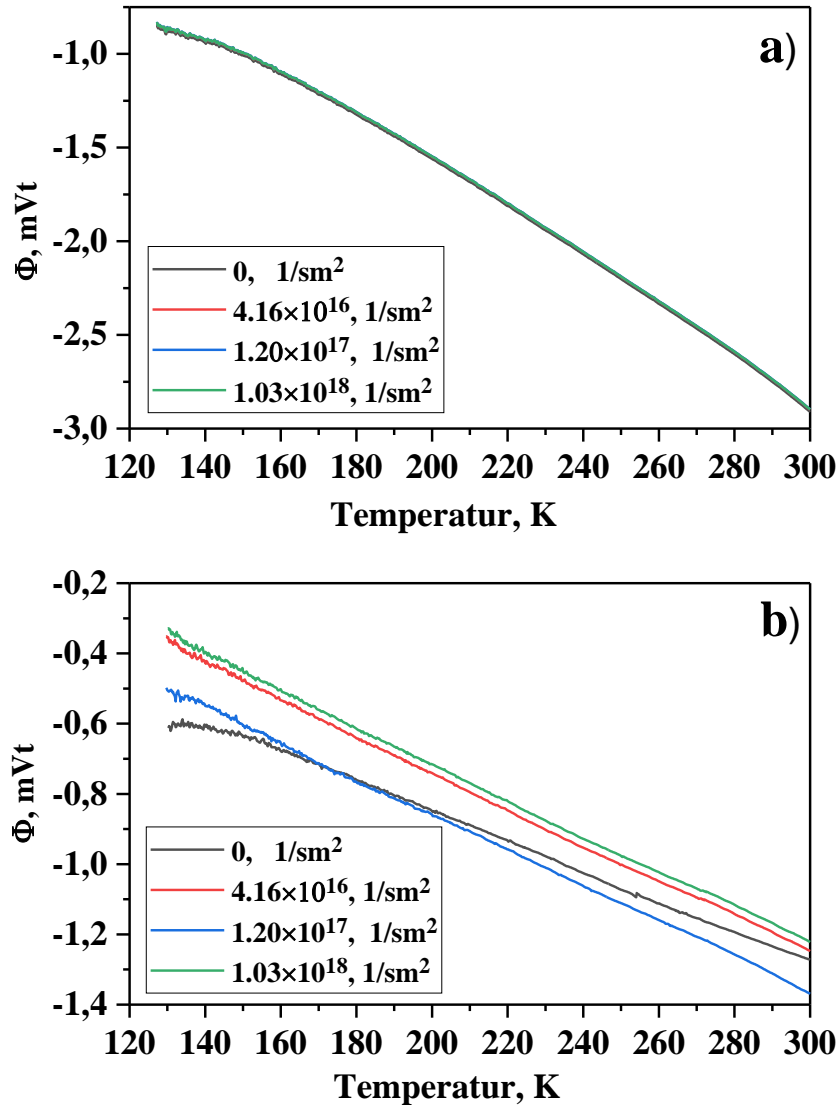
<u>Qüvvə sabiti; m_{din}, A⁻¹</u>	<u>Elektron seli, sm²</u>	<u>Eksperimental nəticələr</u>
f_I	şüalanmamış	0.386
f_{IC}		2.32
f_I	4.16×10^{16}	0.356
f_{IC}		2.21
f_I	1.20×10^{17}	0.338
f_{IC}		2.17
f_I	1.03×10^{18}	0.303
f_{IC}		2.12

Əlavə olaraq qəfəs parametrlərinin şüalanma selinin sıxlığından asılı olaraq dəyişmə mexanizmi müəyyən edilmişdir. Raman tədqiqatları ilə müəyyən olunmuşdur ki, 485 sm^{-1} və 536 sm^{-1} intensiv Raman spektrləri bor karbidin kristalının icosahedral modasına, 270, 323, 730, 820, 1007, 1087, 1395 və 1574 sm^{-1} raman tezliklərində yayılmış effektlər isə bor karbid kristalının amorfaza və yaxud qismən pozulmuş kristal struktur haqqında məlumat verir. Həçinin hər bir raman modası üçün simmetriya qrupları və atomlar arasındakı qarşılıqlı təsir qüvvəsi hesablanmışdır.

4.3 Elektron selinin təsiri altında tədqiqat kristallarında istilik selinin və istilik tutumunun öyrənilməsi

Struktur analizi və Raman tədqiqatları əyani şəkildə göstərdi ki, B_4C kristal strukturunda qəfəs parametrlərinin dəyişmə kinetikasi olduqca zəifdir. Strukturda atomlar

arası məsafənin kiçik qiymətlərdə dəyişməsi, istilik sel funksiyası və istilik tutumunun $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında effektivli tədqiq etməyə imkan yaradır. Məhz bu səbəbdən tədqiqatlarda 2.5 MeV enerjili elektronlarla $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$ və $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron selində şüalandırılmış kristalların termik xassələri tədqiq olunmuşdur. Şüalanmadan sonra ilk tədqiq olunan bor karbid kristalı $100 \geq T \geq 146$ K temperatur intervalında istilik selinin ötürülməsi kiçik sürətli olduğu halda $146 \geq T \geq 300$ K daha aktiv fazada dəyişir, yəni iki fazalı istilik ötürülmə mexanizmi baş verir (Şəkil 4.3.1).



Şəkil 4.3.1. Müxtəlif elektron selində $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$ və $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ şüalandırılmış bor karbid a) və bor silikat b) kristallarının $100 \geq T \geq 300$ K temperatur intervalında istilik seli funksiyasının dəyişməsi.

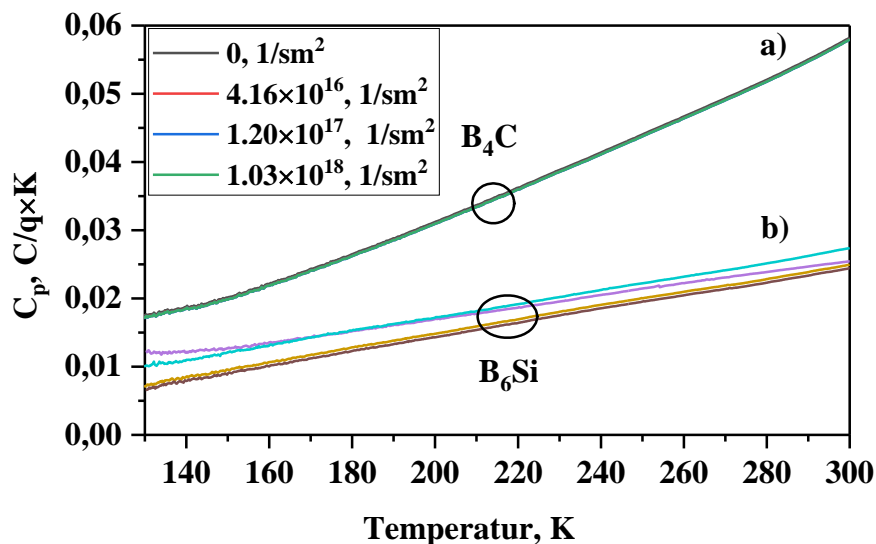
Şəkil 4.3.1-dən göründüyü kimi bor silikat üçün istilik selinin kinetikasi bölgələrə bölünür. Buna baxmayaraq, müxtəlif atom konsentrasiyaları mövcud bor karbid termodinamik cəhətdən 10-2000 K temperatur aralığında Gibbs əmələgəlmə enerjisi karbon konsentrasiyasının asılıdır [18] və bor silisid kristalı üçün termofizik kinetikanın qiyməti məlumdur [173]. Bununla birlikdə, aşağı temperaturlarda kristallar qamma, elektron, ağır ion və neytron şüalanmanın təsiri altında termofizik davranış barədə məlumat verilmir və ətraflı araşdırılmamışdır. Lakin bor silikat kristalı üçün istiliyin ötürülməsi və selinin dəyişməsi eyni mexanizmi ilə gedir. Xətti qanuna uyğunluqla dəyişən kinetikada faza keçidi müşahidə olunmursa baş verən bütün termofiziki proseslər xüsusi istilik tutumu üzərində qurulur və bir-biri ilə əlaqəlidir. DSC metodu ilə təyin olunan xüsusi istilik tutumunun kəmiyyətə qiyməti haqqında və istilik selinin ortalama qiyməti bəzi ədəbiyyatlarda tədqiq olunmuşdur [220, 222].

Lakin istilik selinin təcrübi təyin olunmuş qiyməti xüsusi istilik tutumunun və entropiyanın təcrübi qiymətinin dəqiq təyin olunmasına gətirib çıxarır. Təyin olunmuş istilik selinin qiyməti istilik tutumu və termodinamik funksiyaların qiymətlərinin dəqiq təyin olunmasına təsir edir. Bütün bunları nəzərə alsaq istilik selinin qiyməti üçün (4.3.1) tənliyi üçün aşağıdakı ifadəni almış olarıq. Əlavə olaraq şüalanma faktorunu daxil etsək onda (4.3.1) ifadəsi daha dəqiq proseslər üçün yazılmış olar. D şüalanma hesabına qəbul olunan doza kimi qiymətləndirsək təcrübi nəticələrlə uzlaşa bilən yeni riyazi ifadəni təyin etmiş olarıq.

$$C_p = f(D) \cdot K_{\Phi}(T) \cdot \frac{\Phi_N - (\Phi_{boş} + \Phi_{cem})}{\Phi_S - (\Phi_{boş} + \Phi_{cem})} \cdot \frac{m_S}{m_N} \cdot C_S + \frac{m_S - m_N}{m_N} \cdot C_{pən} \quad (4.3.1)$$

Burada $K_{\Phi}(T)$ kalibrasiya faktoru hansı ki, istilik sel funksiyasından və temperaturdan asılıdır; Φ_N - kristalın istilik sel funksiyası; Φ_S - standart nümunələrin istilik sel funksiyası; $\Phi_{boş}$ boş pənin yerləşdiyi nümunədəki istilik sel funksiyası; Φ_{cem} həm standart həm də kütlə olmadan kristalın istilik selinin dinamikası; m_S - standart nümunəsinin kütləsi; m_N - nümunənin kütləsi; C_S - standart nümunəsinin xüsusi istilik tutumu and $C_{pən}$ - pənin xüsusi istilik tutumu və D şüalanma intensivliyi və yaxud

adsorbsiya olunmuş dozanı xarakterizə edir. Bundan sonra istilik selinin temperaturdan asılı olan funksiyalarında həqiqi qiymətindən kalibrasiya faktor və istilik tutumunun təyini ilə aktivləşmə enerjisinə və termodinamik funksiyalara keçid mümkündür. Şəkil 4.3.2-də $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında bor karbid and bor silikat kristalları üçün müxtəlif şüalanmalarda xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığı verilmişdir.



Şəkil 4.3.2. Müxtəlif elektron seli ilə şüalanmış bor karbid və bor silisid kristallarının $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında xüsusi istilik tutumu.

Müəyyən olunmuşdur ki, şüalanma növündən və şüalanma selindən asılı olmayaraq bor karbid kristalının xüsusi istilik tutumunun dəyişmə kinetikasi $T \leq 146$ K temperaturlarda fərqli mexanizmlə, $T \geq 146$ K böyük temperaturlarda isə daha sürətli mexanizmlə artır. Bor karbid kristalı üçün xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığından alınan ($T_1 \geq 146$ K $\geq T_2$ temperatur aralığında) qrafiklərin fitting olunduqdan sonra alınan tənlikləri aşağıdakı kimi ifadə etmək olar.

$$C_{p_1}(T_{T \leq 146}) = f_1(T_{T \leq 146}) = 0.00212 + 1.185 \cdot 10^{-4} \cdot T_{T \leq 146} \quad (4.3.2)$$

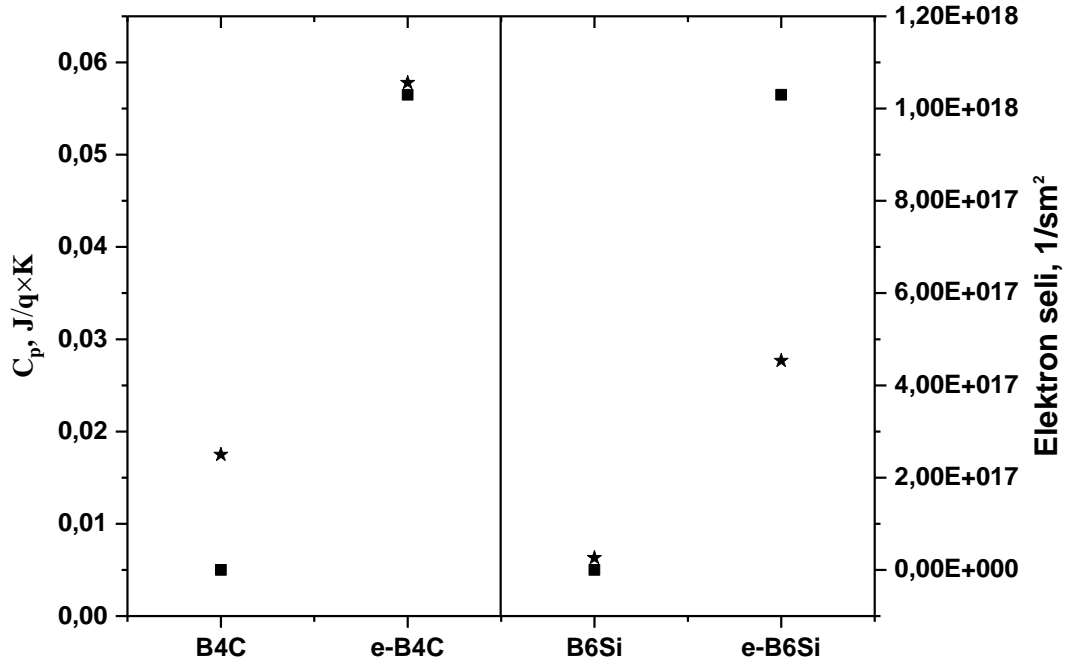
$$C_{p_2}(T_{T \geq 146}) = f_2(T_{T \geq 146}) = -0.01887 + 2.5259 \cdot 10^{-4} \cdot T_{T \geq 146} \quad (4.3.3)$$

Alınan təcrübi nəticələr bizə söyləməyə əsas verir ki, daha kiçik temperaturlarda istilik selinin bor karbid kristalında ötürülməsi ikili mexanizmlə baş verir. Kiçik temperaturlarda yalnız termik fonon-fonon qarşılıqlı təsiri ilə ötürülən istilik seli ikili

şəkildə özünü ehtiva edir. İstilik selinin temperatur asılılığında baş verən kinetika, istilik tutumunun temperatur asılılığında da özünü göstərir. İstilik tutumunun temperatur asılılığından aydın görünür ki, bor karbid kristalı elektron selinin təsiri altında 100 K temperatur ətrafında xüsusi istilik tutumu 0.0170-0.0176 C/(K×q) intervalında dəyişir. Həmçinin müəyyən olunmuşdur ki, şüalanma növündən və şüalanma selindən asılı olmayaraq bor silikat kristalı üçün də xüsusi istilik tutumunun mexanizmi bor karbid kristalından bir qədər fərqlənir. Bor silikat kristalı istilik selinin ötürülmə mexanizmi xəttidir. Əlavə olaraq bor silikatda üçün xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığından alınan qrafikin fitting qiyməti aşağıdakı kimi ifadə etmək olar.

$$C_p(T) = -0.01645 + 2.4188 \cdot 10^{-4} \cdot T \quad (4.3.4)$$

Kiçik temperaturlarda fonon-fonon qarşılıqlı təsirinin ötürülməsi yalnız bir mexanizmdir. Bor silikat kristalı hər iki şüalanmanın təsiri altında 100 K temperatur ətrafında nümunələrin xüsusi istilik tutumu 0.005627-0.0129 C/(K×q) intervalında dəyişir. Lakin bu bor karbid kristalı ilə müqayisədə olduqca kiçik qiymətdir. Bu şəkildə hər iki kristalda alınması mütləq şəkildə onların kristal quruluş və sıxlıq faktoru ilə bağlıdır. Sıxlığın böyüməsi ilə keramik nümunələrdə kiçik temperaturlarda fonon-fonon qarşılıqlı təsiri daha böyükdür və bu daha çox xətti funksiya ilə ifadə olunur. Məhz müxtəlif sıxlıqlara malik bor karbid və bor silikat kristalarında təcrübi müşahidə olundu. Hər bir şüalanma üçün xüsusi istilik tutumunun kinetikasi şəkil (4.3.3)-də verilmişdir.

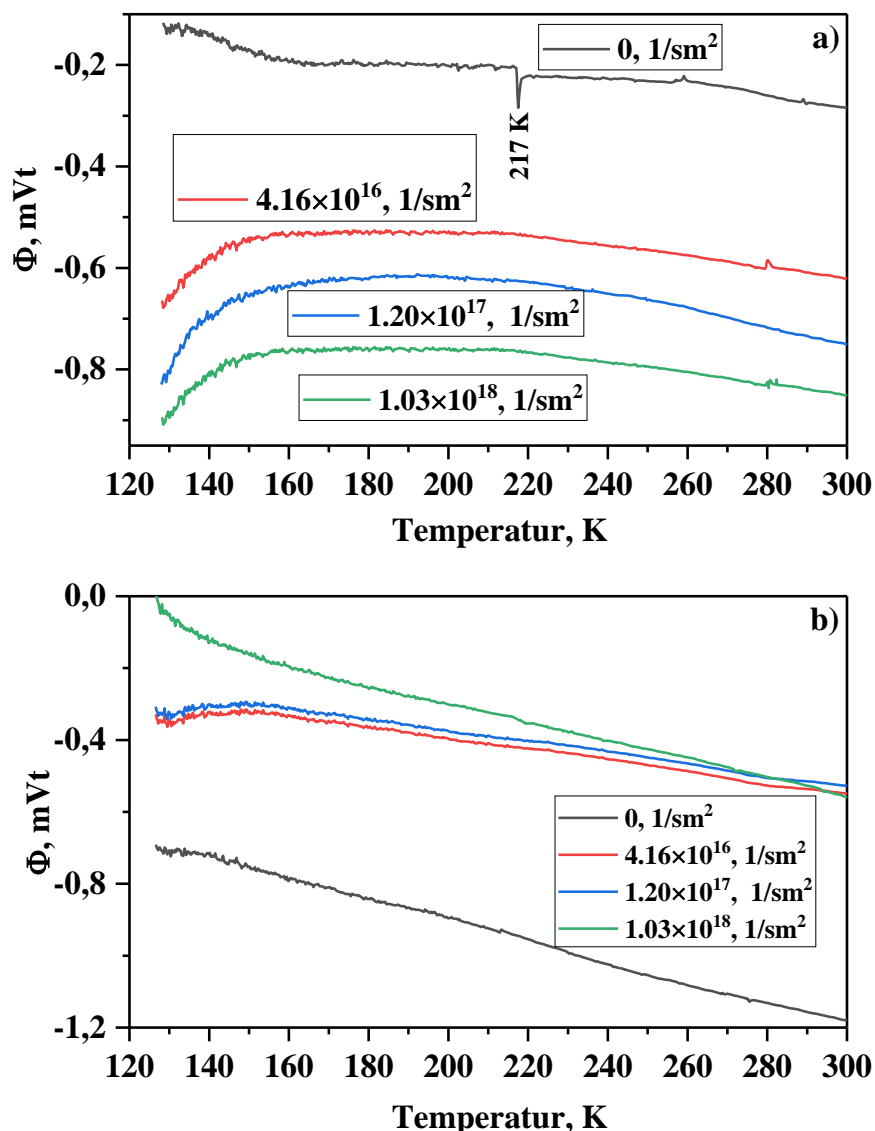


Şəkil 4.3.3. $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında xüsusi istilik tutumunun kinetikasi.

Şəkil (4.3.3)-də xüsusi istilik tutumunun dəyişmə kinetikasi göstərir ki, bor karbid kristalı $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında yüksək enerjili elektron seli ilə şüalandırdıqdan sonra 3.48 dəfə artır. Bor silikat kristalında isə yüksək enerjiyə malik elektronlarla şüalandırdıqda istilik tutumu 4.40 dəfə artır. Təcrübi olaraq onu göstərir ki, bor silikat kristalında xüsusi istilik tutumunun qiyməti daha sürətlə artır. Borun BN və B_2O_3 kristallarında termofiziki xassələrində istil seli funksiyasının kinetikasi tədqiqatçıların diqqət mərkəzindədir [26,150, 151]. Bu kristalların məxsus olduğu sinif və quruluş xassələrindən asılı olaraq əmələ gətirdikləri birləşmələrin verilmiş temperatur intervalında tətbiq istiqamətləri fərqlidirlər [25]. Optik və elektronik xüsusiyyətlərinə görə fərqli və üstün xassələr göstərən bor nitrid və bor oksidi xüsusi qeyd etmək lazımdır [24, 32]. Materialşünaslıqda bor nitridin özünə məxsus xüsusiyyətləri, B və N kimyəvi elementlərin B-N sistemində yaratdığı müxtəlif modifikasiyalı strukturlar haqqında hələdə açıq sualların olmasına baxmayaraq bəzi quruluşları haqqında məlumatlara tədqiqat proyektlərində və ədəbiyyatlarda rast gəlmək mümkündür [90]. Yüksək temperaturlarda oksidləşməyə davamlı, kimyəvi stabilliyi, yüksək temperaturlarada dayanıqlı, elektrik izolyatorların hazırlanması və

bu kimi üstün xüsusiyyətlərə malik olması biotexnikada və elektronikada böyük əhəmiyyət kəsb etmiş və möcüzə material anlayışını əbəs yerə yaratmamışdır [221]. Araşdırılan elmi ədəbiyyatlardan belə bir nəticəyə gəlmək olar ki, $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında bu kristalların termofiziki xassələri şüalanmanın təsiri altında tədqiq olunmamış və yaxud olduqca məhdud sayda ədəbiyyatlara rast gəlmək olar. Məhz bütün bunları nəzərə alaraq yüksək elektron seli ilə şüalandırılmış kristalların aşağı temperatur intervalında termofiziki xassələri geniş tədqiq olunmuşdur. İstilik selinin ötürülmə mexanizmi hər bir şüalanma üçün ətraflı araşdırılmışdır. Şəkil 4.3.4 - də $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında bor nitrid və bor oksid kristallarını yüksək enerjili və yüksək intensivlikli elektronlarla şüalanmadan sonra istilik seli funksiyası spektrləri göstərilmişdir. Bor nitrid və bor oksid nümunələri üçün fərqli elektron intensivliyində istilik selinin kinetikasi iki bölgəyə bölünür.

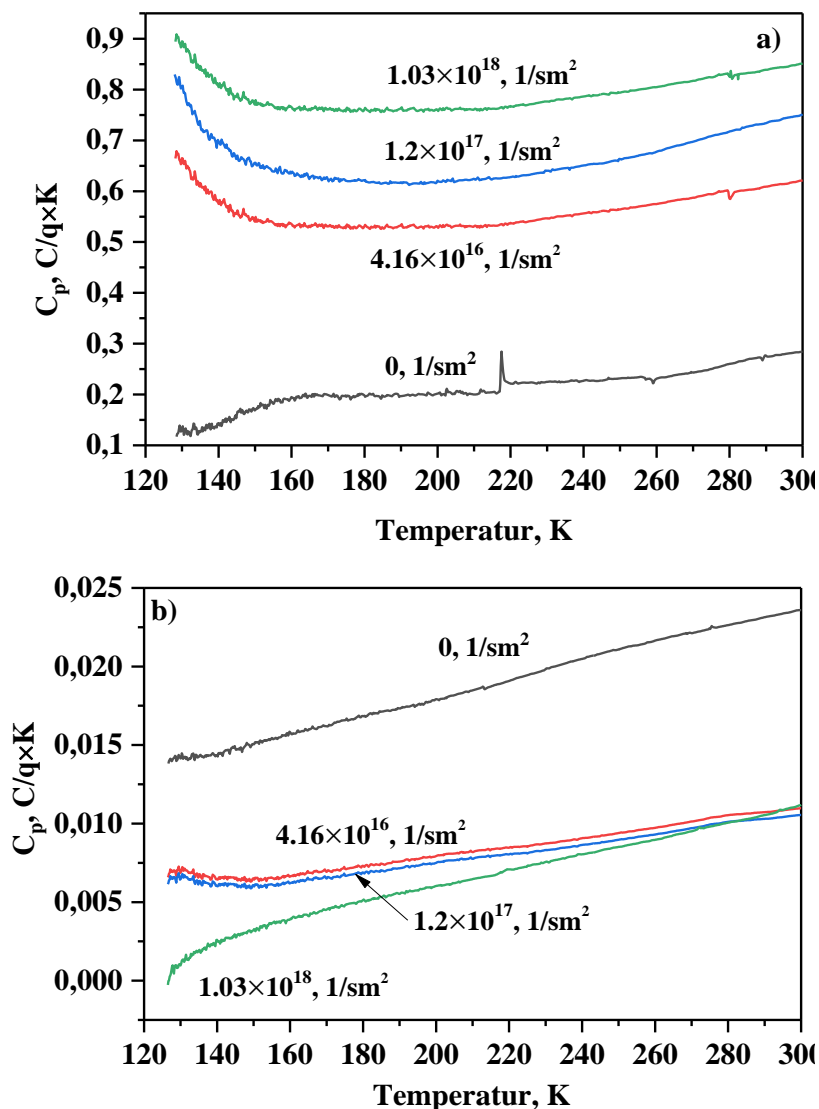
- $125 \leq T \leq 150$ K fərqli mexanizmlə istilik seli funksiyasının qiyməti azalır
- $150 \leq T \leq 300$ K xətti mexanizmi



Şəkil 4.3.4. Bor nitrid a) və bor oksid b) kristallarının istili seli funksiyası müxtəlif elektron selində $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^{-2}$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^{-2}$ və $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^{-2}$ şüalanmadan sonra.

Bor nitrid kristalında müxtəlif elektron selinin təsiri altında istilik selinin yayılma mexanizmi göstərir ki, şüalanma selinin intensivliyi artması istiliyin ötürülməsinə aktiv təsir edir. Ancaq şüalanmamış kristalda 217 K -də yeni ekzoeffekt müşahidə olunur. Ədəbiyyatda mərkəzi piki 217K olan zirvəyə aid heç bir məlumat yoxdur və düşünürük ki, sintez prosesində maqnit xassəyə malik qatışıq elementləri maqnit faza keçidi yaradır. 150 K -dən sonra istilik prosesi xətti funksiyadır və istilik axını funksiyası temperatur aralığında xətti qanunla dəyişir. Ədəbiyyat, aşağı temperaturlarda DSC əyrlərinin bor nitrid kristalı üçün araşdırılmadığını göstərməmişdir. Əlavə olaraq, elektron selinin təsiri altında DSC spektrlərinin kinetikasında bor oksidin dəyişmə

mexanizmi bor nitriddə olduğu kimi baş verir. Yalnız şüalanmamış bor oksid kristalında istilik selinin funksiyası xətti şəkildə dəyişir ki, istilik tutumunun xətti artmasını göstərir. $T \leq 150\text{K}$ and $T \geq 150\text{K}$ temperature interval ikili mexazim istilik seli üçün kvant region kimi qeyd etmək olar. Lakin təcrübənin və cihazın texniki parametirlərinə görə 2-100 K intervalında müşahidə olunmadığı üçün bu region tamamlanmış şəkildə qalmışdır.



Şəkil 4.3.5. $120 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında şüalanmamış və $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$ və $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron selində şüalandırılmış bor nitrid a) və bor oksid b) kristallarının xüsusi istilik tutumunun dəyişməsi.

Şüalanmış kristalların DSC spektrindəki xətti qanunauyğunluqla dəyişən kinetika müşahidə olunur və baş verən bütün termofiziki proseslər istilik tutumu ilə izah olunur.

Müxtəlif tədqiqat işlərində xüsusi istilik tutumunun kəmiyyətə qiymətinin təyin olunmasında ən dəqiq analitik metodlardan biri kalorimetrik metodu hesab olunmaqdadır. Bir sıra tədqiqatlarda istilik selinin qiymətinin dəqiq təyin olunması üçün müxtəlif yanaşmalar seçilir. Dəqiq təyin olunmuş istilik seli ilə xüsusi istilik tutumunu, termodinamik diaqramaları və digər xassələrin dəqiq təyin olunmasına əsas verir.

Şəkil 4.3.5-də $120 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında şüalanmamış və 4.16×10^{16} sm², 1.20×10^{17} sm² və 1.03×10^{18} sm² elektron selində şüalandırılmış bor nitrid və bor oksid kristallarının xüsusi istilik tutumunun dəyişməsi verilmişdir.

Müəyyən olunmuşdur ki, elektronun sel sıxlığından asılı olmayaraq bor nitrid və bor oksid kristallarında xüsusi istilik tutumunun dəyişmə kinetikasında baş verən istilik selinin mexanizmləri eynidir. Alınan təcrübələr nəticələr əsas verir ki, daha kiçik temperaturlarda istilik seli bor nitrid kristalında ötürülməsi ikili mexanizmlə baş verir. Kiçik temperaturda yalnız fonon fonon qarşılıqlı təsiri ilə ötürülən istilik seli özünü ikili şəkildə ehtiva edir. İstilik selinin temperatur asılılığında baş verən kinetika, istilik tutumunun temperatur asılılığında eyni asılılığı göstərir. İstilik tutumunu temperatur asılılığından aydın görünür ki, bor nitrid kristalı elektron selinin təsiri altında 120 K-də ədədi qiyməti çox kiçikdir. Həmçinin müəyyən olunmuşdur ki, şüalanma növündən və şüalanma selindən asılı olmayaraq bor oksid kristalı üçün xüsusi istilik tutumunun mexanizmi bor nitrid kristalından tam fərqlənir. Bor oksid kristalında istilik selinin ötürülmə mexanizmi dəyişmir. Kiçik temperaturlarda fonon-fonon qarşılıqlı təsirinin ötürülməsi yalnız bir mexanizmdir. Bor oksid kristalının hər iki şüalanmanın təsiri altında 300 K xüsusi istilik tutumu bor nitrid kristalı ilə müqayisədə 2.15 dəfə kiçikdir. Şəkil 4.3.5-də hər iki kristal üçün xüsusi istilik tutumu kristal quruluş və sıxlıq faktoru ilə bağlıdır. Sıxlığın artması ilə keramik nümunələrdə kiçik temperaturlarda fonon-fonon qarşılıqlı təsiri daha böyükdür və bu daha çox xətti funksiya ilə ifadə olunur.

Məhz müxtəlif sıxlıqlara malik bor nitrid və bor oksid kristallarında bunları təcrübədə müşahidə olunur. Hər bir şüalanma üçün xüsusi istilik tutumunun kinetikasi göstərir ki, bor nitrid kristalı $120 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında ağır ionlarla

şüalandırıldıqda istilik tutumun yüksək enerjili elektronlarla müqayisədə artır. Həmçinin bor oksid üçün isə yüksək enerjiyə malik elektronlarla şüalandırıldıqda istilik tutumu qiyməti ağır ionlarla şüalanmadan fərqlidir. Təcrübələr göstərir ki, bor oksid kristallarında xüsusi istilik tutumunun qiyməti daha sürətlə artır. Ağır ionlarla şüalanmadan sonra istilik tutumunun daha aktiv fazada dəyişməsi qarşılaşdırılmış təcrübələrdə bir birinə tamamilə təsdiqlənmiş olur.

Şüalanmamış bor karbid kristalında 120 K temperaturda istilik keçiriciliyinin qiyməti $0.0247 \text{ Vt}/(\text{sm}\times\text{K})$, $4.16\times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20\times 10^{17} \text{ sm}^2$, $1.03\times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron selində şüalandırmadan sonra kristalların istilik keçiriciliyinin qiyməti $0.0243 \text{ Vt}/(\text{sm}\times\text{K})$, $0.02420 \text{ Vt}/(\text{sm}\times\text{K})$ və $0.02401 \text{ Vt}/(\text{sm}\times\text{K})$ olması müəyyən olunmuşdur. $T\leq 146 \text{ K}$ qiymətindən sonra bor karbidin istilik selinin qiymətində kiçik artım müşahidə olunur, 300 K temperaturda istilik keçiriciliyinin qiyməti $4.16\times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20\times 10^{17} \text{ sm}^2$, $1.03\times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron seli üçün $0.0844 \text{ Vt}/(\text{sm}\times\text{K})$, $0.0827 \text{ Vt}/(\text{sm}\times\text{K})$ və $0.08 \text{ Vt}/(\text{sm}\times\text{K})$ bərabərdir. Bor silikat kristalında 120-300 K temperatur intervalında istilik keçiriciliyinin qiyməti $0.0175\text{-}0.035 \text{ Vt}/(\text{sm}\times\text{K})$, $4.16\times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20\times 10^{17} \text{ sm}^2$, $1.03\times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron seli üçün $0.015\text{-}0.0412 \text{ Vt}/(\text{sm}\times\text{K})$, $0.010\text{-}0.0322 \text{ Vt}/(\text{sm}\times\text{K})$, $0.009\text{-}0.0335 \text{ Vt}/(\text{sm}\times\text{K})$ intervalında dəyişməsi müəyyən olunmuşdur. Yüksək enerjili elektronlarla şüalanmış bor karbid və bor silisid kristallarının termik diffuziyası araşdırılmış və müəyyən olunmuşdur ki, tədqiqat kristallarını termik diffuziyasının dəyişməsi çox kiçikdir. Termik diffuziyanın qiyməti 100-300 K temperatur intervalında bor karbid kristalı üçün $0.791\text{-}0.806 \text{ sm}^2/\text{san}$, $4.16\times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20\times 10^{17} \text{ sm}^2$, $1.03\times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron seli üçün $0.808\text{-}0.794 \text{ sm}^2/\text{san}$, $0.798\text{-}0.716 \text{ sm}^2/\text{san}$, $0.767\text{-}0.690 \text{ sm}^2/\text{san}$ olduğu təyin olunmuşdur. Digər tərəfdən termik diffuziyanın qiyməti 188 K müxtəlif intensivliklərdə maksimum qiymətinə $0.819\text{-}0.810 \text{ sm}^2/\text{san}$ qiymətinə bərabərdir. Həmçinin 100-300 K temperatur intervalında bor silikat nümunəsi üçün termik difuziyanın qiymətinin $0.576\text{-}0.591 \text{ sm}^2/\text{san}$, $4.16\times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20\times 10^{17} \text{ sm}^2$, $1.03\times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron selində $0.577\text{-}0.579 \text{ sm}^2/\text{san}$, $0.54\text{-}0.559 \text{ sm}^2/\text{san}$, $0.44\text{-}0.566 \text{ sm}^2/\text{san}$ təyin olunmuşdur. Tədqiq olunan temperatur intervalında termik diffuziyanın qiyməti bor karbid və bor silikat kristalları

üçün azalması qeyd olunmuşdur ki, fonon-fonon qarşılıqlı təsir mexanizmi ilə izah olunmuşdur.

V FƏSİL

SÜRƏTLİ AĞIR İONLARLA ŞÜALANDIRILMIŞ B_4C , BN , B_6Si VƏ B_2O_3 KRİSTALLARININ SƏTH MÖRFOLOGİYASI, TERMOFİZİKİ VƏ TERMODİNAMİK KİNETİKASI

Beşinci fəsildə, B_4C , B_6Si , BN və B_2O_3 tədqiqat nümunələri 167 MeV enerjili, $^{132}Xe^{26+}$ sürətli ağır ionları ilə müxtəlif 5.0×10^{12} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² intensivliklərdə otaq temperaturunda Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutunun Nüvə Reaksiyaları laboratoriyasının “IC-100” sürətləndiricisində yüksək vakuum şəraitində şüalandırılmışdır. Ağır ionların tədqiqat kristallarının səthində nüfuz etmə dərinliyinin riyazi modelləşdirilməsi və molekulyar dinamikası tədqiq olunmuş, səth morfologiyasının struktur mexanizmi ətraflı araşdırılmışdır. Geniş temperatur intervalında argon (Ar) mühtündə isitilik selinin funksiyası, istilik tutumunun kinetikası və termodinamik funksiyaların analizi yerinə yetirilmiş və alınmış termofiziki parametirlərin qiymətləri üçün müqayisəli təhlil aparılmışdır.

5.1 Sürətli ağır ionların təsiri altında kristalların səth morfologiyasında qabarma mexanizmi

Təqdim olunan başlıqda ağır ionların təsiri ilə bərk cisimlərin səth morfologiyasında baş verən unikal proseslərə cəmləşdirilmişdir. İon şüalanma əsasən termo nüvə reaktorlarında əsas rol oynayan xarici təsir amillərindən biri hesab olunmaqdadır. Termo nüvə reaktorlarında parçalanma məhsulları olan yüksək və kiçik enerjili (He və H) ionları reaktorun əsas sütünü sayılan ön divarlarında yarıdığı təsirlərin araşdırılmasında geniş tətbiq olunmaqdadır [44, 76, 90, 97]. Laboratoriya mühitində ion implantasiya, ionların yerdəyişməsi, ion selinin intensivliyinin idarə olunması və qarşılıqlı təsirin öyrənilməsində geniş istifadə olunur [285]. İon implantasiya mikrostrukturda yeni fazanın formalaşdırılmasına, bərk cisimlərin səthinin modifikasiya olunmasına və müxtəlif məqsədli bioloji və tibbi işlərin yerinə yetirilməsində geniş istifadə olunur [36, 100, 227, 271]. Qarşıya qoyulan tədqiqat işində daha çox bərk cisimlərin ağır ionlarla qarşılıqlı təsiri nəticəsində mikro

strukturda yaranan dəyişikliklərin, hədəf kimi seçilmiş kristallarda ölçü faktorunun böyüməsi və itirilən enerjinin xarakteristik təhlili aparılmışdır [197]. Bütün bu proseslərin kombinasiyasında birlikdə hədəf kristalın səth morfologiyasını tamamilə dəyişir. Əlavə olaraq qeyd etmək lazımdır ki, ion implantasiya kristalların səthində radiasiya təsirləri yaratmaqla paralel kimyəvi reaksiyaların baş verməsinə səbəb olur. İon şüalanmanın metodologiyasına qısa giriş ilə başlayaraq bərk cisimlərdə ionların intensiv və enerjiden asılı olaraq təsir mexanizmi, mikrostrukturda yeni fazanın formalaşmasının əsaslandırılması yerinə yetirilməlidir. Əlbətdə ki, yüksək intensivlikli və yüksək temperaturalarda təsirsiz qazların ionları ilə baş verən şüalanmanın effektivliyi, real olaraq nüvə reaktorlarında divarlarında yaranan proseslərə ekvivalentliyi saxlamaq şərti ilə laborator şəraitdə həyata keçirilməsi mümkündür. Ağır ionların bərk cisimlərin səthində yaratdığı dəyişiklikləri müxtəlif metodlarla tədqiq etmək mümkündür və hər bir təcrübi metodun özünə məxsus üstünlükləri mövcuddur. Ən başlıcası səthdən daxil olan ionların hesabına atomların sürüşməsi, ionların kristalın qalınlığı boyunca paylanması, ion plazma implantasiya və başqa kimi prosesləri ardıcıl sadalamaq mümkündür.

Bütün sadalanan metodların hər biri haqqında qısa məlumat vermək mümkündür. Həmçinin müqayisəli tədqiqatlar texniki məsələlərin həlli üçün ən yaxşı qiymətləndirmə hesab etmək olar. İon şüalanmanın təməl prinsiplərində təyin olunmuş ion seli bir neçə keV başlayaraq MeV enerji diapozonuna qədər genişləndirmək mümkündür. İon seli adətən eyni enerjili vahid yüklərdən və təyin olunmuş kütləyə malik olurlar. Elastiki qarşılıqlı təsir prosesinin təbiəti Qaus əyrisi şəklində paylanır, nüfuz etmə dərinliyinin orta qiyməti R_p və paylanmanın ümumi eninin orta maksimumu $2.35R_p$ ilə xarakterizə olunur. Bütün proseslərin əsasında səth morfologiyasında modifikasiya və pozisiyasının dəyişməsi dayanır.

Ağır ionların kristalın daxilinə doğru nüfuz etmə dərinliyi \sqrt{E} ifadəsi ilə dəyişir. Bir sıra sürətləndiricilərdə enerjisi keV tərtibində olan ionlarda nüfuz etmə dərinliyi 100 nm ətrafında dəyişir. Lakin enerjinin MeV tərtibində artması nüfuz etmə dərinliyinin mkm qədər artması müşahidə olunur. Şüalanma zamanı

ionların kristaldan səpilməsi kristalı təşkil edən elementlərin konsentrasiya dəyəri ilə məhdudlaşır. Seçilmiş enerji intervalından asılı olaraq metallarda bu qiymət 2-5 dəfə digər birləşmələrdə 50 % qədər dəyişir. Digər tərəfdən ion implantasiya faza keçidi yaratma effektivliyi kifayət qədər aşağıdır. Bərk cisimlərin səthində ion şüalandırılma zamanı eroziya hadisəsi baş verir. Eroziya sürəti ionların səpilmə əmsalı və səthdən buraxılan atomların orta sayı ilə xarakterizə olunur. Eroziya əmsalı strukturdan, kristalın tərkibindən, kristaldan keçən ionların enerjisi və parametrlərindən və kristalın geometriyasından asılıdır. İonların orta kütlə və enerjisi üçün eroziya əmsalı $0.5 \leq Y \leq 20$ intervalında dəyişir. Səpilmə prosesi zamanı səthdən ion təsirinə məruz qalmış atomların buraxılması baş verir. Şüalanma zamanı ion selinin qarşılıqlı təsirdə olduğu atomlara enerjinin ötürməsi və təsir zamanı atomların sıçrayışlı yer dəyişməsinə səbəb olur. Bəzi hissələrdə əks istiqamətdə hərəkət edən atomlar səthdən tamamilə ayrılır. Məhz səthdən tamamilə ayrılmış atomların səpilmədən böyük payı vardır. Hansı ki, həmin atomların sayı koordinatlarını dəyişən və geri təpməyə məruz qalan atomların miqdarı ilə düz mütənasibdir. Xətti kaskad rejimində təpməyə məruz qalan atomların sayı atomun enerjisi ilə düz mütənasibdir. Praktiki olaraq kristallarda yaranan kaskad xətti hala daha yaxındır. Riyazi olaraq ionların nüfuz etmə əmsalı (5.1.1) tənliyi şəklində yazmaq mümkündür.

$$Y = \lambda F_D(E_0) \quad (5.1.1)$$

Y -ionların kristal ilə qarşılıqlı təsir zamanı buraxılan atomların sayı, ionlarla qarşılıqlı təsire məruz qalankristalın səth enerjisi, λ düşən ionların bucaqdan asılılığını və təpmə nəticəsində koordinatlarını dəyişən atomların səth baryeri və səthdən ayrılan atomları əks edir, F_D enerji sıxlığı, (E_0) qarşılıqlı təsirdə iştirak edən ionların enerjisidir. λ üçün Tomas-Fermi ekranlaşma funksiyasından istifadə olunur.

$$\lambda = \frac{0.042}{NU_0} \quad (5.1.2)$$

N -atomların sayı, U_0 -səth enerjisidir ki, istilik sublimasiyası ilə təyin etmək mümkündür. F_D enerji sıxlığı üçün

$$F_D(E_0) = \alpha \frac{dE}{dx} / n \quad (5.1.3)$$

$\frac{dE}{dx}$ enerji itgisinin sürətini, α səpilmə bucağını xarakterizə edən əmsaldır.

İonların səthdəki atomlarla qarşılıqlı təsiri zamanı böyük bucaqlardan səpilmə hadisəsi müşahidə olunur. Bu zaman səpilmə bucağının əmsalı səthə düşən enerjinin artması ilə paralel ədədi qiyməti böyüyür. Həmçinin səpilmə əmsalı böyüməsi kütlələr nisbətinin dəyişməsində böyük qiymətə malikdir. Enerji itgisini xarakterizə edən (5.1.3) ifadəsini kütlələr nisbətinin və protonların sayı daxil olmaqla aşağıdakı şəkildə yazmaq mümkündür.

$$\frac{dE}{dx} / n = NS_n = N \frac{\pi^2}{2} Z_1 Z_2 \varepsilon^2 a \frac{M_1}{M_1 + M_2} \quad (5.1.4)$$

N-atomların sıxlığı, a -ekranlaşma radiusu, ε^2 yük vahidi, Z-müəyyən atom kütləsinə uyğun gələn atomun nömrəsi, M_1 və M_2 ionun və hədəf atomun kütləsinə ekivalentdir. Nüvədə mümkün tormuzlanma Tomas-Fermi çarpaz səpilməsindən istifadə edərək təyin olunur.

$$S_n = 4\pi N Z_1 Z_2 \varepsilon^2 a \frac{M_1}{M_1 + M_2} S(\epsilon) \quad (5.1.5)$$

$S(\epsilon)$ –kiçik enerjilərdə mümkün aşağı tormuzlanmalar.

$$\epsilon = \frac{M_1}{M_1 + M_2} \frac{a}{Z_1 Z_2 \varepsilon^2} E \quad (5.1.6)$$

Təcrübi nəticələrdə nəticələrdə 1 keV Ar ionları ilə implantasiya olunmuş mis lövhələrində $a=0.003$ nm, $\epsilon=0.008$ ekivalentdir. 10 keV oksigen ionları ilə implantasiya olunmuş mis lövhələrində $a=0.0115$, $\epsilon=0.027$. Həmçinin 1 keV və 10 keV enerjili ionlar üçün ϵ qiyməti 0.01-0.3 arasında və yaxud enerji itgisini xarakterizə edən $\frac{dE}{dx}$ daha kiçik qiymətlərə malik olur. Enerji dəyişməsindən asılı olaraq $S(\epsilon) = 0.39$ eV sm² qiymətində argon ionları mis lövhəsindəki enerji itgisinin qiyməti $\frac{dE}{dx} / n =$

$1240 \frac{eV}{nm}$, oksigen ionları üçün isə bu qiymət $\frac{dE}{dx} / n = 320 \frac{eV}{nm}$ –a bərabərdir.

λ üçün alınmış qiymətlərdən istifadə edərək səpilmə əmsalı üçün (5.1.7) ifadəsini almış olarıq.

$$Y = 0.5284 Z_1 Z_2 \varepsilon^2 a \frac{M_1}{U_0(M_1 + M_2)} S(\varepsilon) \quad (5.1.8)$$

Səpilmə əmsalı səhəyə düşən ağır ionunun bucağından, ionun atom nömrəsindən, enerjisindən, səthə düşən və hədəf kristalı təşkil edən atomların kütlə nisbətindən asılıdır. Səpilmə əmsalı ən böyük qiymətini perpendikulyar düşən ionlarla qarşılıqlı təsir zamanı alır ki, enerjinin böyük hissəsinin səthdə paylanması ilə bağlıdır. Digər tərəfdən səpilmə əmsalından səhdəki tərkibdə toplanan elementlərin konsentrasiyasını təyin etmək imkanı yaradır.

Şəkil 5.1.1-də B_2O_3 , B_4C , B_6Si və BN kristallarını ilkin və yüksək enerjili sürətli $^{132}Xe^{26+}$ ionları ilə şüalanmadan sonra 2D və 3D səth morfolojiyası təsvirləri verilmişdir. Şüalanmayan kristalların səthdə əmələ gələn mikrostrukturun maksimal ölçüsü $4.8 \pm 0,5$ mkm bərabərdir. Həmçinin, ilkin strukturun 2D morfolojiyasında görüldüyü kimi, qabarmaların paylanma dinamikası zəifdir. 167 MeV $^{132}Xe^{26+}$ ionları ilə şüalanmadan sonra mikrostrukturda hissəciklərin paylanması qabarmaların sahəsinə, qabarmaların ölçüsünə görə artır. Grosset və Miro tərəfindən nazik təbəqələrdə və çox qatlı nümunələrdə Ar, Kr və Xe ionları ilə $\sim 10^{16}$ ion/cm² intensivliyə qədər 150-580 KeV enerji intervalında şüalandıqda qabarmaların ölçüsü artırır və yüksək ion şüalanma axınları ölçüsünü dəyişmir [100].

Kristalların səthində fərqli yerlərdə qabarmalar ilkin nümunədə müxtəlif ölçülü və şüalanmadan sonra qabarmaların ölçüləri dəyişir. Şüalanma zamanı böyük qabarmaların kiçik və orta qabarmalar tərəfindən “adsorbsiya edilmişdir”. Çox təbəqəli nümunələr üçün bu proses “qabarmaların qarşılıqlı keçid effektləri” adlanır [63-64, 294, 304]. Nəticədə, müxtəlif ölçülü radiasiya qabarmaları daha böyük təsirlənmiş qabarmaların formalaşmasına təsir edir. Kristalların səthdə qabarmaların artması səthdə baş verən istilik prosesləri nəticəsində baş verir [166, 175, 204]. Jonsan yaxınlaşmasına görə silindirik formalaşan qabarmaların ölçüsü Jonsan parametrinə

bərabərdir. Tədqiqatlar göstərir ki, kristalların səhində qabarmalar böyümə sürəti şüalanmış kristallardan 2.2 dəfə böyükdür.

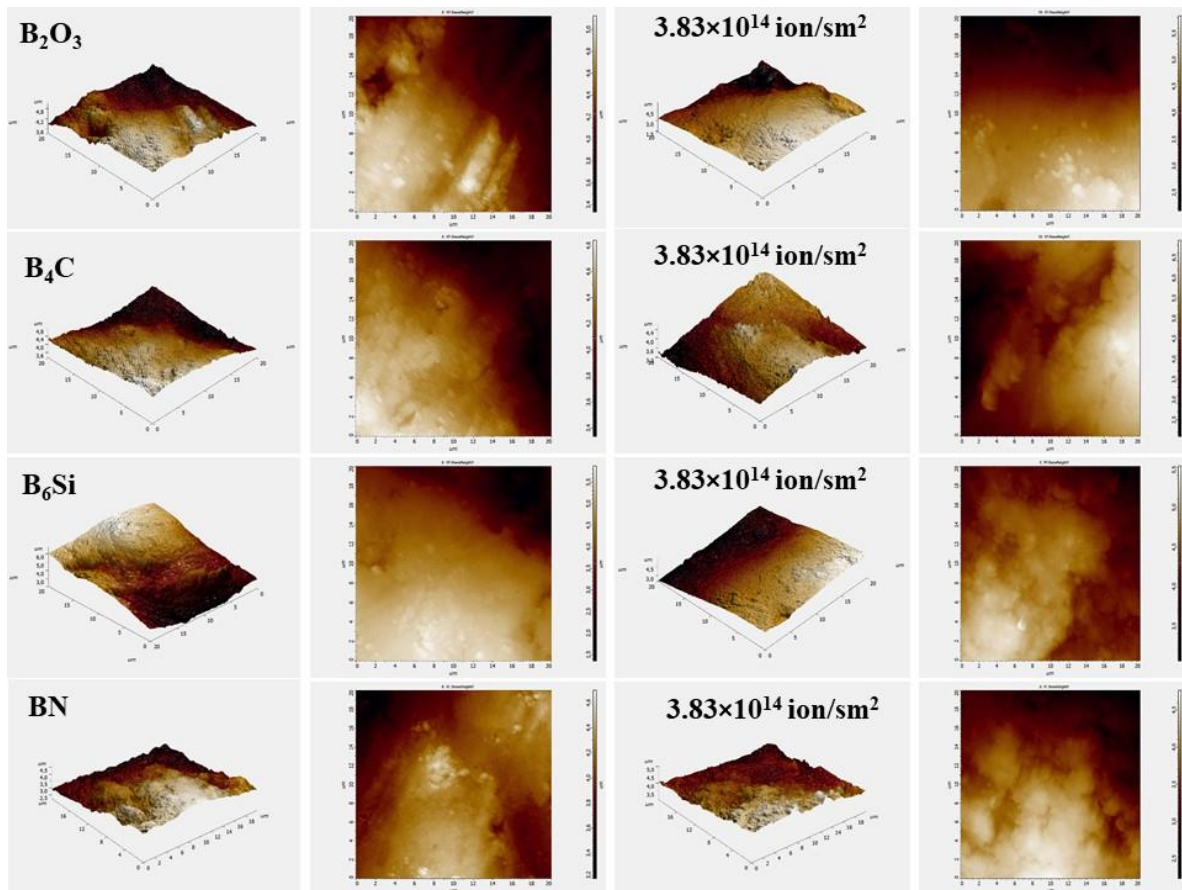


Figure 5.1.1. 3.83×10^{14} ion/sm² selində 167 MeV $^{132}\text{Xe}^{26+}$ sürətli ağır ionlar ilə şüalanmış B_2O_3 , B_4C , B_6Si və BN kristalların səth morfologiyası.

167 MeV $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ionlarla şüalandırılmış kristallarda qabarmaların böyümə sürəti müəyyən olunmuşdur. İon şüalanma zamanı səthdə qabarmaların yaranmasında əsas proses mikro strukturun dislokasiyası və yaxud “çoxqatlı strukturda dislokasiyanın əmələ gəlməsi” ilə bağlıdır. Dislokasiya mikro strukturda iki (impulsu şüalanma və davamlı şüalanma) mexanizimlə formalaşır. Ədəbiyyatda α -Fe üzərində 50 keV Ar ionlarla yerinə yetirilən tədqiqatlar göstərir ki, enerji və intensivlikdən asılı olaraq dislokasiya sıxlığı implus rejimdə 10^9 sm⁻² böyük olduqda formalaşır. Əlavə olaraq dislokasiya təsirləri kristalın səhində plastik deformasiyanın yaranmasını formalaşdırır, nüvə reaksiyalarında parçalanma məhsullu olan $^2\text{He}^3$ ionunun enerjisi 1 MeV ətrafında dəyişdiyi zaman da plastik deformasiya formalaşır. Yüksək entropiyaya

malik kristallarda 100 nm dərinlikdə qaz ionlarının molekulyara hala keçməsi qabarmaların yarmasına ciddi təsir edir. Qabarmaların təsiri altında qəfəs parametirlərin genişlənməsi prosesi baş verir. Nəticədə, xarici faktorların təsiri altında qabarmalar formalaşır, atom qüvvət mikroskopu ilə aparılan təcrübələrdə aydın müşahidə olunur.

5.2 $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında ağır ionların təsirinə məruz qalmış kristallarda istilik seli və istilik tutumunun dəyişməsi

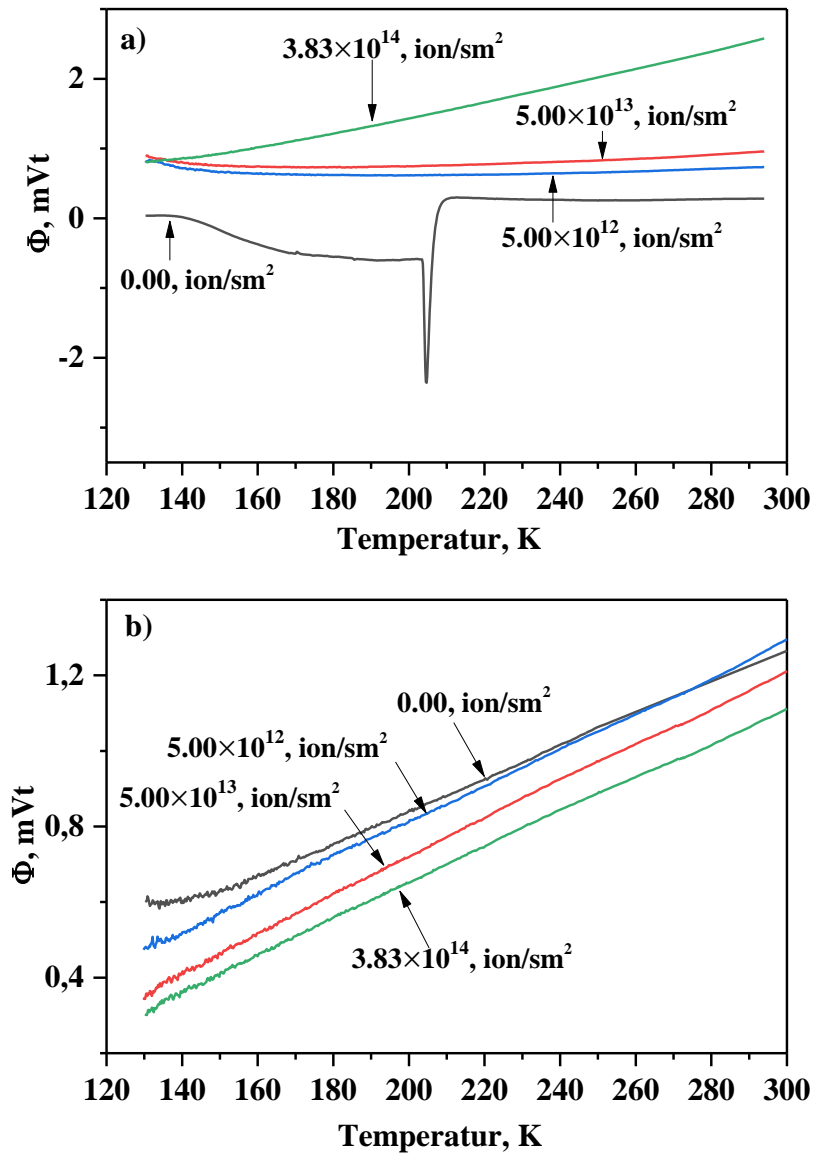
Təqdim olunan başlıqda 167 MeV enerjili sürətli $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ionları ilə otaq temperaturunda bor nitrid, bor silikat, bor karbid və bor oksid kristalları 5.0×10^{12} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² ion selində şüalanmadan sonra istilik sel funksiyası və istilik tutumu tədqiq olunmuşdur. Şüalanmadan öncə nano və mikro ölçülərə malik kristallar “Shimadzu Press” qurğusunda 300 kP/sm² təzyiqlik altında, qalınlığı $\sim 250 \pm 10$ mkm və diametri 80 mkm silindrik formalar şəklində hazırlanmışdır.

Kristalların səth morfolojiyası xüsusi qurğular vasitəsi ilə cilalanmışdır. Şüalandırılmış kristallar “NITROGEN UN 1977 REFRIGERATED LIQUID” soyuducu analizatoru vasitəsi ilə 77 K-ə qədər soyudulmuş, təkrar 300 K qədər geniş temperatur intervalında 5 K/min istilik sürəti ilə arqon mühitində (20 ml/min) istilik selinin və istilik tutumunun dəyişməsi öyrənilmişdir. Ağır ionların hədəf kristalları ilə qarşılıqlı təsiri və səth morfolojiyasında baş verən defektəmələgəlmə mexanizminin temperatur kinetikasi ən effektiv formada öyrənilmək, temperaturun aşağı qiymətlərində termofiziki xassələrin dəyişməsinin əsas tədqiqat istiqaməti kimi qəbul edilmişdir.

5.2.1 B_2O_3 və BN kristallarında ağır ionların təsiri altında istilik seli və istilik tutumunun dəyişməsi

İstilik sel funksiyasının əyriləri şüalanmamış bor nitrid və bor oksid kristalları üçün və müxtəlif ion selində şüalandırılmış spektrləri şəkil 5.2.1.1-də verilmişdir. Spektrlərdə istilik selinin termik kinetikasi analiz edilmiş və istilik funksiyasının

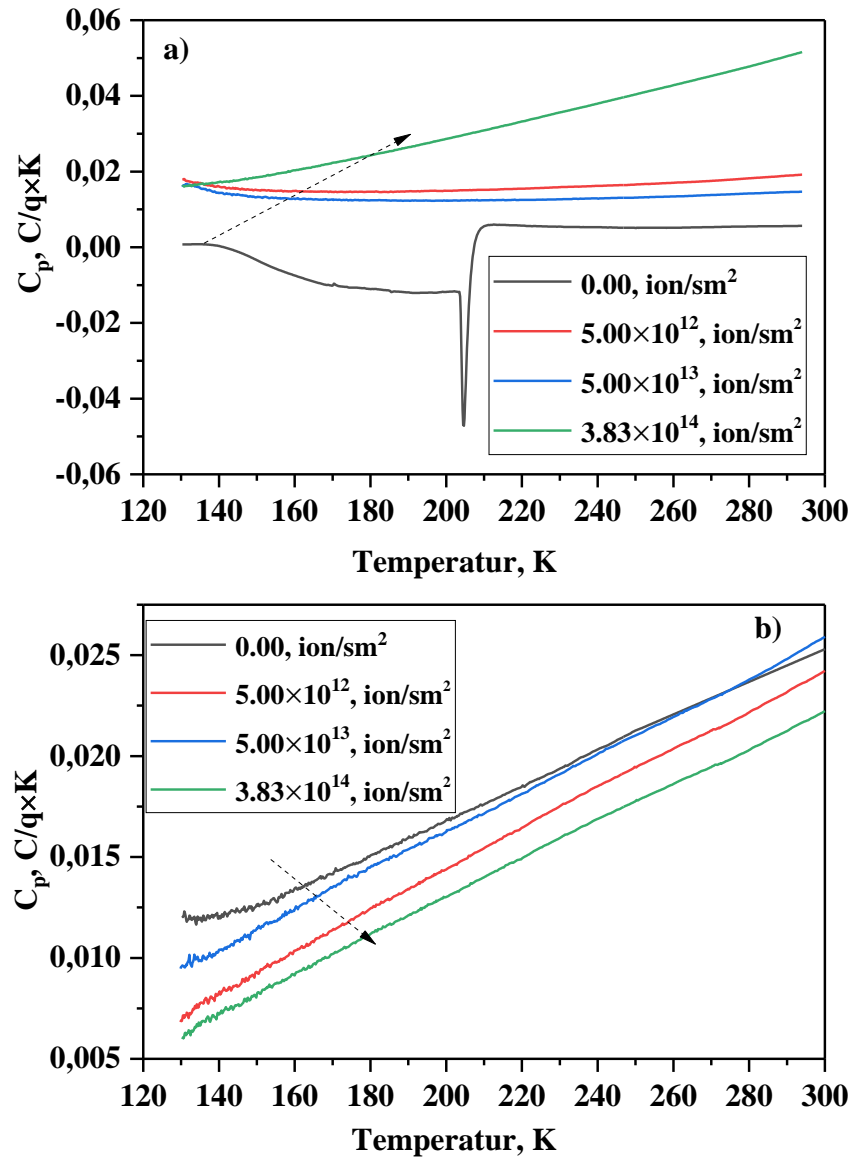
temperaturdan asılı olaraq $120 \leq T \leq 300$ K temperatur aralığında təhlili aparılmışdır. BN və B_2O_3 kristallarında istilik selinin qiyməti -2 mVt ilə maksimum 2 mVt arasında dəyişir. İstilik selinin başlanğıc və son qiymətləri, istilik sürəti (kristalın arqon mühitində qızma sürəti), kütləsi və kalibirləşmə faktorunu nəzərə alsaq istilik kinetikasının mexanizmi haqqında müəyyən fikirlər söyləmək mümkündür. Bor nitrid və bor oksid kristallarının kinetikasi müxtəlif ion selinin malik sürətli ağır ionları ilə şüalandırıldıqdan sonra termik regionlara (hissələrə) ayrılır.



Şəkil 5.2.1.1. $120 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında $5.0 \times 10^{12} \text{ ion/sm}^2$, $5.0 \times 10^{13} \text{ ion/sm}^2$ və $3.83 \times 10^{14} \text{ ion/sm}^2$ intensivliklərdə şüalandırılmış bor nitrid a) və bor oksid b) birləşmələrinin istilik selinin temperatur asılılığı.

Lakin şüalanmamış bor nitrid nümunəsində mərkəzi piki 217 K-ə uyğun gələn

(Şəkil 5.2.1.1) və 135 K-dən 190 K-ə qədər olan temperatur intervalında istilik selinin qiyməti artır həmin temperatur intervalında nümunənin xüsusi istilik tutumu monoton şəkildə artır. Amma mərkəzi piki 217 K olan faza keçidinin xüsusi istilik tutumunun yox, həmin effektin bir sıra termofiziki parametrlərinin (xüsusi istilik tutumu $3.02 \text{ C/q}\times\text{K}$, aktivləşmə enerjisi $0.23 \text{ C}\times\text{mol}$ və entolpiyası 0.0213 C/q) dəyişməsinə göstərmək olar. Şüalanmadan sonra mərkəzi piki 217 K olan effektlərin termofiziki parametrlərinin qarşılıqlı müqayisəsi göstərir ki, ağır ionların təsiri altında baş verən kinetika daha mürəkkəb mexanizimlə dəyişir. Şüalanmamış bor nitrid nümunəsində istiliyin ötürülməsi və selinin dəyişməsi hər iki şüalanmadan sonra tamamilə fərqlənir.



Şəkil 5.2.1.2. $120 \leq T \leq 300 \text{ K}$ temperatur intervalında $5.0 \times 10^{12} \text{ ion/sm}^2$,

5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² intensivliklərdə şüalandırılmış bor nitrid a) və bor oksid b) birləşmələrinin xüsusi istilik tutumunun temperaturdan asılılığı.

Bor nitrid və bor oksid nümunələrində $120 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında istilik selinin ötürülməsi fərqli fazalarda dəyişir. Fərqli fazada dəyişən istilik kinetikasi xüsusi istilik tutumu ilə izah edilir (Şəkil 5.2.1.2). Şüalanmış nümunələr üçün alınmış spektrlərindəki kinetika xətti qanunauyğunluq ilə dəyişir və baş verən bütün termofiziki proseslər mexanizmi istilik tutumu ilə izah olunur. Şəkil 5.2.1.2-də $120 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında 5.0×10^{12} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² intensivliklərdə şüalandırılmış bor nitrid və bor oksid birləşmələrinin xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığı verilmişdir. Şüalanmamış bor nitrid nümunəsində istilik tutumunun qiyməti $T \leq 210$ K temperatur aralığında artdığı müşahidə olunmaqdadır. Mərkəzi piki 217 K uyğun gələn faza keçidində şüalanmamış nümunənin istilik tutumunun qiyməti 0.007-0.013 C/q×K intervalında dəyişir. Həmçinin ağır ionla şüalanmadan əvvəl xüsusi istilik tutumunun qiyməti 0.0053 C/q×K qədər artır və 200 K-dən başlayaraq 300 K-dək olan temperatur intervalında sabit qiymətin alır.

Lakin 5.0×10^{12} ion/sm² və 5.0×10^{13} ion/sm² intensivliklərdə istilik tutumunun qiymətinin dəyişməsi kiçikdir və qeyd olunmuş temperatur intervalında xüsusi istilik tutumunun qiyməti 0.0127 C/q×K və 0.0153 C/q×K intervalında artır. 3.83×10^{14} ion/sm² şüalanma intensivliyində istilik tutumunun qiyməti 0.0165 C/q×K - 0.0515 C/q×K aralığında dəyişir. Aydındır ki, istilik tutumunun qiyməti şüalanmamış, 5.0×10^{12} ion/sm² və 5.0×10^{13} ion/sm² intensivliklərdə şüalanmış nümunələrdə sabitdir.

Ancaq yüksək intensivliklərdə şüalanmış nümunələrdə xüsusi istilik tutumunun qiymətinin artması səth morfologiyasında ionlarla şüalanma zamanı dəyişən morfologiyanın quruluşu ilə bağlıdır. Həmçinin onu da qeyd etmək lazımdır ki, bor nitridin istilik tutumunun qiymətinin artması ağır ionun intensivliyi ilə düz mütənasibdir. Şəkil 5.2.1.2 (b)-də istilik tutumunun bor oksid nümunəsi üçün $120 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında dəyişməsinin kinetikasi müxtəlif tənliklərdə ifadə etmək mümkündür.

$C_p(T) = 0.00037 + 0.00084T$ şüalanmamış bor oksid nümunəsi üçün;

$C_p(T) = 0.00099 + 0.00057T$ 5.0×10^{12} ion/sm² intensivlikli sel ilə şüalandırılmış bor oksid nümunəsi üçün;

$C_p(T) = 0.00094 + 0.00028T$ 5.0×10^{13} ion/sm² intensivlikli sel ilə şüalandırılmış bor oksid nümunəsi üçün;

$C_p(T) = 0.00093 + 0.00017T$ 3.83×10^{14} ion/sm² intensivlikli sel ilə şüalandırılmış bor oksid nümunəsi üçün;

Müəyyən olunmuşdur ki, 5.0×10^{12} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² sel sıxlığına malik ağır ionlarla şüalandırılmış bor oksid birləşməsində xüsusi istilik tutumunun qiymətini $120 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında aşağıdakı kimi qeyd etmək mümkündür.

- Şüalanmamış bor oksid nümunəsi; $0.0125 \leq C_p \leq 0.0262$ C/q×K
- 5.0×10^{12} ion/sm²; $0.0099 \leq C_p \leq 0.025$ C/q×K
- 5.0×10^{13} ion/sm²; $0.007 \leq C_p \leq 0.024$ C/q×K
- 3.83×10^{14} ion/sm²; $0.006 \leq C_p \leq 0.022$ C/q×K

Bor nitrid və bor oksid birləşməsində istilik tutumunun dəyişməsinin kinetikasının, sürətli ağır ionlarla şüalandıqda nümunələrin istilik mexanizminə bənzədiyi müəyyən edilmişdir. Əldə edilən təcrübə nəticələri aşağı temperaturda bor nitrid nümunəsindəki istiliyin ikili mexanizm vasitəsi ilə baş verdiyini göstərir. Aşağı temperaturda, yalnız fonon-fononun qarşılıqlı təsiri ilə ötürülən istilik axını ikili mexanizm ola bilər. İstilik axınının temperatur dalğalanmalarının kinetikasi istilik tutumunun temperaturdan asılılığında da əks olunur. İstilik tutumunun temperaturdan asılılığından aydın olur ki, həm elektronların həm də sürətli ağır ionların təsiri altında 120 K ətrafında olan nümunələrin xüsusi istilik tutumu çox kiçikdir. Bununla birlikdə, sürətli ağır ionlarla şüalanmış bor nitrid nümunələrində xüsusi istilik tutumunun dəyəri daha kiçik bir qiymətə yaxınlaşırdı. Bu, yeni quruluş morfolojiyasının (amorflaşma) səthdə istilik yayılma kinetikasına təsiri kimi düşünülə bilən sürətli ağır ionlarla qarşılıqlı təsir mexanizminin kinetikasi ilə əlaqədar idi. Bor oksid nümunələri üçün radiasiya növündən və şüalanma axınlarından asılı olmayaraq istilik tutumunun mexanizminin bor nitridindən bir qədər fərqləndiyi də müşahidə edilmişdir. Bor oksid nümunəsində istilik ötürmə mexanizmi xətti bir mexanizmdir. Aşağı temperaturda

fonon-fonon qarşılıqlı təsirinin ötürülməsi yalnız bir mexanizmdir. Bor oksid nümunələri hər iki şüalanmanın təsiri altında 300 K, nümunələrin özünəməxsus istilik tutumu bor nitrit nümunəsindən daha azdır. Hər iki nümunə üçün alınan təxminlər kristal quruluşu və sıxlıq faktoru ilə əlaqədardır. Artan sıxlığı olan keramika nümunələrində fonon-fonon daha kiçik temperaturlarda qarşılıqlı təsiri daha çox olur və bu daha çox xətti bir funksiya ilə ifadə olunur. Bu, müxtəlif sıxlığa malik bor nitrit və bor trioksid nümunələrində eksperimental olaraq müşahidə edilmişdir. Hər bir şüalanma üçün xüsusi istilik tutumunun kinetikasi göstərir ki, bor nitridi birləşməsi $120 \leq T \leq 300$ K temperatur aralığında ağır ionlarla şüalananda yüksək enerjili elektronlarla artır. Həm də bor oksidi üçün, yüksək enerjili elektronlara məruz qaldıqda istilik tutumunun dəyəri, nümunələrin sürətli ağır ionlarla şüalanmasından fərqlidir. Bu, eksperimental olaraq bor oksidi nümunələrində xüsusi istilik tutumunun dəyərinin daha sürətlə artdığını göstərir. Bundan əlavə, bütün təcrübələrdə sürətli ağır ionlarla şüalanmadan sonra daha aktiv fazasındakı istilik tutumundakı dəyişiklik tamamilə təsdiqlənir.

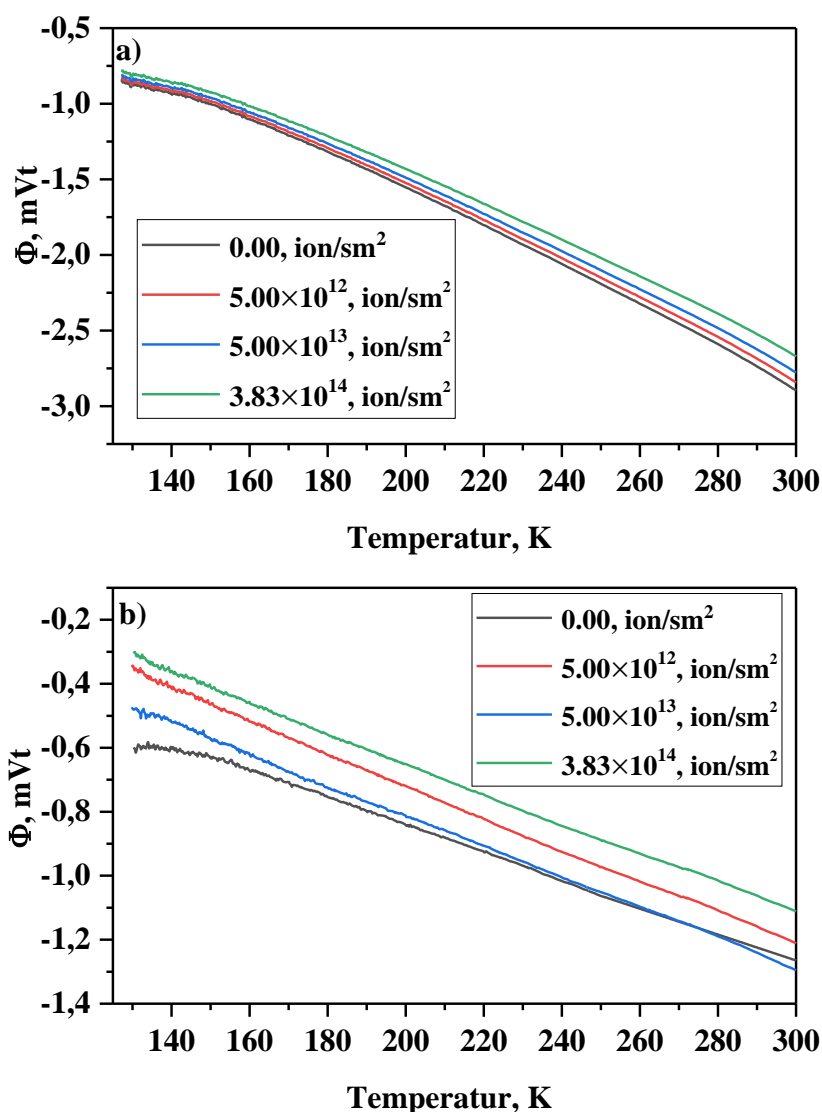
5.2.2 B₆Si və B₄C kristallarında ağır ionların təsiri altında istilik seli və istilik tutumunun dəyişməsi

Məlumdur ki, bor karbid və bor silikat kristalları elektrik xassələrinə görə özünü daha çox yarımkeçirici kimi göstərir. Lakin hər iki kristal sürətli yüksək enerjili ağır ionlarla şüalandırıldıqdan sonra kristal quruluşunda amorflaşma meydana gəlir [100]. Amorflaşma ilə parallel hər iki nümunədə aktiv mərkəzlər, C[°] və Si[°] atomlarının həyəcanlanmış halları, dəşiklər və anion və kation xarakterli mərkəzlər formalaşır. Ədəbiyyat nəticələri göstərir ki, bor əsaslı kristallarda istilik daşınması əsasən dəşiklər ilə baş verir. Həmçinin onu da qeyd etmək lazımdır ki, istilik daşınması bor karbid və bor silikat kristallarında Seebek əmsalından asılıdır. Sürətli yüksək enerjili ağır ionların təsirində Seebek əmsalının öyrənilməsi isə ayrıca bir tədqiqat mövzudur.

Bor silikat kristalında istilik selinin ötürülməsi və paylanması digər yarımkeçirici nümunələrdə olduğu kimi eynidir. İstilik selinin xətti qanunauyğunluğuna görə dəyişən kinetikada faza dəyişikliyi baş vermirsə, bütün termofiziki proseslər müəyyən bir mexanizm

üzərində qurulur və bir-birinə bağlıdır. Bununla birlikdə, istilik selinin dinamikası təcrübi olaraq təyin olunan dəyəri xüsusi istilik tutumu və digər termodinamik funksiyaların dəqiq müəyyən edilməsinə səbəb olur. Dəqiq müəyyən edilmiş istilik axını funksiyası istilik tutumu və termodinamik funksiyaların qiymətləndirilməsinin düzgünlüyünə təsir göstərir.

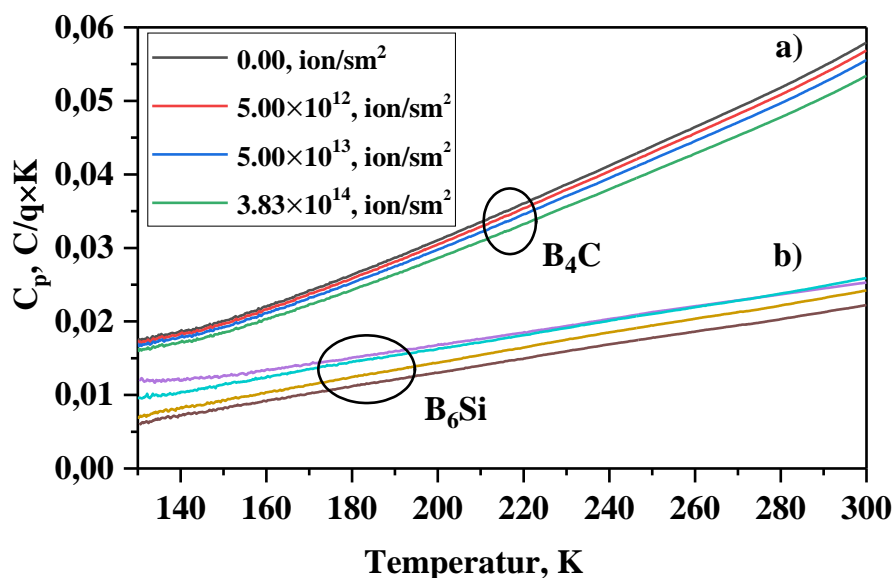
Bütün bunları nəzərə alaraq, istilik axınının qiyməti ilə bağlı dəqiq ifadəni əldə edə bilərik. Bundan sonra, kalibrləşmə faktorunu və istilik tutumunu təyin edərək istilik axını funksiyalarının faktiki dəyərindən aktivasiya enerjisində və termodinamik funksiyalara keçmək mümkündür.



Şəkil 5.2.2.1. $120 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında 5.0×10^{12} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² ion selində şüalandırılmış bor karbid a) və bor silikat b) kristallarının istilik selinin temperaturdan asılılığı.

Şəkil 5.2.2.1-də $120 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında 5.0×10^{12} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² ion selində şüalandırılmış B₄C və B₆Si birləşmələrinin istilik selinin temperatur asılılığı verilmişdir. Bor karbid kristalından fərqli olaraq bor silikat kristalı üçün alınmış DSC əyriələrinin kinetikasını termik xarakterli bölgələrə bölünür. Təcrübi araşdırmalarda bor karbid kristalı ağır ionlarla şüalanmadan sonra $120 \geq T \geq 146$ K temperatur aralığında istilik selinin ötürülmə mexanizmi kiçik, $146 \geq T \geq 300$ K oblastda daha aktiv fazada baş verir.

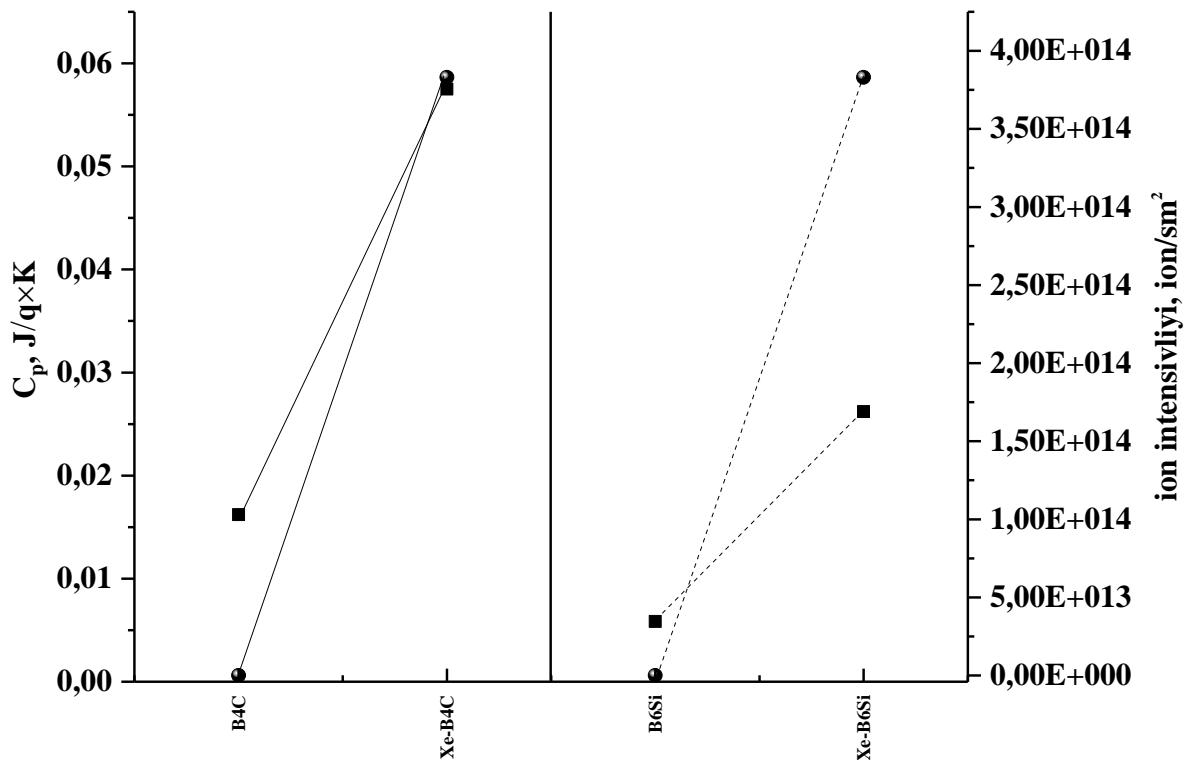
Həmçinin B₆Si kristalı üçün istilik selinin ötürülməsi bor karbidə baş verən mexanizmlə eynilik təşkil etməkdədir. Xətti qanuna uyğunluğuna görə dəyişən kinetikada faza dəyişikliyi müşahidə olunmur, istilik selinin qiyməti B₆Si üçün -1.4 mW, B₄C üçün isə 3.0 mW qədər azdır. Bütün termofiziki proseslər müəyyən intervalda dəyişən istilik tutumu üzərində qurulur və bir -biri ilə qarşılıqlı əlaqəlidir. Şəkil 5.2.2.2 -də bor karbid və bor silikat kristalları üçün $120 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında müxtəlif şüalanmalarda 5.0×10^{12} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığı göstərilmişdir.



Şəkil 5.2.2.2. $120 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında 5.0×10^{12} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² ion selində şüalandırılmış bor karbid a) və bor silikat b) kristallarının xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığı.

İstilik selinin temperaturdan asılılığı kinetika istilik tutumunun temperaturdan asılılığında təzahürünü əks etdirir.

B_4C kristalı müxtəlif intensivlikli ionların təsirinə məruz qaldıqdan sonra 120 K temperaturda istilik tutumunun qiyməti 0.0170-0.0176 C/q×K aralığında dəyişir. Yüksək enerjili ağır ionlarla şüalanmış bor karbid kristalında xüsusi istilik tutumunun orta qiyməti 0.016 C/q×K ətrafında dəyişir. Əsas proses ağır ionlarla qarşılıqlı təsir mexanizminin kinetikasi ilə bağlıdır. Səth morfologiyasının amorfizasiyası istilik yayılmasının kinetikasına təsir edir. Müəyyən edilmişdir ki, B_6Si kristalı şüalanmamış və şüalanmadan asılı olmayaraq, istilik keçiricilik mexanizmi bor karbid kristalından fərqlənir. B_6Si kristalında istiliyin paylanma mexanizmi xəttidir. Kristalların quruluşuna, fəza qrupuna və sıxlıq faktoruna görə termik mexanizmin izah olunması zəruridir. Sıxlığın artması ilə keramika nümunələrində daha kiçik temperaturlarda fonon-fonon qarşılıqlı təsiri böyüyür və xətti funksiya ilə ifadə olunur. Müxtəlif sıxlıqlı bor karbid və bor silikat nümunələri üçün eksperimental alınmış qiymətlərlə müşahidə edilmişdir. Xüsusi istilik tutumunun kinetikasi B_4C və B_6Si nümunələri üçün Şəkil 5.2.2.3-də verilmişdir. Xüsusi istilik tutumunun dəyişməsinin kinetikasi göstərir ki, bor karbid birləşməsi $120 \leq T \leq 300$ K temperatu intervalında sürətli ağır ionlara məruz qaldıqda 3,59 dəfə artırır. Bor silisium tədqiqat nümunəsi üçün, xüsusi istilik tutumunun ağır ionlar tərəfindən 4,42 dəfə artır. Təcrübələr bor silisium nümunələrində xüsusi istilik tutumunun qiymətinin daha sürətlə artdığını göstərir. Bundan əlavə, bütün eksperimental təcrübələrdə ağır ionlar ilə şüalanmadan sonra daha aktiv fazada xüsusi istilik tutumunun dəyişməsi bir-birini tam şəkildə tamamlayır.



Şəkil 5.2.2.3. Müxtəlif intensivlikli ağır ionlarla şüalanmış B₄C və B₆Si nümunələrinin xüsusi istilik tutumunun 120 ≤ T ≤ 300 K temperatur intervalında kinetikası

Məlumdur ki, istilik keçiriciliyi materialların əsas termofiziki xüsusiyyətlərindən biridir və təyin olunması üçün müxtəlif tədqiqat üsullardan geniş istifadə olunur [8]. Kalorimetrik analizindən istifadə olunaraq müəyyən edilmiş dəqiq qiymətləri (nümunənin, standart nümunənin və tədqiq olunan pənlər) nəzərə alaraq istilik keçiriciliyi üçün aşağıdakı ifadəni almış olarıq.

$$K_{\circ} = \frac{2\pi}{\rho A^2 P} \cdot \left[\frac{\left(\frac{\Phi}{\tau}\right)}{\omega T} \right]^2 \cdot \frac{1}{C_p} \quad (5.2.2.1)$$

Burada ki, ρ -nümunənin sıxlığı g/sm³; A- nümunənin sahəsi sm², P- temperatur periodu, Φ - istilik selinin funksiyası mVt, τ -zaman saniyə, ω -2 π -də bucaq tezliyi, T- temperatur K və C_p nümunənin xüsusi istilik tutumu. DSC tərəfindən araşdırılan istilik keçiriciliyində mühüm amillərdən biri enerji itkisidir və inert qazların yaratdığı enerji itkisi nəzərə alınmalıdır. Məlumdur ki, eksperimental tədqiqatlar vakuum mühitində aparılır.

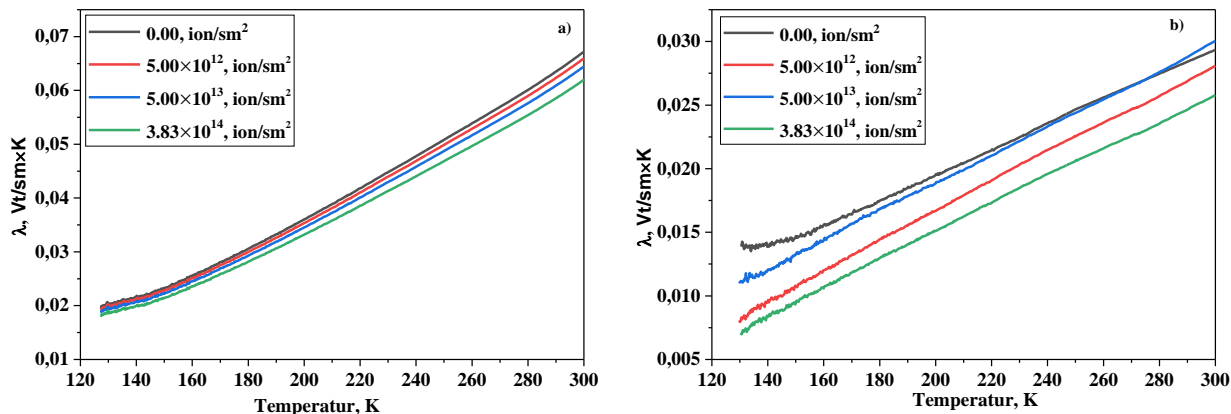
Bütün bunları nəzərə alaraq, istilik keçiriciliyi üçün "kalibrəşmə sabiti" əmsalı istifadə edilməlidir.

$$D = \sqrt{K_0 \cdot K_{tr}} - K_{tr} \quad (5.2.2.2)$$

Burada D kalibrəşmə sabiti, K_0 tədqiq olunan materialın istilik keçiriciliyi və K_{tr} standart materialın istilik keçiriciliyidir. Standart nümunə kimi DSC analizlərində Al_2O_3 materialından istifadə olunmuşdur. Al_2O_3 standart nümunəsinin kütləsi 0.04905 g və "sıfır xəttin" istilik axını funksiyası üçün istilik keçiriciliyinin kalibrəşmə sabiti 0.32 $Vt/m \times K$ bərabərdir. Müxtəlif temperaturlarda Al_2O_3 birləşməsi üçün termodinamik xüsusiyyətləri və davranışları haqqında məlumat termokimyəvi cədvəllərində tapmaq mümkündür. Materialların kütlə və istilik parametrlərini nəzərə aldıqda, müxtəlif intensivlikli ağır ionlarla şüalanmanın təsiri altında B_4C və B_6Si nümunələrinin istilik keçiriciliyi üçün növbəti tənliyi almış oluruq.

$$K = \frac{K_0 - 2D + \sqrt{K_0^2 - 4DK_0}}{2} \quad (5.2.2.3)$$

Burada K nümunənin istilik keçiriciliyidir. Şəkil 5.2.2.4-dən görüldüyü kimi B_4C və B_6Si nümunələrinin istilik keçiriciliyi eyni şüalanma şəraitindədir fərqli qiymətlərə malikdir. Bor əsaslı nümunələrdə istilik keçiriciliyin ötürülmə mexanizmi iki əsas amillə bağlıdır. Birinci amil bor karbid və bor silisid nümunələrinin atomları arasında istilik ötürülməsidir. İkincisi, istilik axını ilə atom arasındakı fonon mexanizmi ilə daşınmasıdır. Bundan əlavə, "kiçik poloran atlama" olaraq adlandırılan bor karbidində atomlarla istiliyin daşınması bor silisidindən fərqli bir mexanizmə malikdir. B_4C və B_6Si elektrik xüsusiyyətləri yarımkeçirici, kristal quruluşda yüksək enerjili elektron intensivlikli və yüksək enerjili ionlarla şüalandıqda amorfizm baş verir [32-33]. Amorfizasiyaya paralel olaraq atomlarının həyəcanlı hallar və vakant mərkəzlər formalaşdırır.



Şəkil 5.2.2.4. $120 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında bor karbid a) və bor silikat b)

nümunələrinin müxtəlif intensivlikli ağır ionlar ilə şüalanmadan sonra istilik keçiriciliyi

Şüalanmamış bor karbid nümunəsi üçün istilik keçiriciliyinin qiymətləri 120K-300K temperatur intervalında 0.0206 Vt/sm×K-dən 0.0674 Vt/sm×K-a qədər artır. 120-300 K temperatur intervalında müəyyən olunmuşdur ki, Xe ağır ionları ilə şüalanma zamanı bor karbid nümunələri üçün 5.0×10^{12} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² intensivlikdə istilik keçiriciliyi 0.0193-0.0659 Vt/sm×K, 0.0188-0.0645 Vt/sm×K və 0.0181-0.0619 Vt/sm×K aralığında artır. Bununla belə, ağır ion şüalanması altında bor silisid nümunəsi üçün istilik keçiriciliyinin qiymətləri şüalanmamış nümunə üçün 120 K-dən 300 K-ə qədər olan temperatur intervalında 0.014-dən 0.026 Vt/sm×K -ə qədər artır. 5.0×10^{12} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² intensivlikdə şüalanmış bor silisid nümunələri üçün 120-300 K temperatur intervalında istilik keçiriciliyi 0.0112-0.026 Vt/sm×K, 0.005-0.024 Vt/sm×K və 0.006-0.022 Vt/sm×K qiymətlərinə malik olmuşdur. Şəkil 5.2.2.4-də alınan nəticələrə əsasən, bor karbid və bor silisid nümunələrində şüalanma nəticəsində əmələ gələn dəşiklər C-C və Si-Si atomları arasında rəqs edir. Məsələlərin paylanma mexanizminə görə onlar C-C və Si-Si zəncirləri, həmçinin bor karbon qovşağındakı ikosahedral zəncir boyunca hərəkət edirlər. Bir fazalı bor əsaslı birləşmələrdə dəşiklərin hərəkəti yalnız iki karbon atomu və interikoshadera zənciri arasında dəyişir. Yüksək temperaturda keçid mexanizmi bor karbid birləşməsi üçün istilik keçiriciliyinin 0.1-dən 0.01 Vt/sm×K qədər azaldığı daha aydındır. Ancaq təcrübələrimizdə kiçik temperaturlarda keçiricilik mexanizmi tamamilə fərqlidir. Quruluş strukturuna görə, aşağı temperaturda istilik keçiriciliyi qəfəs parametrlərinin dinamikasından asılıdır. Şüalanmadan

sonra bor karbid və bor silisid nümunələrində istilik keçiriciliyi artır. Bu zaman şüalanmadan sonra istilik daşımada karbon və silisium atomları ətrafında əmələ gələn radikallar iştirak edir. Şüalanmadan sonra B_4C və B_6Si nümunələrində istilik keçiriciliyi artır, istilik daşıyıcısı şüalanmadan sonra karbon və silisium atomları ətrafında yaranan radikallar da iştirak edir. Lakin kiçik temperaturlarda rekombinasiya sürəti daha zəif olduğu üçün bu aydın nəzər çarpmır. Əlbəttə ki, istilik keçiriciliyi pozulmuş quruluş strukturu ilə ötürülür. Həmdə kiçik temperaturlarda rekombinasiya sürətinin önəmli faktor olduğu nəzərə alınmalıdır. Həmçinin nəzərə alınmalıdır ki, kiçik temperaturda rekombinasiya dərəcələri mühüm amildir və amorf strukturda termik daşımada kiçik sürəti, strukturda təkrarlanan zəncirvari davranışdan asılıdır. Bor karbid və bor silisidin termofiziki xüsusiyyətləri haqqında (termodiffuziyası və istilik keçiriciliyi) bəzi tədqiqat işlərində geniş şərh olunmuşdur [6,11]. Aşağı temperaturda $T \leq 300K$ və xarici amillərdə (γ , ağır ion, elektron və neytron şüalanması) baş verən termofiziki kinetika ədəbiyyatda təfərrüatlarla araşdırılmır. Buna baxmayaraq, $T \geq 179 K$ kiçik temperaturda ağır ionlarla 5.0×10^{12} ion/sm², 5.0×10^{13} ion/sm² və 3.83×10^{14} ion/sm² intensivlikdə şüalandırılmış bor karbid üçün termodiffuziya qiyməti müvafiq olaraq 0.475 sm²/san, 0.462 sm²/san və 0.397 sm²/san qədər azalır. Bor silisid nümunələrinin müxtəlif ağır ionlarla fərqli intensivliklərdə termodiffuziya qiyməti 0.35-0.47 sm²/san, 0.36-0.46 sm²/san və 0.38-0.49 sm²/san olmuşdur.

Təcrübələr göstərdi ki, aşağı temperaturda $T \leq 300K$ istilik keçiriciliyi və termodiffuziya atomların qəfəs parametrlərinin dinamikasından asılıdır. Nəticə olaraq, kalorimetrik üsullarından istifadə etməklə aşağı temperaturda və bor karbidinin və bor silisidin müxtəlif şüalanma altında aşağı temperaturda və termofiziki xassələrində sürətli ağır ionlara binar sistemlərin termodinamik qiymətləndirilməsi tədqiq edilmişdir. Nəticələr göstərir ki, ağır ion şüalanmış nümunələrin istilik axını sürət mexanizminin daşınması fluence dozalarından asılı olaraq baş verir.

5.3 Termodinamik funksiyaların ağır ionların təsiri nəticəsində dəyişmə kinetikasi

Hesablanan termik parametrlərin üstünlükləri, istilik selinin ölçülmüş spektrindən xüsusi istilik tutumunun hesablanması və termodinamik funksiyaların dəqiq qiymətlərinin hesablanmasına imkan yaradır. Sabit təzyiqdə istilik tutumunu verilmiş qiymətlərinə əsasən entalpiyanın qiymətini 5.3.1 tənliyi vasitəsi ilə hesablamaq mümkündür.

$$H(T) - H(T_0) = \int_{T_0}^T C_p(T) dT \quad (5.3.1)$$

5.3.1 funksiyası faza keçidlərin, kimyəvi reaksiyalarla əlaqəli entalpiya dəyişikliklərini və temperaturdan asılı olaraq termodinamik keçidləri müəyyən etməyə imkan yaradır. Eynilə entropiya və Gibbs sərbəst enerjisinin müəyyən edilməsi üçün növbəti tənliklərdən istifadə edilmişdir.

$$S(T) - S(T_0) = \int_{T_0}^T \frac{C_p(T)}{T} dT \quad (5.3.2)$$

$$G(T) - G(T_0) = H(T) - H(T_0) - T[S(T) - S(T_0)] \quad (5.3.3)$$

Hər iki regionda (kiçik və yüksək temperatur intervalı) əmələ gələn sahələrin hesablanması üçün istilik tutumunun temperaturdan asılılığının termodinamik funksiyalarından istifadə edilmişdir. Termodinamik funksiyalar müxtəlif şüalanma intensivliklərində nümunələri üçün müəyyən edilmiş istilik tutumunun məlum funksiyasından istifadə etməklə hesablanmışdır. 300 K-dan 1200 K-ə qədər və müxtəlif şüalanma axınları üçün sabit təzyiqdə şüalanma intensivlikləri üçün termodinamik funksiyaların temperaturdan asılılığı 5.3.1-5.3.16 cədvəllərində göstərilmişdir.

Cədvəl 5.3.1. $300 \leq T \leq 700$ K temperatur intervalında B_2O_3 birləşməsinin istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	63.87	0.13	52.37	55.71
400	76.49	8.16	56.89	60.09
500	90.81	16.87	63.54	66.14
600	97.28	25.54	69.58	74.77
700	108.88	36.47	77.21	78.59

Cədvəl 5.3.2. 167 MeV enerjili ^{132}Xe ionları ilə 5.0×10^{12} ion/sm² intensivlikdə otaq temperaturunda şüalandırılmış B_2O_3 birləşməsinin $300 \leq T \leq 700$ K temperatur intervalında istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	61.39	0.09	50.42	52.79
400	72.33	7.01	54.36	59.84
500	87.37	13.24	62.23	64.32
600	96.91	23.31	64.74	71.29
700	104.71	34.57	76.77	76.22

Cədvəl 5.3.3. 167 MeV enerjili ^{132}Xe ionları ilə 5.0×10^{13} ion/sm² intensivlikdə otaq temperaturunda şüalandırılmış B₂O₃ birləşməsinin $300 \leq T \leq 700$ K temperatur intervalında istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	59.73	0.08	49.26	50.74
400	70.59	6.92	53.39	56.29
500	86.35	12.16	61.79	62.37
600	94.02	22.29	62.55	70.01
700	102.38	33.57	75.09	74.88

Cədvəl 5.3.4. 167 MeV enerjili ^{132}Xe ionları ilə 3.83×10^{14} ion/sm² intensivlikdə otaq temperaturunda şüalandırılmış B₂O₃ birləşməsinin $300 \leq T \leq 700$ K temperatur intervalında istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	57.89	0.06	47.06	49.19
400	69.28	6.01	52.74	55.59
500	85.68	11.08	60.05	61.29
600	93.44	21.11	61.03	68.16
700	101.52	31.14	74.34	74.07

Cədvəl 5.3.5. $300 \leq T \leq 1200$ K temperatur intervalında B_4C birləşməsinin istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	55.29	0.08	26.37	26.18
400	75.83	6.52	45.27	28.37
500	92.08	14.45	63.91	33.47
600	96.28	23.55	81.46	40.85
700	102.03	32.81	96.21	49.67
800	106.29	44.07	109.42	56.80
900	111.99	55.58	119.73	63.76
1000	115.82	67.29	134.09	70.92
1100	117.32	77.37	145.07	74.86
1200	123.01	88.34	156.82	81.93

Cədvəl 5.3.6. 167 MeV enerjili ^{132}Xe ionları ilə 5.0×10^{12} ion/sm² intensivlikdə otaq temperaturunda şüalandırılmış B₄C birləşməsinin $300 \leq T \leq 1200$ K temperatur intervalında istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	54.36	0.07	25.44	24.71
400	74.14	6.28	43.57	26.93
500	92.94	13.65	61.10	32.73
600	95.68	22.84	80.05	38.00
700	100.06	31.71	94.08	47.21
800	105.87	43.15	106.19	55.14
900	110.74	54.87	117.37	62.15
1000	114.22	66.16	133.94	69.88
1100	118.86	76.74	143.38	74.37
1200	125.59	86.47	154.09	80.64

Cədvəl 5.3.7. 167 MeV enerjili ^{132}Xe ionları ilə 5.0×10^{13} ion/sm² intensivlikdə otaq temperaturunda şüalandırılmış B₄C birləşməsinin $300 \leq T \leq 1200$ K temperatur intervalında istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	53.27	0.06	25.02	23.68
400	72.38	6.18	43.57	25.05
500	91.78	12.96	60.07	30.02
600	94.11	21.76	78.22	37.41
700	98.91	30.23	93.17	45.76
800	102.64	42.82	104.63	54.19
900	108.48	53.91	115.42	60.07
1000	112.18	64.05	131.07	67.52
1100	115.31	75.88	140.18	73.05
1200	121.51	85.07	151.34	78.09

Cədvəl 5.3.8. 167 MeV enerjili ^{132}Xe ionları ilə 3.83×10^{14} ion/sm² intensivlikdə otaq temperaturunda şüalandırılmış B₄C birləşməsinin $300 \leq T \leq 1200$ K temperatur intervalında istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	51.66	0.05	22.37	21.67
400	71.09	5.95	41.10	23.65
500	90.17	11.49	58.00	28.07
600	92.08	20.32	76.38	36.78
700	98.64	28.64	91.02	42.79
800	99.48	41.17	102.81	53.38
900	105.94	51.84	112.28	58.04
1000	108.71	62.05	128.73	65.07
1100	111.09	72.73	138.55	71.63
1200	118.43	82.94	148.43	76.71

Cədvəl 5.3.9. $300 \leq T \leq 1200$ K temperatur intervalında BN birləşməsinin istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	20.21	0.05	15.17	14.97
400	26.29	2.53	22.39	16.65
500	32.81	6.42	28.79	18.08
600	36.92	9.86	34.01	20.41
700	39.14	13.55	40.07	23.85
800	40.51	17.81	45.49	25.18
900	43.44	21.32	49.38	28.27
1000	45.93	25.91	54.14	30.71
1100	46.85	30.95	59.17	33.01
1200	47.76	33.38	63.78	35.25

Cədvəl 5.3.10. 167 MeV enerjili ^{132}Xe ionları ilə 5.0×10^{12} ion/sm² intensivlikdə otaq temperaturunda şüalandırılmış BN birləşməsinin $300 \leq T \leq 1200$ K temperatur intervalında istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	19.44	0.042	14.09	14.54
400	26.20	2.21	21.88	15.48
500	32.63	5.63	27.31	17.67
600	35.33	8.37	33.24	18.25
700	37.45	13.82	38.07	23.64
800	39.74	16.63	45.34	26.29
900	42.05	20.04	49.11	27.07
1000	44.64	24.80	53.94	29.34
1100	45.19	30.74	58.11	32.07
1200	47.28	32.67	62.67	34.27

Cədvəl 5.3.11. 167 MeV enerjili ^{132}Xe ionları ilə 5.0×10^{13} ion/sm² intensivlikdə otaq temperaturunda şüalandırılmış BN birləşməsinin $300 \leq T \leq 1200$ K temperatur intervalında istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	18.75	0.03	14.15	13.47
400	25.29	2.18	21.35	13.14
500	31.68	5.42	26.34	16.62
600	34.68	7.73	33.46	18.23
700	36.55	12.71	37.08	23.67
800	38.89	15.83	47.31	26.65
900	41.75	19.94	48.68	27.41
1000	43.67	23.73	52.41	30.74
1100	44.34	29.34	57.69	31.37
1200	46.82	30.68	61.07	33.086

Cədvəl 5.3.12. 167 MeV enerjili ^{132}Xe ionları ilə 3.83×10^{14} ion/sm² intensivlikdə otaq temperaturunda şüalandırılmış BN birləşməsinin $300 \leq T \leq 1200$ K temperatur intervalında istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	16.63	0.025	13.67	12.96
400	24.30	2.07	20.79	12.01
500	30.07	5.16	25.44	15.97
600	33.26	7.03	32.35	17.06
700	34.15	11.37	36.26	21.00
800	37.17	14.91	44.09	26.96
900	40.41	18.28	47.74	26.61
1000	42.31	22.74	51.88	28.94
1100	42.89	28.19	56.07	30.04
1200	45.47	29.66	60.68	31.73

Cədvəl 5.3.13. $300 \leq T \leq 1200$ K temperatur intervalında B_6Si birləşməsinin istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	47.89	0.076	37.42	34.14
400	56.06	5.62	50.19	36.79
500	63.63	12.54	65.81	46.68
600	66.17	16.82	77.71	47.98
700	68.05	24.21	88.67	50.01
800	69.58	32.52	95.12	55.74
900	71.02	41.54	102.21	61.32
1000	72.64	45.39	114.39	67.72
1100	73.83	53.71	119.27	71.29
1200	74.68	61.11	126.72	76.86

Cədvəl 5.3.14. 167 MeV enerjili ^{132}Xe ionları ilə 5.0×10^{12} ion/sm² intensivlikdə otaq temperaturunda şüalandırılmış B₆Si birləşməsinin $300 \leq T \leq 1200$ K temperatur intervalında istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	45.85	0.06	35.85	32.47
400	54.77	4.47	49.42	35.49
500	62.14	12.64	63.05	44.22
600	64.74	14.74	75.25	46.05
700	66.48	22.32	87.06	50.51
800	67.69	30.16	94.32	55.43
900	70.01	39.74	101.14	60.22
1000	70.56	43.63	112.93	65.41
1100	72.64	51.55	114.71	69.92
1200	73.84	59.04	125.46	74.42

Cədvəl 5.315. 167 MeV enerjili ^{132}Xe ionları ilə 5.0×10^{13} ion/sm² intensivlikdə otaq temperaturunda şüalandırılmış B₆Si birləşməsinin $300 \leq T \leq 1200$ K temperatur intervalında istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	46.25	0.06	36.65	33.75
400	55.17	4.95	50.56	36.19
500	62.33	12.98	64.76	45.97
600	65.09	15.66	76.59	46.05
700	67.27	23.25	88.14	50.74
800	68.74	31.78	95.13	56.78
900	70.02	40.07	101.07	60.11
1000	71.60	44.96	113.97	66.05
1100	72.29	52.47	119.26	70.07
1200	73.28	60.97	126.54	75.05

Cədvəl 5.3.16. 167 MeV enerjili ^{132}Xe ionları ilə 3.83×10^{14} ion/sm² intensivlikdə otaq temperaturunda şüalandırılmış B₆Si birləşməsinin $300 \leq T \leq 1200$ K temperatur intervalında istilik tutumu və termodinamik funksiyaları

Temperatur, K	Istilik tutumu, J/K×mol	Entalpiya, J/K×mol	Entropiya, J/K×mol	Gibbs enerjisi, J/K×mol
300	44.75	0.05	34.85	31.86
400	53.85	4.52	48.42	34.38
500	61.15	11.65	62.11	43.21
600	63.52	14.44	74.66	45.86
700	65.41	21.15	86.06	49.51
800	66.42	29.64	93.32	54.43
900	69.46	38.74	102.13	59.04
1000	70.89	42.64	111.93	64.22
1100	71.47	50.55	114.73	67.08
1200	72.56	58.04	126.46	73.55

Sabit təzyiqdə şüalanma intensivliyinin artması ilə bütün termodinamik funksiyalar artır. Aydın görünür ki, termodinamik funksiyaların kinetikasının əsas mexanizmi nümunələr üzərində faza keçididir. Lakin 300 K-dən 1200 K-a qədər bor nitridi, bor karbid və bor silikat faza keçidinə məruz qalmır. Kimyəvi çevrilmə zamanı keramika materialları üçün termodinamik funksiyalar temperaturdan asılı olaraq daha yüksək qiymətlərə malikdir. Yüksək enerjili sürətli ağır ion şüalanmasının və temperaturun təsiri altında hər bir termodinamik funksiya üçün müxtəlif xətti hissələrə bölünmüşdür. Cədvəl 5.3.1-5.3.16-da sürətli ağır ionların təsiri altında bor nitridi və bor oksid nümunələrinin entalpiyasının dəyişməindən aydın olur ki, birləşmələrdə 300 K ilə 1300 K arasında olan temperaturda faza keçidləri yoxdur və hər bir kütlə üçün enerji dəyişməsi baş verməmişdir. Bununla belə, şüalanmanın intensivliyindən asılı olaraq, entalpiyanın qiymətində 1,86 J/mol-a qədər

azalma müşahidə edilmişdir. Entropiyanın azalması, əlbəttə ki, radiasiyanın təsiri altında heç bir fiziki keçidlə və ya amorf strukturda enerji ilə bağlı qüsurların rekombinasiyası ilə nəticələnmə bilməz. Lakin, entropiya heç bir fiziki kəmiyyəti təyin etməsə də, nümunədəki istilik hərəkətliliyini xarakterizə edir. Göründüyü kimi, ağır ionun şüalanma intensivliyinin artması ilə şüalanmadan sonra entropiya $1,123 \text{ J/mol} \times \text{K}$ qədər azalır. Entropiya və entalpiya qiymətləri müxtəlif şüalanma axınlarında Gibbs enerjisinin təyin edilməsinə şərait yaradır və yüksək temperaturlarda rekombinasiya prosesinin aşağı enerjinin təsiri altında baş verdiyini bir daha təsdiqləyir. Eksperimental tədqiqatlar göstərir ki, heç bir tədqiqat nümunəsində şüalanma və aşağı temperaturun təsiri altında faza keçidinə məruz qalmır. Əldə edilmiş eksperimental qiymətləndirmələr yüksək sürətli ağır ion şüalanması altında baş verən mexanizmi tam izah etməyə imkan verir. Nəticədə, aşağı temperaturda sürətli ağır ionlara şüalanmasına malik binar sistemlərin termodinamik davranışı və aşağı temperaturda müxtəlif şüalanma altında termofiziki xassələri tədqiq edilmişdir. Alınmış nəticələr göstərir ki, yüksək enerjili sürətli ağır ion şüalanmış nümunələrin istilik axınına, istiliyin ötürülmə mexanizminin daşınmasına intensivlikdən asılı olmayaraq baş verir.

Sürətli ağır ion şüalanmasından əvvəl və sonra istilik axını sürəti, xüsusi istilik tutumu, entropiyası, entalpiyası və Gibbs enerjisi ətraflı şəkildə öyrənilmişdir. Nəticədə, aşağı temperaturda sürətli ağır ionlarla şüalanmış borlu birləşmələrin termodinamik davranışına ciddi təsir etməməsi aşkar olunmuşdur.

VI FƏSİL

QAMMA ŞÜALARI İLƏ ŞÜALANDIRILMIŞ KRİSTALLARDA

RƏNG MƏRKƏZLƏRİ VƏ TERMOFİZİKİ XASSƏLƏRİN ÖYRƏNİLMƏSİ

Təqdim olunan altıncı fəsildə B_2O_3 , B_4C , B_6Si və BN kristalları 1.25 MeV enerji xəttinə malik doza gücü $D=0.27$ Qr/san olan ^{60}Co izotopu ilə 9.7 kQr, 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr udulma dozalarında şüalandırılmış və differensial scannedici kalorimetrik metod ilə termofiziki xassələri öyrənilmişdir. Təcrübi tədqiqatlar “Perkin Elmer, Simultaneous Thermal Analyzer, STA 6000”, 300-1200 K temperatur intervalında yerinə yetirilmişdir. Qamma şüalanmanın kiçik və yüksək udulma dozalarından asılı olaraq termodinamik funksiyalar, kristallik quruluşda energetik səviyyələrin artmasının rəng mərkəzləri ilə izahı, amorflaşma fazasına keçid, kristalda yaranmış aktiv mərkəzlər, kristal üzərində yaranan oksid təbəqələrinin qalınlığı və formalaşmış defektlərin kinetik əsaslandırılması verilmişdir. Qamma udulma dozəsindən asılı olaraq Janderson əyriləri B_4C və B_6Si kristal quruluşlarında temperaturdan asılı olaraq dəyişməsi təhlil edilmişdir.

6.1 Bor əsaslı kristalların qamma kvantlara qarşı dayanıqlılıq xüsusiyyəti haqqında

Radiasiya materialşünaslığının təməl fiziki üsullarına əsaslanaraq bor əsaslı keramik, mikro və nano kristalları müxtəlif ionlaşdırıcı şüaların (neytron, yüksək sürətli ağır ion, nüvə reaktorlarında kiçik enerjili parçalanma məhsulları, qamma şüalanma və yüksək intensivlikli elektron seli) təsirləri, nümunələrin kompleks fiziki və kimyəvi xassələrinin dəyişmə mexanizmi, enerji və intensivlikdən asılı olaraq kristal strukturda yaranan radiyasiya defektlərinin təbiəti və yaranma mexanizminin öyrənilməsi istiqamətdə fərqli yanaşmalarla ətraflı tədqiqatlar aparılmışdır [1, 7, 31, 38, 62, 147, 192, 196, 199].

Qamma şüalanma kristallik quruluşundan və faza növündən asılı olmayaraq qarşılıqlı təsirdə olduğu birləşmələrdə xarici mühit faktorlarının [30], təzyiq, temperatur və vakuum iştirakı ilə defektlərin yaranma mexanizmi, defektlərin energetik səviyyələr üzrə fərqli miqراسiyası və strukturda mövcud ana defektlərin sonradan yaranan defektlərlə qarşılıqlı

təsirinin riyazi modelləşmə səviyyəsində nəzəri əsaslarla öyrənilməsi müasir radiasiya materialşünaslığın təməl prinsiplərini təşkil edir.

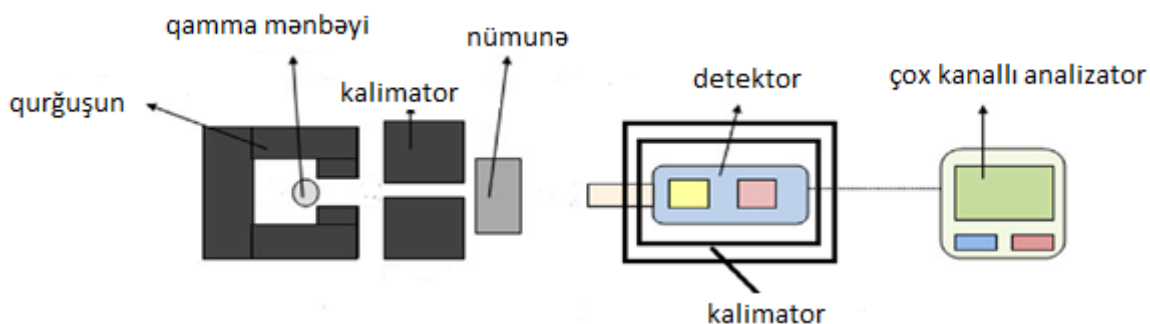
Tədqiqat işində borlu kristallar müxtəlif oksid və keramik birləşmələrlə əmələ gətirdiyi kompozit materialların qamma mənbələrlə (Co və Cs) şüalanmadan sonra struktur xassələri, atomlar arasındakı məsafənin dinamikası, oksidləşmə və amorflaşma mexanizmi, termofiziki xassələri və elektrofiziki xassələri geniş tədqiq edilməmişdir. Aparılan araşdırmalar və ədəbiyyat nəticələrinə əsaslanaraq üç struktur quruluş fazasında (bor üç oksid B_2O_3 , bor monooksid B_2O və bor suboksid B_6O) formalaşan bor oksid kristalı haqqında elmi ədəbiyyatlarda məlumatlar mövcuddur. Lakin qamma şüalanmanın B_2O_3 kristalının hər hansı bir fazada olan növünə təsirinə aid tədqiqatlara elmi ədəbiyyatlarda rast gəlinmir.

Yalnız bor iki oksidin müxtəlif nano və mikro kristallarının əmələ gətirdiyi sistemlərdə müxtəlif temperatur və təzyiqdə səth morfologiyasında adsorbsiya olunmuş su molekullarının qamma şüaların təsiri altında yaranma və parçalanma mexanizmi haqqında tədqiqatlar yerinə yetirilmişdir. $E = 1.17 \text{ MeV}$ və $E = 1.33 \text{ MeV}$ enerji xəttinə malik Co^{60} qamma radioaktiv mənbə vasitəsi ilə $D = 0.36 \text{ Qr/san}$ doza sürəti ilə şüalanmanın təsiri altında B_2O_3 səthində adsorbsiya olunmuş su molekullarının müxtəlif udulma dozalarında $300 \leq T \leq 1250 \text{ K}$ temperatur intervalında parçalanması, molekulyar hidrogenin yaranma mexanizmi haqqında geniş məlumat mövcuddur.

Neytron şüalarının qeyd edilməsində effektivliyin artırılması üçün B_4C əsasında detektorların hazırlanması istiqamətində təcrübələrin yerinə yetirilməsinə baxmayaraq, qamma kvantlarla müxtəlif udulma dozalarında B_4C kristalının termofiziki xassələrinə təsiri tədqiq olunmamışdır. Neytron selindən fərqli olaraq qamma kvantların B_4C kristalına təsiri, temperaturdan asılı olaraq termofiziki xassələr və termodinamik funksiyalarının tədqiqi istiqamətində işlər yerinə yetirilməmişdir. B_4C kristalının SiC, ZrC və TiC əmələ gətirdiyi kompleks nümunələrin qamma şüalanmanın təsiri altında səth morfologiyasının dinamikası, elektirik və termo fiziki xassələri araşdırılmışdır.

B_4C mikro kristalının volfram və digər nümunələrlə əmələ gətirdiyi kompozit birləşmələrin qamma dayanıqlığı "Gamma Transmisyon Technic" üsulu ilə həyata

keçirilmişdir. Qamma eksperimental qurğusu “qamma şüasının ötürülməsi texnikası” prinsipi əsasında yaradılmışdır. Qamma ötürülmə texnikasında qamma şüasının radioizotop mənbəyi və hədəf materialın iki müxtəlif tərəfində eyni oxdə yerləşdirilmiş qamma detektoru vasitəsi ilə təyin olunmuşdur. Radioizotop mənbəyindən çıxan qamma fotonlar qurğusunun kollimatorlarının köməyi ilə paralel dəstələr şəklində materiala daxil olub keçdikdən sonra detektor vasitəsilə şüalanma intensivliyinin ölçülməsi nəticəsində qiymətləndirmə aparılır. Düzgün hesablamə həndəsəsini yaratmaq və səpilmiş qamma kvantların detektora çatmasının qarşısını almaq üçün radioizotop mənbəyi və qamma detektor qurğusunun bloklar vasitəsi ilə qorunur. Qamma ötürülmə texnikasında detektordan götürülmüş nümunə vəziyyətinə aid saylar nümunəsiz vəziyyətdə olan saylarla müqayisə aparılıb, şərh olunmuş və qiymətləndirilməsi aparılmışdır. Qamma eksperimental qurğunun sxematik təsviri şəkil 6.1.1-də verilmişdir.



Şəkil 6.1.1 Qamma eksperimental qurğunun sxematik təsviri

Qamma ötürülməsi texnikasına əsaslanan qamma sınaq kamerasının elementləri aşağıda göstərilən komponentlər əsasına yaradılmışdır; qamma şüa mənbələri, NaI sintilyator detektoru, çox kanallı analizator, kalimotor, qurğusunun bloklardan ibarətdir. Təcrübi tədqiqatlarda istifadə olunan materialların qamma şüalanmasına qarşı dayanıqlılığ xüsusiyyətlərini qiymətləndirmək üçün İstanbul Texniki Universiteti Enerji İnstitutunda yerləşən ^{60}Co və ^{137}Cs qamma şüa mənbələrindən istifadə edilmişdir. ^{60}Co və ^{137}Cs qamma radioizotop mənbələri tədqiqatlarda tez-tez istifadə olunan, 30 il yarımparçalanma dövrü ilə mono energetikdir, 0.662 MeV-də tək qamma foto pikinə malikdir və cüt əmələ gəlmədən uzaqda yerləşdiyi üçün təcrübi tədqiqatlarda üstünlük verilən qamma radioaktiv mənbələrdən biridir. 1.17 və 1.33 MeV qamma enerjilərində iki əsas pikə malik olan və orta

enerji qiyməti 1.25 MeV olan ^{60}Co qamma radioizotopunun yarı parçalanma periodu 5.23 ildir. ^{60}Co qamma radioizotopu sənaye tətbiqlərində tez-tez istifadə olunduğu üçün və həmçinin cüt əmələ gəlmə bölgəsində yerləşdiyi üçün təcrübi tədqiqatlarda geniş istifadə olunmuşdur. Təcrübələrdə istifadə olunan qamma şüa mənbələrinin xassələri və aktivliyi cədvəl 6.1.1-də verilmişdir.

Cədvəl 6.1.1. Təcrübi tədqiqatlarda istifadə olunan qamma radioaktiv mənbələrin xüsusiyyətləri.

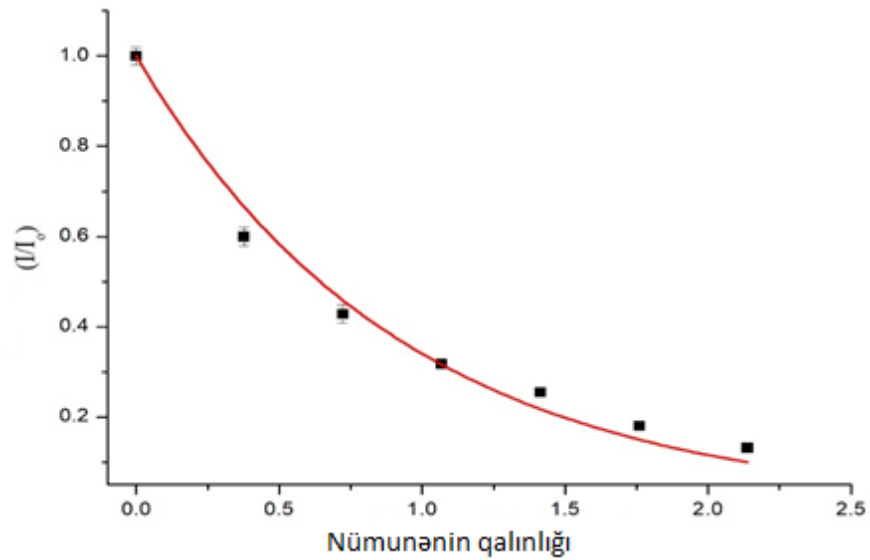
Qamma mənbəyi	Enerjisi, (MeV)	Yarım P/P	Aktivlik
Co-60	1.17 1.33	5.23	14.1 μCi
Cs-137	0.662	30.1	8.89 μCi

Tədqiqatlarda Canberra markalı (802-2X2) (NaI) sintillyasiya qamma detektorundan istifadə edilmişdir. Müxtəlif qamma enerji diapazonlarında radioizotoplar təhlil olunmuş, təcrübələrdə istifadə olunan materialların qamma dayanıqlı xüsusiyyətlərini təyin etmək üçün ORTEC MAESTRO proqram versiyası 7.1 kompüter proqramı istifadə edilmişdir. Şüa mənbəyini və qamma detektor sistemi, müvafiq qamma şüasını təyin etmək üçün 5 sm qalınlığında və 7 mm diametrlı qurğusun kollimatorundan istifadə edilmişdir. Nisbi hesablama qiymətləri ^{137}Cs qamma mənbəyinə qarşı B_4C əsaslı kompozit materiallar üçün təcrübi nəticələrdən istifadə etməklə əldə edilmişdir [34, 63-65]. ^{137}Cs qamma mənbəyinin B_4C kompozit materiallar üzərində eksperimental nəticələri cədvəl 6.1.2-də verilmişdir.

Cədvəl 6.1.2. ^{137}Cs qamma mənbəyi ilə B_4C əsaslı kompozit materiallar üçün təcrübə nəticələri.

Qalınlıq, sm	1 təcrübə	2 təcrübə	3 təcrübə	Orta	Xəta
0	45201	47867	43015	45361	358
0.3771	28098	26901	26574	27191	311
0.7227	19188	18962	20173	19441	279
1.0677	14605	14741	13896	14414	219
1.4139	11738	11209	11766	11571	218
1.7597	8102	8440	8010	8184	212
2.1379	5917	6099	5873	5963	192

Şəkil 6.1.2-də B_4C əsaslı kompozit materialların ^{137}Cs qamma mənbəyi üçün zəiflətmə spektri verilmişdir.

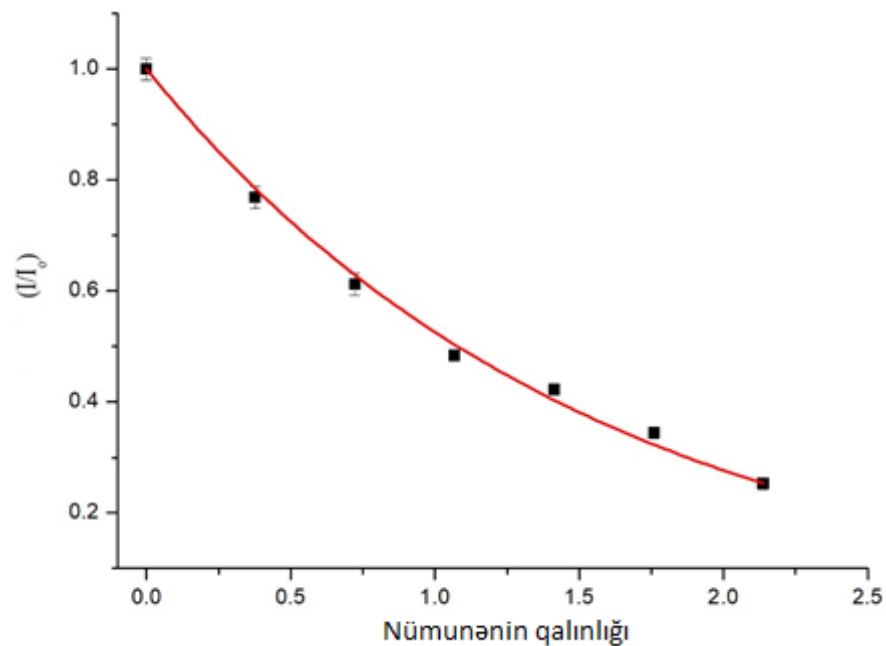


Şəkil 6.1.2. B_4C əsaslı kompozit materialların ^{137}Cs qamma mənbəyi üçün zəiflətmə spektri.

Cədvəl 6.1.3. ^{60}Co qamma mənbəyi ilə B_4C əsaslı kompozit materiallar üçün təcrübi nəticələri

Qalınlıq, sm	1 təcrübə	2 təcrübə	3 təcrübə	Orta	Xəta
0	64125	64014	64103	64125	1369
0.3771	49253	49198	49157	49253	1367
0.7227	39261	39089	39361	39261	1280
1.0677	31022	31270	30368	31022	1250
1.4139	27115	27250	27056	27115	1165
1.7597	22095	22164	22111	22095	996
2.1379	16204	16195	16097	16204	946

Şəkil 6.1.3-də B_4C əsaslı kompozit materialların ^{60}Co qamma mənbəyi üçün zəiflətmə spektri verilmişdir.

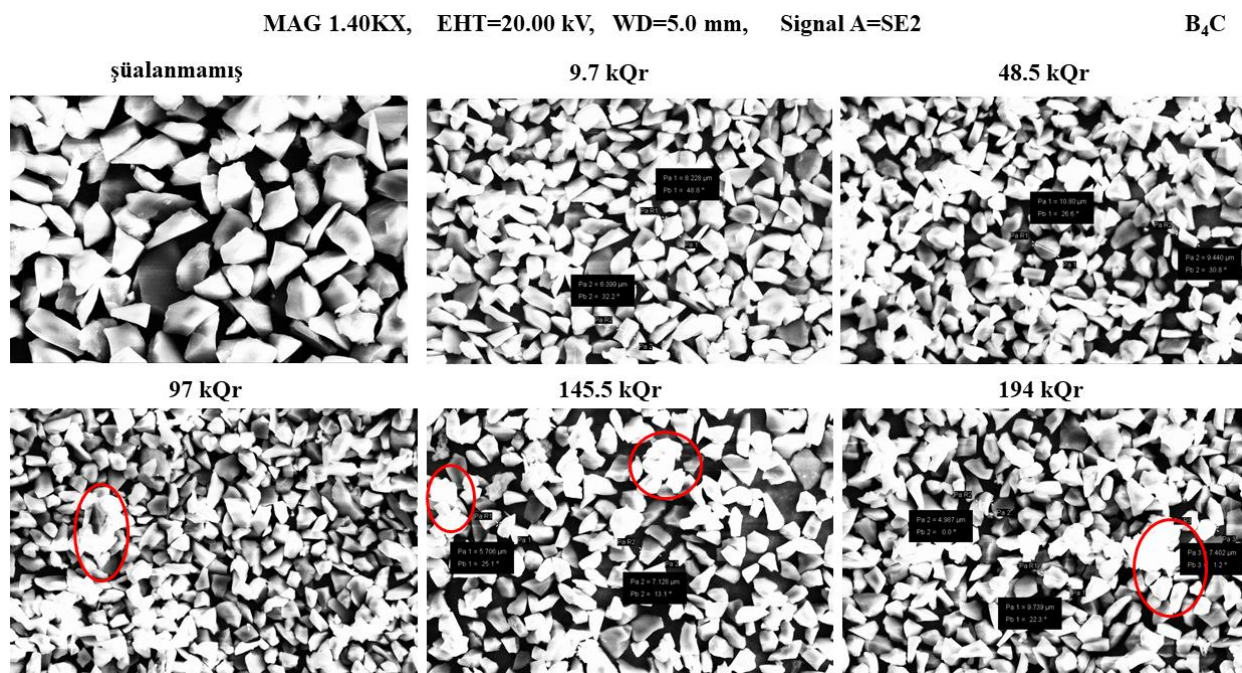


Şəkil 6.1.3. B_4C əsaslı kompozit materialların ^{137}Cs qamma mənbəyi üçün zəiflətmə spektri.

^{60}Co və ^{137}Cs qamma şüa mənbələrinə qarşı kompozit materiallarla aparılan təcrübi nəticələrdən istifadə edərək, kompozit materiallar üçün nisbi hesablama dəyərləri əldə edilmişdir. Optik absorbsiya və fotoluminesensiya spektrləri ilə gamma radioaktiv mənbələr vasitəsi ilə müxtəlif kristal quruluşlarda şüalanmadan sonra rəng mərkəzlərinin formalaşması, səth morfolojiyasının dəyişməsi növbəti başlıqlarda təqdim edilmişdir.

6.2 Qamma şüaların təsiri altında səth morfologiyası və kristallik parametrlərin dəyişməsi

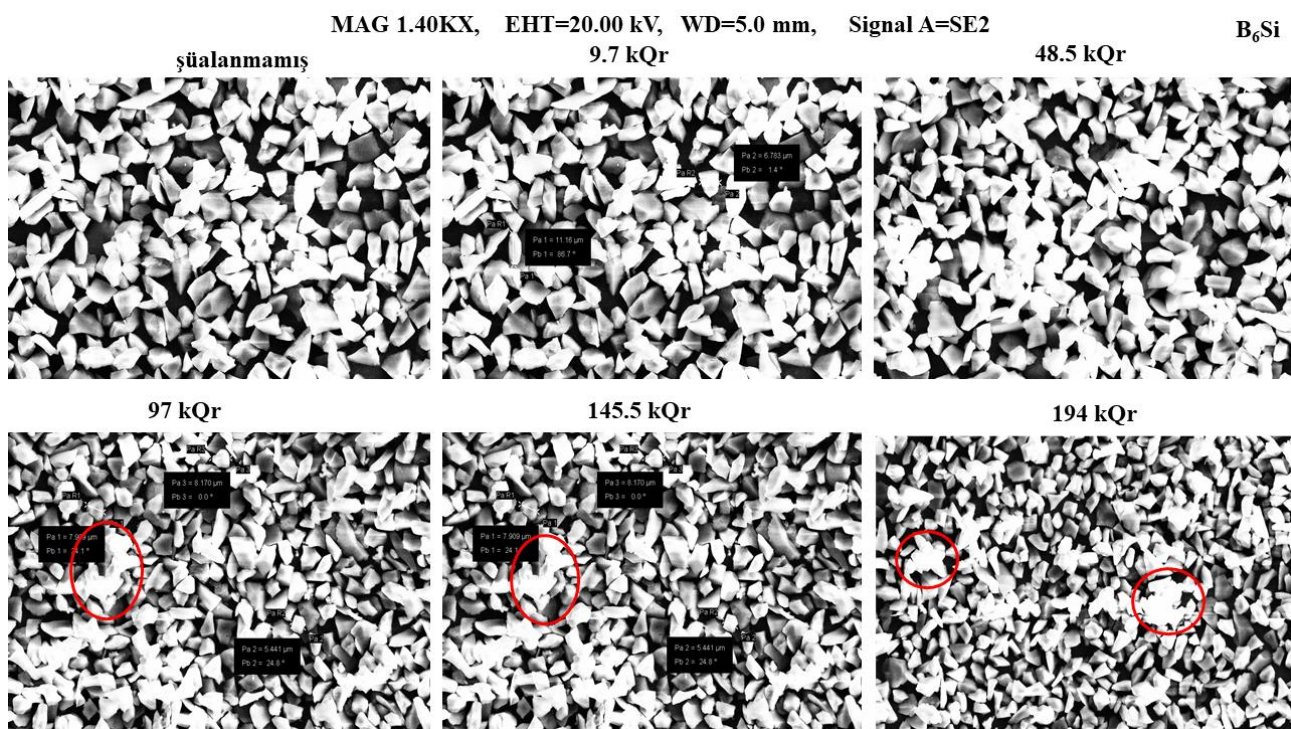
Şəkil 6.2.1-6.2.4 də təmizlik dərəcəsi 99.5% bor karbid, 99,8 % bor silikat, 99.2% bor nitrid və bor oksid kristalları doza gücü $D = 0.27$ Qr/san olan 9.7 kQr, 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr udulma dozalarında şüalandırılmış kristallarının səth morfologiyası göstərilmişdir. Xüsusi laboratoriya şəraitdə tətqiq olunan kristallar karbon nazik təbəqələrin üzərinə 1-3 mm qalınlığında bircins paylanma şərti ilə əlavə edilərək yüksək vakuum səviyyəsində olan təcrübi kameraya yerləşdirilmişdir. SE2 detektoru vasitəsi ilə elektron selinin enerjisi səth relyefinə görə kiçik addımlarla artırılır, hissəciklərin paylanması və ölçü paylanması haqqında ətraflı məlumat əldə olunur.



Şəkil 6.2.1. B₄C kristalı 9.7 kQr, 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr udulma dozalarında şüalandırılmış səth morfologiyası.

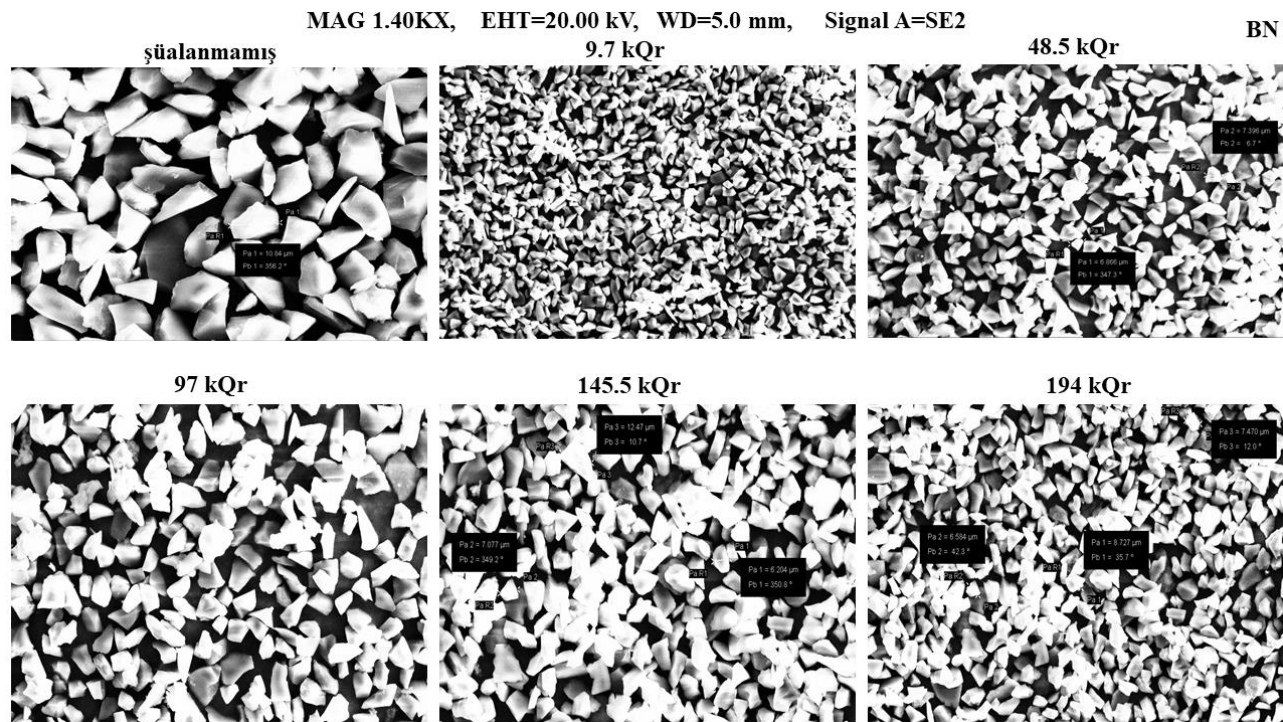
Şüalanma dozəsindən asılı olaraq amorflaşma izlərinə rast gəlinir, şəkil 6.2.1-də 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr qırmızı dairələrlə qeyd olunmuşdur. Kiçik udulma dozalarında amorflaşma izlərinə rast gəlinmir. Bor karbid kristalı üçün müəyyən olunmuşdur ki, mikro kristalların ölçüləri 5-7 µm intervalında dəyişir. Bor karbid kristalının malik olduğu xüsusi sərtlik dərəcəsi, aktiv səth tərəfindən atmosferdən absorbsiya olunmuş su molekullarının birləşdirilməsi verilmiş ölçüdə müşahidə olunmur və hissəciklər tamamilə bir birindən fərqli

şəkildə yerləşir. Şəkil 6.2.2-də B_6Si kristalının SE2 detektoru ilə 20.00 keV elektronlar ilə alınmış səth morfologiyası verilmişdir. Səth morfoloji xüsusiyyətinə görə silisium borid kristalında hissəciklərin paylanması müxtəlifdir. Şəkildən aydın müşahidə olunur ki, bor və onun müxtəlif kristallarında spiral şəkilli formalaşma yoxdur. Spirall şəkilli formalaşma daha çox ortorombik birləşmələrdə rast gəlinir ki, bu da yüksək simmetriya ilə bağlıdır [13]. Bor karbid kristalında fərqli olaraq bor silikat kristalı 48.5 kQr qamma udulma dozəsindən başlayaraq amorflaşma izləri müşahidə olunur. Qamma şüaların təsiri altında amorflaşma mexanizmi bor karbid kristalından fərqli olaraq daha zəif fazada baş verir.



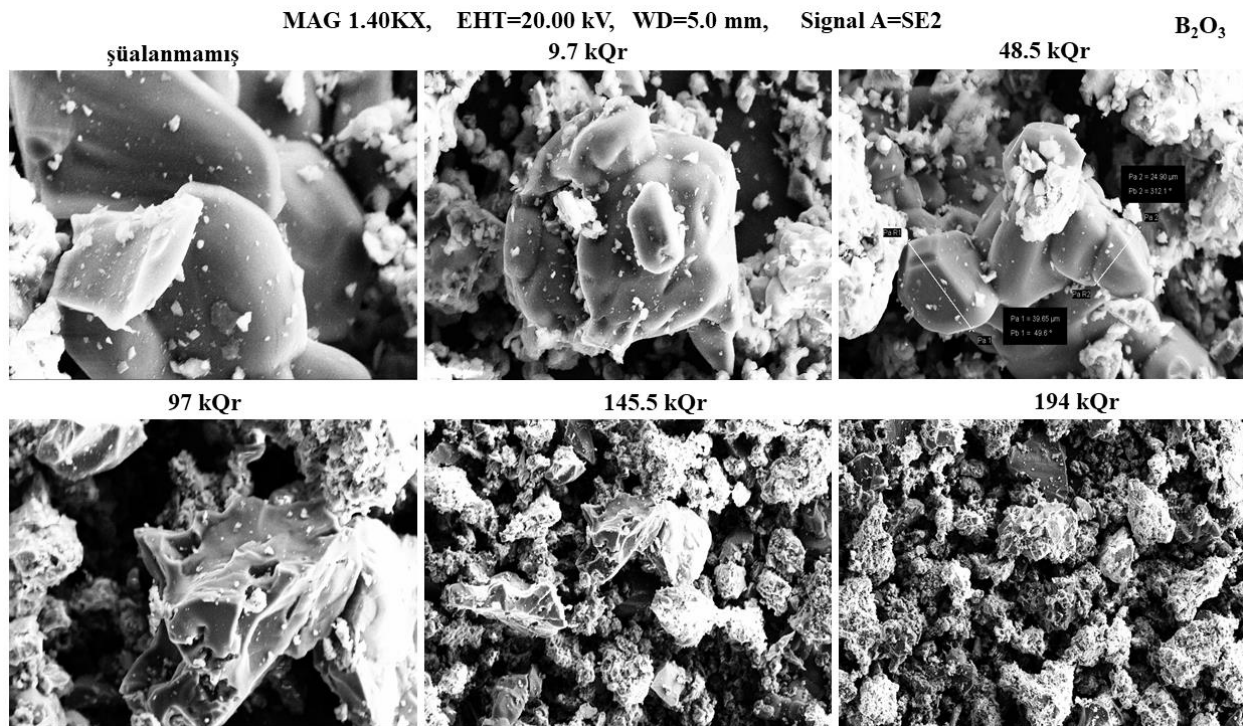
Şəkil 6.2.2. B_6Si kristalı 9.7 kQr, 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr udulma dozalarında şüalandırılmış səth morfologiyası.

Böyüdülmüş sahədə, seçilmiş nöqtələrdə aparılan ölçü təyini göstərir ki, B_6Si kristalında hissəciklər eyni ölçüdə olmayıb müxtəlif ölçülərdə səth boyu paylanmışdılar. Bor silikat mikro kristalların orta ölçü 5-80 μm intervalında dəyişir.



Şəkil 6.2.3. BN kristalının 9.7 kQr, 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr udulma dozalarında şüalandırılmış səth morfologiyası.

Digər tərəfdən bor nitrid kristalında səth morfologiyası bor karbid və bor silikat kristalları ilə eynilik təşkil edir. Seçilmiş nöqtələrdə aparılan ölçü təyini göstərir ki, bor-nitrid kristalında hissəciklər eyni ölçüdə olmayıb müxtəlif ölçülərdə səth boyu paylanmışdır. Bor-nitrid kristalında ölçü $52 \div 120 \mu\text{m}$ intervalındadır (şəkil 6.2.3). Amorflaşma fazasının formalaşması müşahidə olunmur. Şəkil 6.2.4-də nano ölçülü B_2O_3 kristalının səth morfologiyası qamma şüalanma dozəsindən asılı olaraq verilmişdir. 500 nm intervalında tədqiq olunmuş sahədə 9.7 kQr-48.5 kQr doza intervalında kristalların səthində nəzərə çarpaq dəyişiklik baş vermir. 97 kQr udulma dozəsindən başlayaraq 194 kQr maksimum udulma dozəsində səthin deqredasiya mexanizmi kiçik səviyyədə laylı pozulmuş strukturun formalaşma mexanizmi yaradır. Aparılan təcrübələrlə müəyyən olunmuşdur ki, kristallarda ölçü $32 \mu\text{m}$ başlayaraq maksimum $120 \mu\text{m}$ ölçülü hissəciklərə rast gəlinir. SEM tədqiqatlarından məlum olmuşdur ki, bor silikat, bor karbid, bor nitrid və bor oksid kristallarında hissəciklərin ölçülərinin paylanması müxtəlifdir.

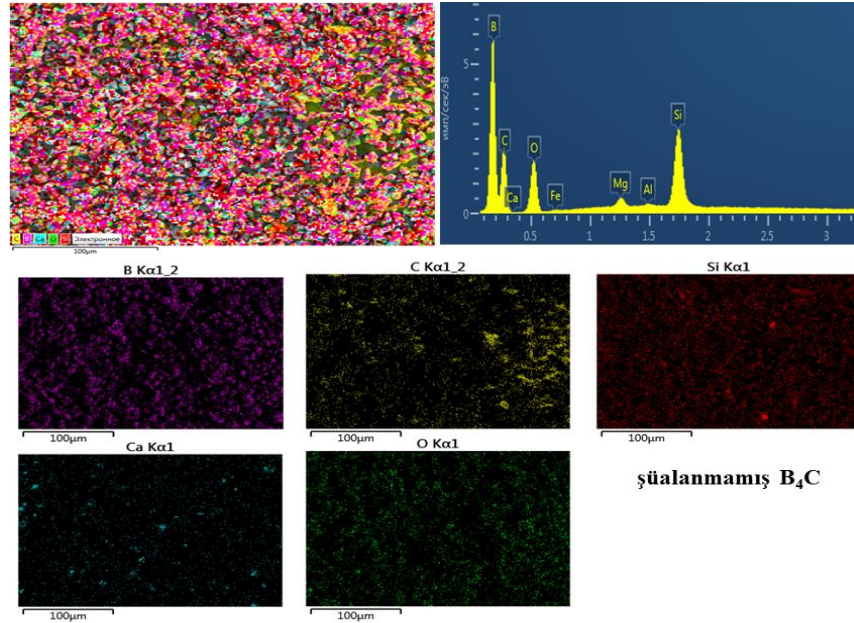


Şəkil 6.2.4. B₂O₃ kristalının 9.7 kQr, 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr udulma dozalarında şüalandırılmış səth morfologiyası.

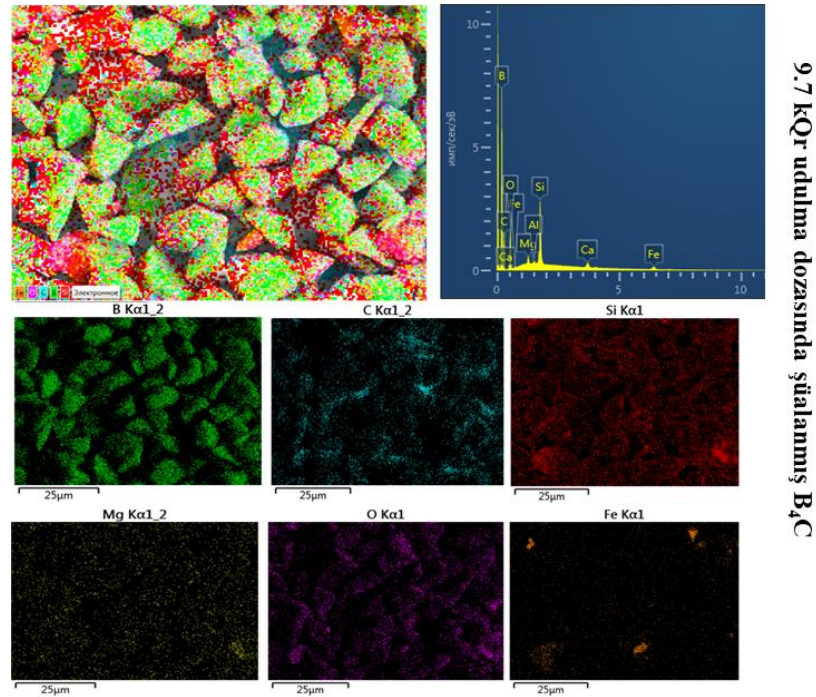
Həmçinin müəyyən olunmuşdur ki, kristallarda aparılan tərkib analizi zamanı kiçik nisbətlərdə qatışıq elementlərin olması aşkar edilib. SEM tədqiqatlarından müəyyən olunmuşdur ki, kristallar 145.5 kQr qamma şüalarla şüalandırıldıqdan sonra səthdə amorflaşma izlərinə rast gəlinir və 194 kQr udulma dozalarından sonra amorflaşma aydın şəkildə seçilir (şəkil 6.2.5-6.2.15). Bor karbid kristalı üçün 100 µm seçilmiş hissədə elementlərin xəritələnmə analizi yerinə yetirilmişdir. Şüalanmamış və fərqli müddətlərdə şüalanmış kristalların səthində hissəciklərin və kimyəvi elementlərin dəyişmə dinamikası verilmişdir. Şüalanmamış kristallarda elementlərin xəritələnməsində hissəciklərin və elementlərin paylanması homogen formaya yaxın olmasına baxmayaraq, seçilmiş zaman intervalında şüalandırılmış kristallarda elementlərin xəritələnməsi fərqlidir. İlk baxışdan səthdə hissəciklərin paylanması daha çox heterogen şəkildə olması aydın formada seçilir.

Şüalanmadan sonra elementlərin xəritələnməsində əsas mexaniz şüalanma müddətinin artması ilə C, Si, Ca və O elementlərinin daha çox birləşməsi yəni bir hissədə və yaxud müxtəlif hissələrdə mobil şəkildə toplanmasıdır. Həmçinin həmin elementlərin ion radiuslarının fərqliliyi 0.16 nm C, Si 0.026 nm, 242 nm Ca və 0.008 nm O onların səthdə

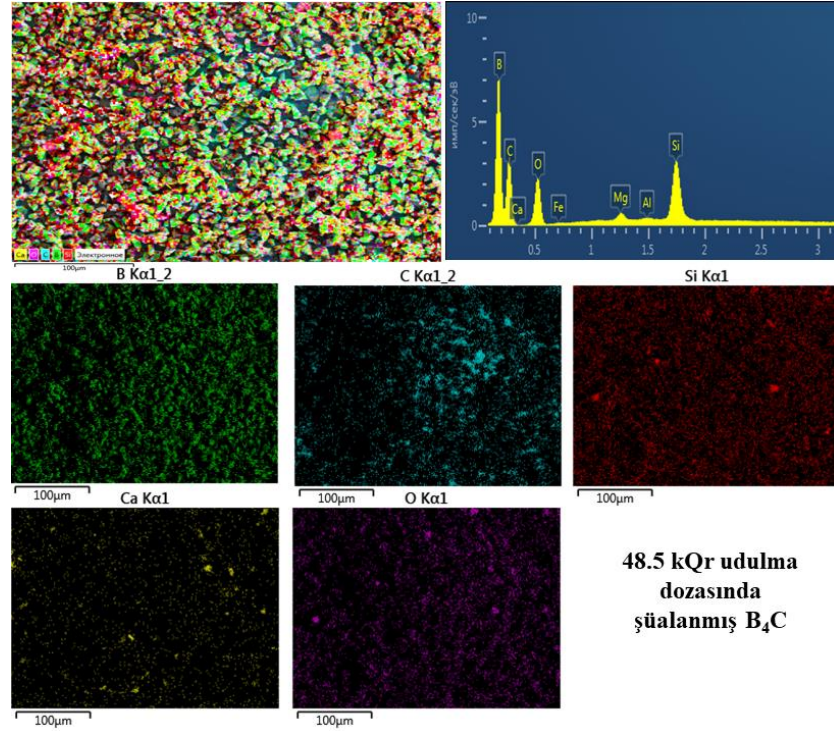
və yaxud həcmdə paylanma dinamikasına təsir edir. C elementinin şüalanmamış nümunələrdə qrafit şəklində kiçik miqdarda olması və yüksək udulma dozalarında CO₂ qazı şəklində ayrılması təcrübi tədqiqatlarda mövcuddur.



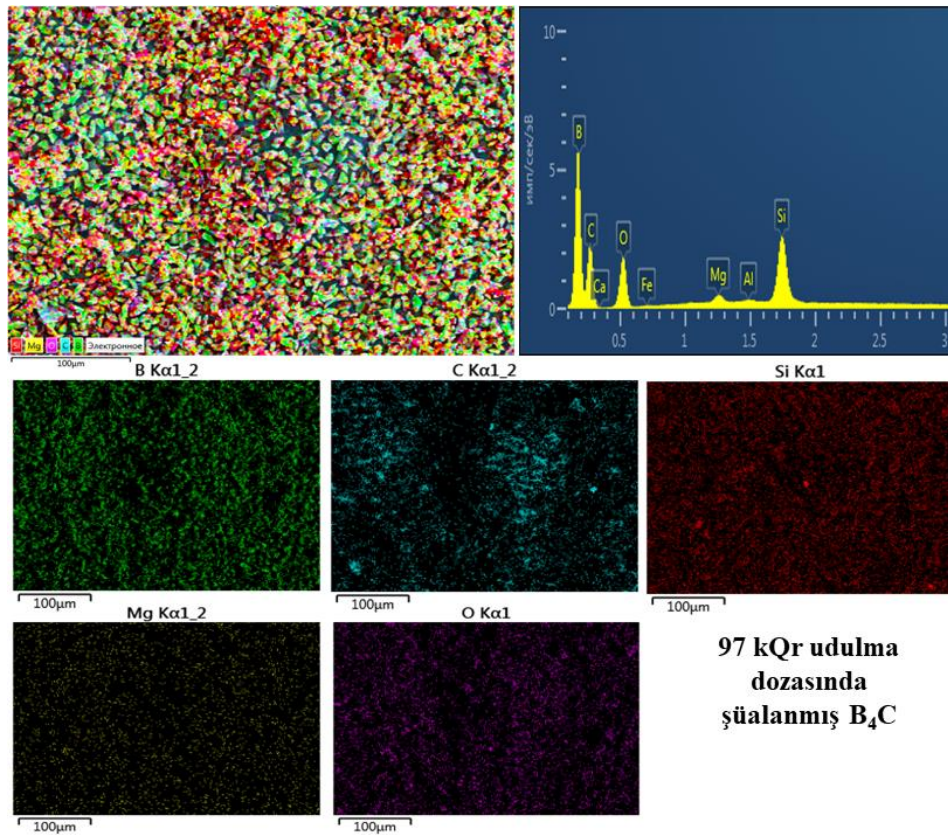
Şəkil 6.2.5 B₄C mikro kristallarında elementlərin paylanma morfologiyası.



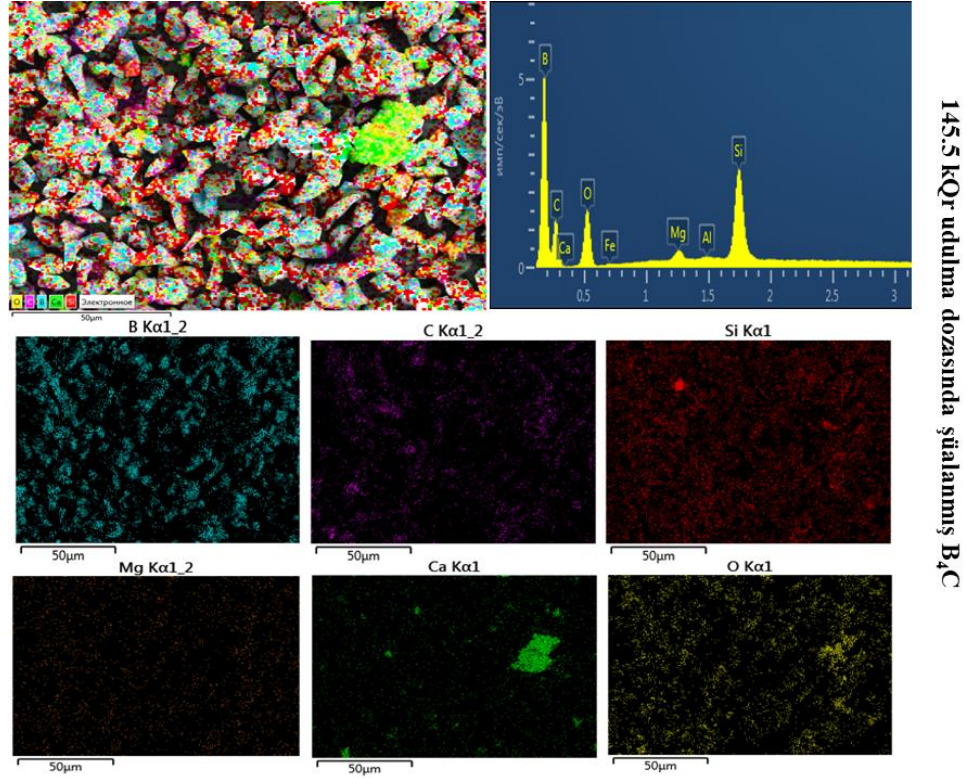
Şəkil 6.2.6 B₄C mikro kristallarında 9.7 kQr udulma dozasında elementlərin paylanma morfologiyası.



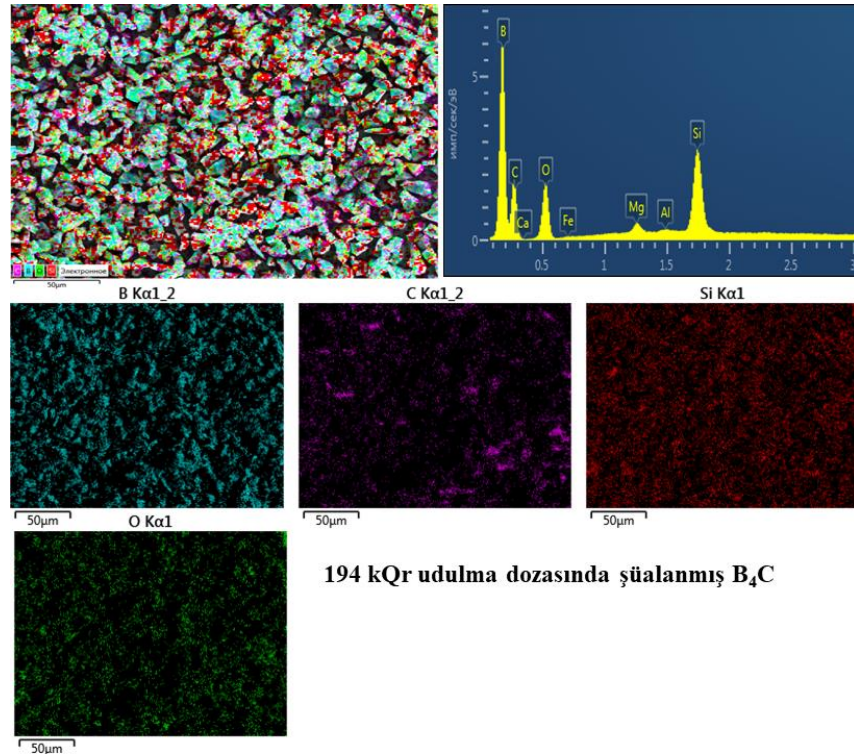
Şekil 6.2.7 B₄C mikro kristallarında 48.5 kQr udulma dozasında elementlerin paylanma morfolojyası.



Şekil 6.2.8 B₄C mikro kristallarında 97 kQr udulma dozasında elementlerin paylanma morfolojyası.



Şekil 6.2.9. B_4C mikro kristallarında 145.5 kQr udulma dozusunda elementlerin paylanma morfolojyası.



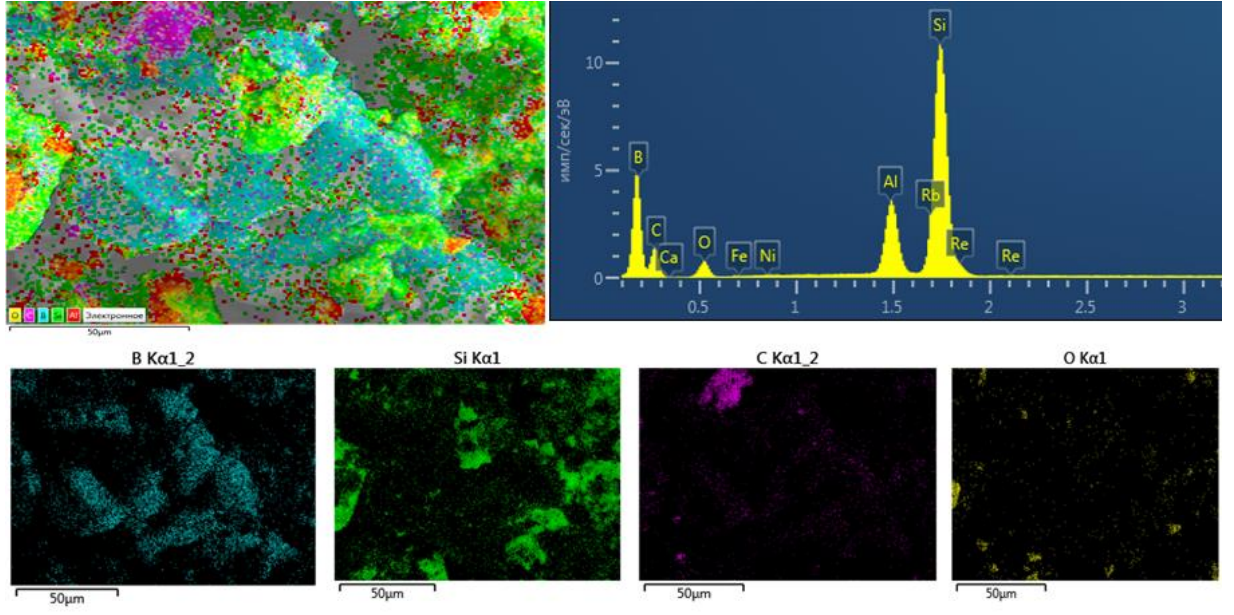
Şekil 6.2.10. B_4C mikro kristallarında 194 kQr udulma dozusunda elementlerin paylanma morfolojyası.

İon radiusu daha böyük olan Ca elementinin yüksək udulma dozasında daha çox mobil şəkildə toplanması aşakar olunmuşdur və 194 kQr udulma dozasında şüalanmış kristallarda daha aydın seçilir. Qamma şüalar ilə şüalandırılmış bərk cisimlərdə və yaxud keramik birləşmələrdə bu tip tədqiqatlara rast gəlinmir. Məlumdur ki, nümunələrin sintezi zamanı qarışıq elementlərin tam təmizlənməsi texniki cəhətdən çətindir. Lakin qarışıq elementlər nümunədə sərbəst elementlər şəklində qalaraq xarici qamma şüaların təsiri ilə nümunə daxili istilik hərəkətində olur. Ehtimal olunur ki, qamma şüalarla ilə baş verən enerji ötürülmə mexanizmi əsasında elementlərin daxil olduğu rabitələr deqredasiyaya məruz qalır.

Aktiv rabitələrə hansı ki, öz energetik halına uyğun ionlarla rabitəyə daxil olur və həmin elementlərin mobilləşməsi kimi xəritələnir. Bor karbid kristallarının kimyəvi tərkibi və təmizlik dərəcəsi 99.5% ətrafında olmasına baxmayaraq təcrübi tədqiqatlar göstərir ki, kristalın tərkibində kiçik miqdarda əlavə elementlərin (O, Si, Ca and Mg) paylanma dinamikası statistik xarakterlidir. Şüalanmanın müddətinin artması əsasən B və C elementlərinin səthdə paylanma dinamikasını dəyişdirir və bu tam statistik xarakterli məlumatdır.

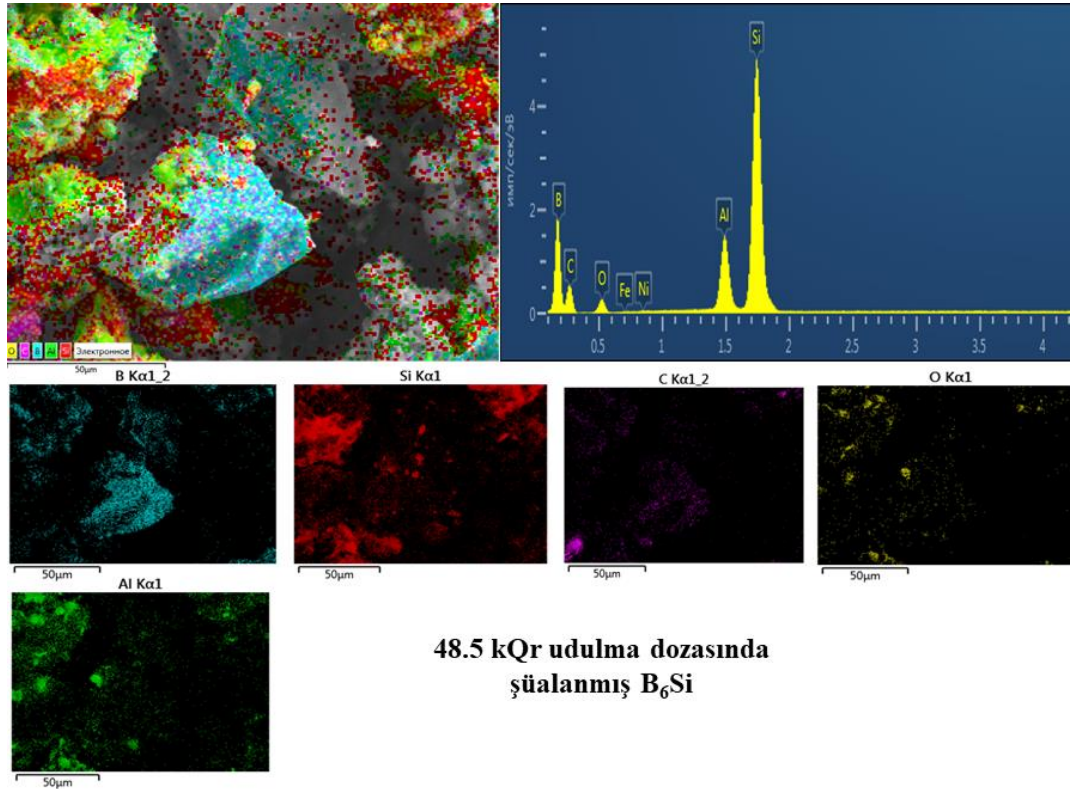
Lakin diqqət əsasən oksigen atomlarının səthdə nəzərə çarpacaq artmasıdır. Oksigen elementinin artma mexanizmi əsasən qamma şüalanmanın təsiri nəticəsində bor karbid kristalının temperaturunun artması və kiçik miqdarda B_2O_3 reaksiyasının əmələ gəlmə prosesinin baş verməsidir [163, 301]. Məlumdur ki, bir sıra elmi ədəbiyyatlarda B_2O_3 əmələ gəlməsi bir sıra xarici faktorların dəyişməsindən asılı olaraq fərqlənir. Lakin diqqət edilən məqamlardan bir oksigen kütlə faizi ilə 15.7% artmasıdır.

Məlumdur ki, qamma selinin ötürdüyü enerji mexanizminə əsasən aktiv mərkəzlərin oksigen atomları ilə rabitədə olmasıdır. SEM tədqiqatlarından aydın müşahidə etmək olur ki, $9.7 \text{ kQr} \leq D \leq 97 \text{ kQr}$ qamma şüalanma dozalarında bor karbid kristalının kristallik ölçülərində və səth morfolojiyasında nəzərə çarpacaq dəyişiklik yaranmır. Amma 145.5 kQr qamma şüalarla şüalandırıldıqdan sonra çox kiçik deqredasiyalar bəzi hissələrdə müşahidə olunur. Lakin 194 kQr şüalanmış kristalların ölçülərində dəyişmə olmasada səthdə mobil şəkildə, müxtəlif ölçülü (qırmızı oxlarla göstərilmişdir) malik amorflaşmalara (ağ buludlara) rast gəlinir.



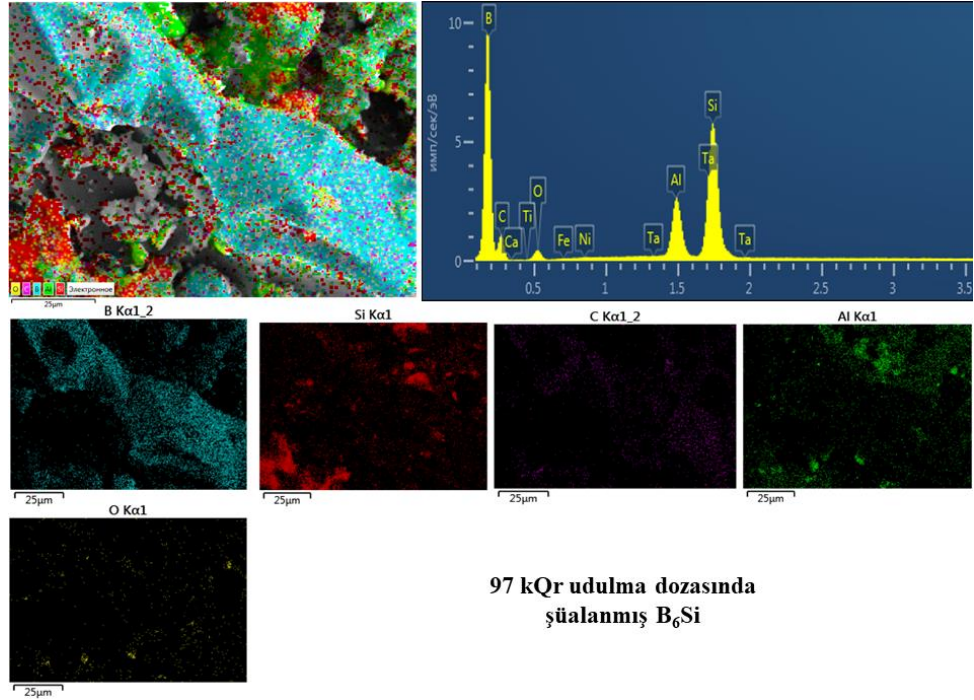
9.7 kQr udulma dozasında şüalanmış B₆Si

Şekil 6.2.11. B₆Si mikro kristallarında 9.7 kQr udulma dozasında elementlerin paylanma morfolojyası.

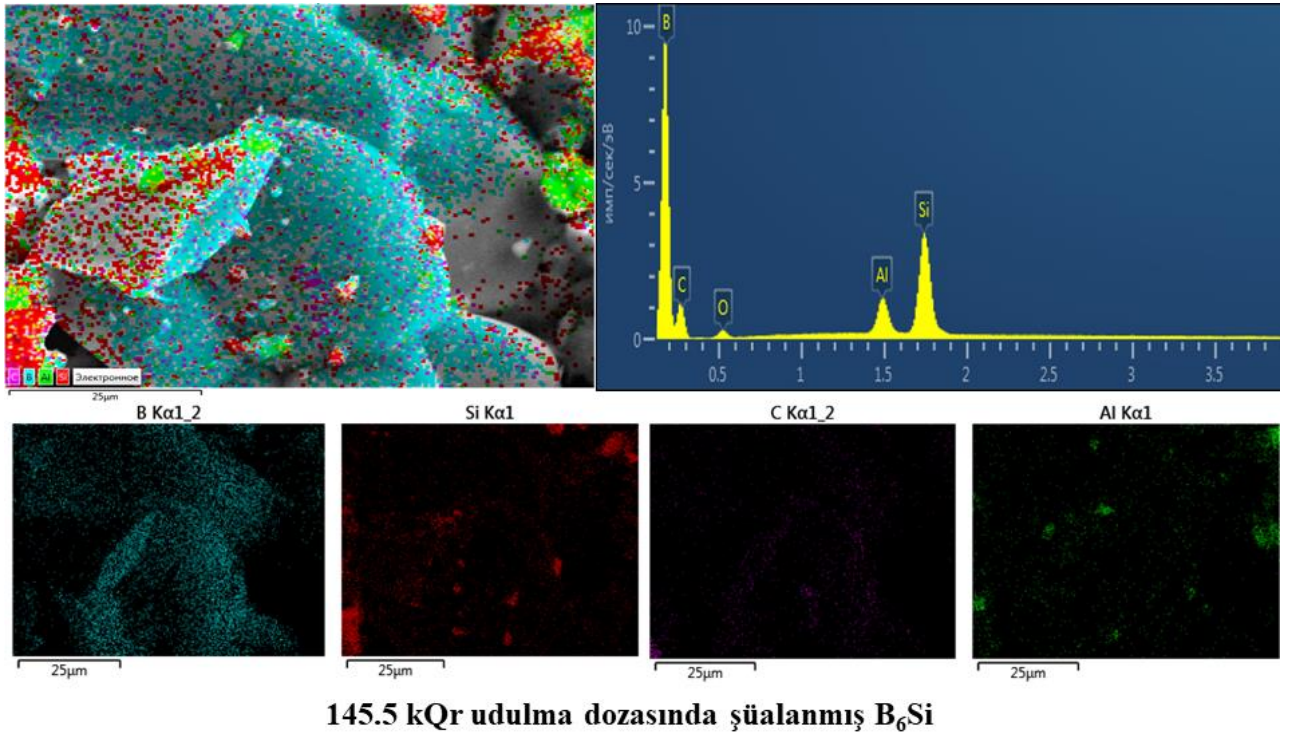


48.5 kQr udulma dozasında şüalanmış B₆Si

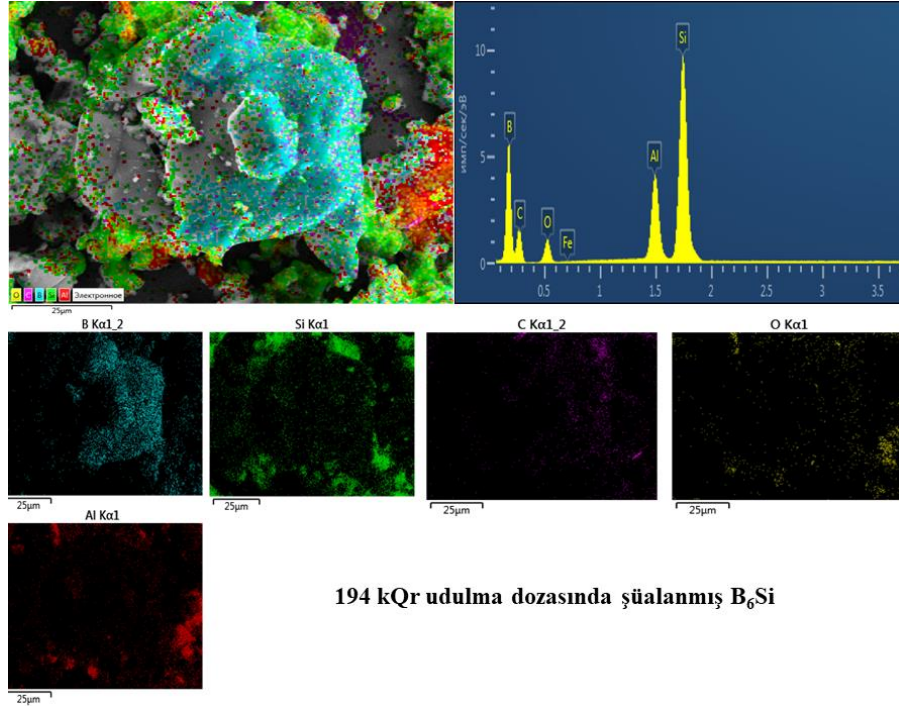
Şekil 6.2.12. B₆Si mikro kristallarında 48.5 kQr udulma dozasında elementlerin paylanma morfolojyası.



Şekil 6.2.13. B₆Si mikro kristallarında 97 kQr udulma dozasında elementlərin paylanma morfologiyası.

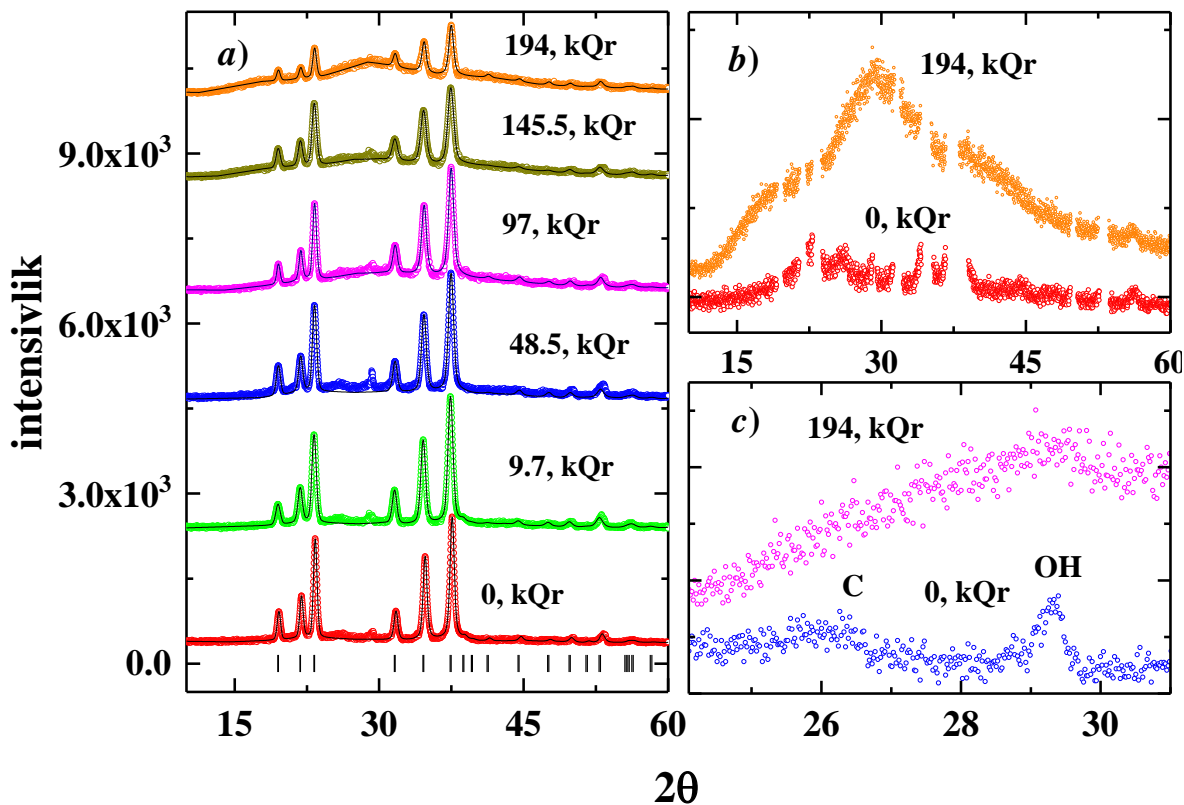


Şekil 6.2.14. B₆Si mikro kristallarında 145.5 kQr udulma dozasında elementlərin paylanma morfologiyası.



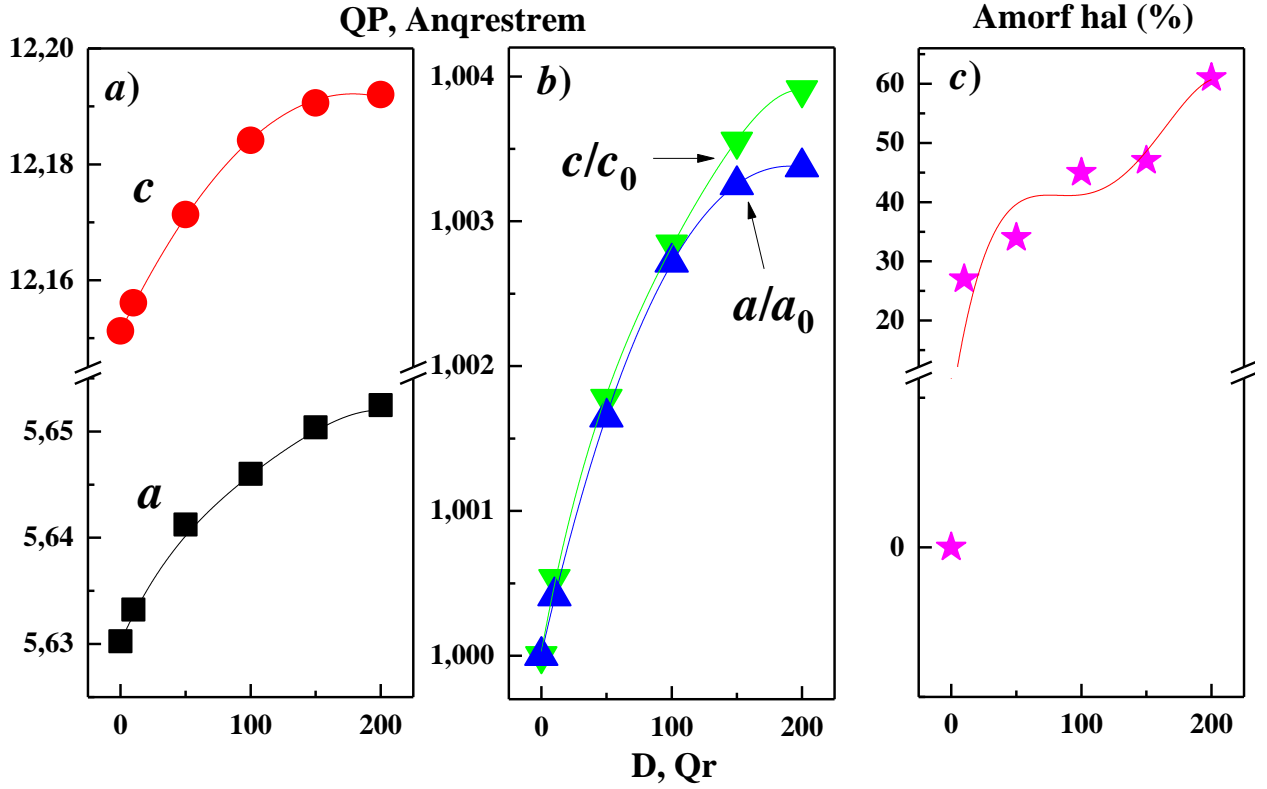
Şəkil 6.2.15. B₆Si mikro kristallarında 194 kQr udulma dozasında elementlərin paylanma morfoloqiyası.

SEM tədqiqatlarından alınan nəticələrdən əlavə B₄C və B₆Si kristallarında struktur analizləri yerinə yetirilmişdir. Şüalanmadan əvvəl və müxtəlif udulma dozalarında şüalandırıldıqdan sonra B₄C kristal quruluşunun rentgen difraksiyası spektrləri şəkil 6.2.16.a-da verilmişdir. Difraksiya spektrlərindən B₄C kristal quruluşu *R-3m* fəza qruplu romboedrik simmetriyaya malikdir ki, bu da əvvəlki tədqiqat nəticələrinə uyğun gəlir [58].



Şəkil 6.2.16. a) Müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış B_4C kristalının otaq temperaturunda və normal atmosfer şəraitində rentgen difraksiyası spektrləri, b) Şüalanmamış və 194 kQr şüalanmış B_4C kristalının rentgen difraksiyası spektrlərinin fonu, c) Grafit və hidrosid qrupunun rentgen difraksiyası spektrləri.

194 kQr udulma dozasında şüalandırılma zamanı alınmış difraksiya spektrlərdən görünür ki, şüalanma dozası artdıqca spektrlərin fonunda dəyişiklik baş verir. Bu da, şüalanmanın təsiri ilə kristal quruluşun dağılmasına və amorflaşmanın baş verməsinə uyğun gəlir. Şəkil 6.2.16.b-də şüalanmamış və ən yüksək şüalanma dozasında alınmış spektrlərin fonlarının müqayisəsi göstərilmişdir. Rentgen difraksiyası spektrlərində 25-30° intervalında B_4C kristal struktur quruluşuna aid olmayan maksimumlar müşahidə edilmişdir (Şəkil 6.2.16.c). Analiz nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, bu maksimumlar grafit və O-H qruplarına uyğun gəlirlər. Qrafite uyğun gələn difraksiya pikləri 97 kQr şüalanmadan sonra, hidrosid qruplarına uyğun gələn difraksiya pikləri isə 194 kQr şüalanmadan sonra müşahidə olunmur. Normal atmosfer şəraitdə və otaq temperaturunda B_4C kristalının qəfəs parametrlərinin qiymətləri $a = 5.630(2)$ Å və $c = 12.151(4)$ Å müəyyən edilmişdir. Qəfəs parametrlərinin şüalanmanın udulma dozasından asılılıqları şəkil 6.2.17.a-da verilmişdir.

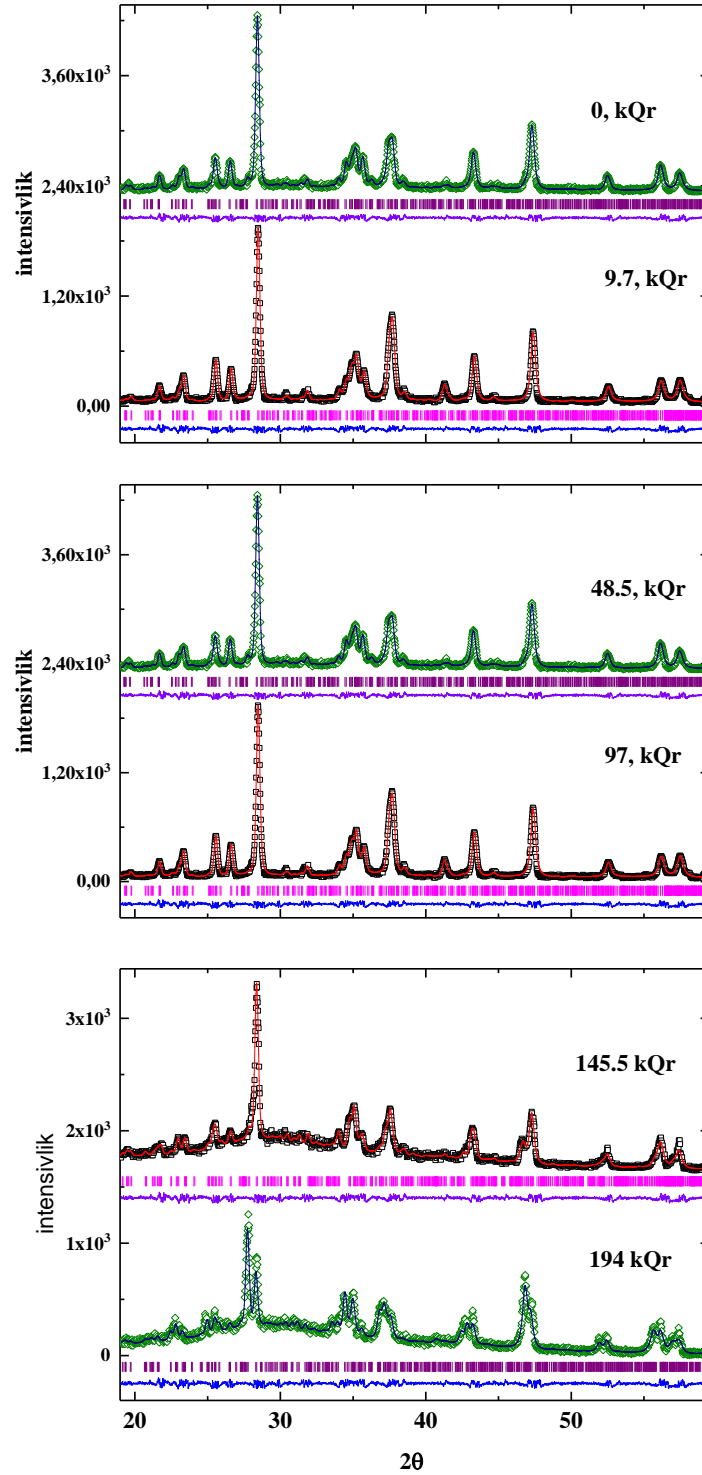


Şəkil 6.2.17. a) B_4C kristalının qəfəs parametrlərinin, b) B_4C kristalının nisbi qəfəs parametrlərinin, c) B_4C kristallarında amorflaşma mexanizminin şüalanma dozəsindən asılılığı.

Qrafikdən görüldüyü kimi 194 kQr udulma dozəsinə qədər strukturda quruluş fəza keçidi baş verməmiş, yalnız qəfəs parametrlərinin qiymətlərində artma müşahidə edilmişdir ki, bu da qamma şüalarının təsiri ilə atomlar arasındakı rabitələrin qırılması kimi izah edilir. Əyriyədən görünür ki, şüalanmanın kiçik dozələrində qəfəs parametrlərinin qiymətləri daha yüksək sürətlə artmasına baxmayaraq, 145.5 kQr udulma dozəsində şüalanmadan sonra qəfəs parametrlərinin qiymətlərinin artma sürəti stabilləşir. Hesab etmək olar ki, artıq 97 kQr udulma dozələrində şüalanma kristal qəfəsdə destabilizasiya, atomlar arasındakı rabitələrin dağılması və struktur dəyişikliyinə səbəb olur. 145.5 kQr udulma dozələrində şüalanmadan sonra bu proseslərdə stabilləşmə gedir. Qəfəs parametrlərin qiymətlərinin şüalanmadan asılılığından alınmışdır ki, c parametrlərinin qiyməti (0.39 %) a parametrlərinin qiymətinə (0.33 %) nəzərən daha çox artır. Bu hadisə onunla bağlıdır ki, uzun rabitələr daha zəif olduqlarına görə, xarici təsirlər nəticəsində qırılmağa daha çox meyilli olurlar. Qısa rabitələr ilə daha yüksək enerjiyə malik olduqlarına görə xarici təsirlərə qarşı da davamlılıq müşahidə

etdirirlər. Qəfəs parametrlərinin şüalanmanın dozasında asılı olaraq dəyişmə mexanizmini daha aydın şəkildə göstərmək məqsədi ilə şəkil 6.2.17.b-də qəfəs parametrlərinin a/a_0 və c/c_0 nisbi qiymətlərinin şüalanmanın dozasından asılılıqları verilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, şüalanmanın dozası artdıqca piklərin genişlənməsi və fonun yaranmasına səbəb olur. Rentgen difraksiyası spektrlərində fonun sahəsinin tam inteqralı metodu ilə amorflaşmanın faiz nisbətinin şüalanmanın dozasından asılılığı təyin edilmişdir (şəkil 6.2.17.c). Alınan nəticələrdən aydın olur ki, 194 kQr udulma dozalarında şüalandırılmadan sonra B_4C kristallarında tam amorflaşma baş verməmiş, 38 % kristal quruluş saxlanılmışdır.

B_6Si nkristalının otaq temperaturunda qamma kvantları ilə müxtəlif udma dozalarında şüalanması həyata keçirilmiş və şüalanmadan əvvəl və sonra kristal üçün alınmış struktur spektrləri şəkil 6.2.18-də göstərilmişdir. Şüalanmamış B_6Si kristalı üçün alınmış spektrlərdən aydın olur ki, birləşmə kristallik struktura malikdir. Şüalanmamış kristal üçün qəfəs parametrlərinin qiymətləri $a = 14.0605(5) \text{ \AA}$, $b = 18.0279(2) \text{ \AA}$ və $c = 9.2692(7) \text{ \AA}$ şəklindədir. Nəticələr göstərdi ki, normal atmosfer təzyiqində və otaq temperaturunda B_6Si kristalı $Pnmm$ fəza qrupuna, ortorombik kristal quruluş simmetriyasına malikdir. Şüalanmamış bor silikat kristalı üçün alınmış təcrübi nəticələr digər tədqiqat nəticələri ilə eynilik təşkil edir [133, 274]. $0 \leq D \leq 97$ kQr udulma doza intervalında qamma ilə şüalanmış kristallar üçün difraksiya piklərində intensivliyin dəyişməsi müşahidə edilmişdir. B_6Si məxsus piklərin intensivliyində $0 \leq D \leq 97$ kQr udulma dozasında spektrin dalğalanması müşahidə edildi.

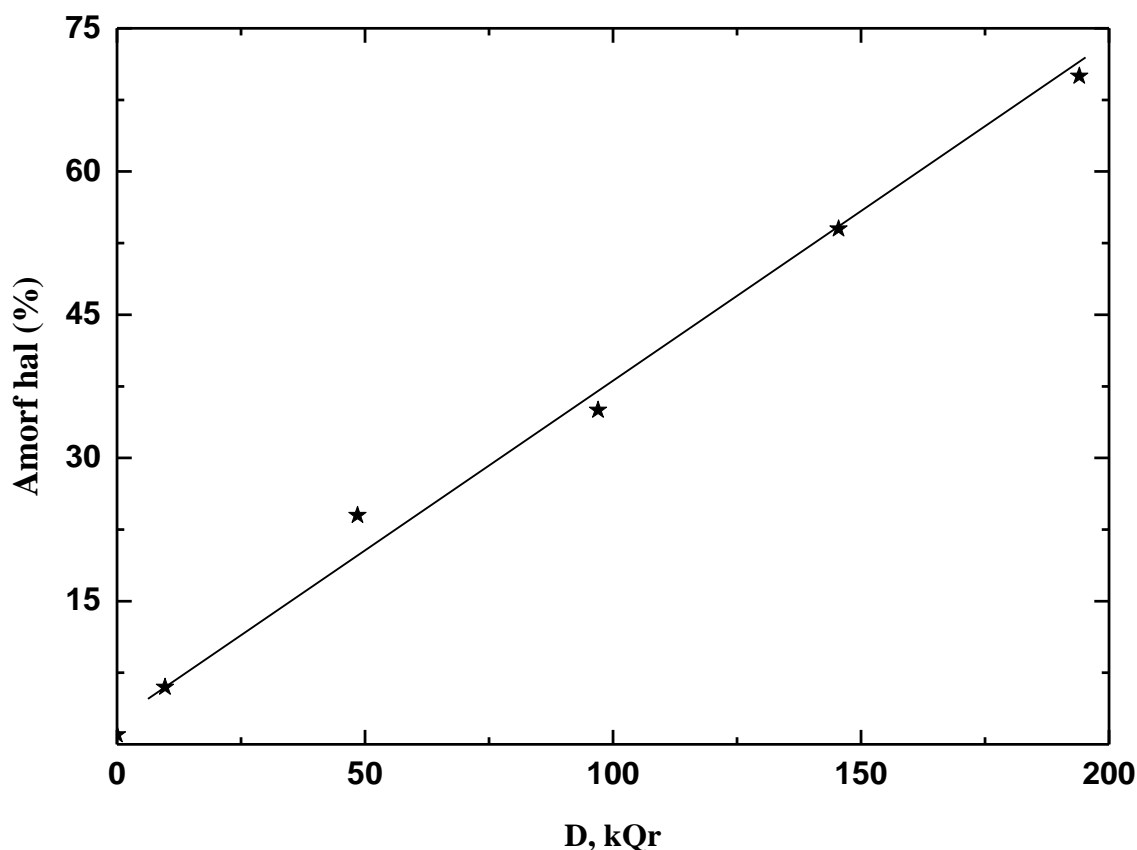


Şəkil 6.2.18. 9.7 kQr, 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr qamma şüalanma ilə udulma dozalarında B_6Si kristalı üçün difraksiya spektrləri.

Piklərin intensivliyindəki dəyişiklik kristal struktur dəyişiklikləri ilə izah etmək olar. Verilmiş şüalanmalarda kristal struktur $Pn\bar{m}$ fəza qrup simmetriyasını saxlayır. Bu azalma

1.2 MeV enerjili qamma kvantların təsiri altında baş verir və qəfəs parametrlərinin qiymətləri dəyişir (bəzi atomların ideal vəziyyətinə aiddir). $D \geq 145.5$ kQr udulma dozasından başlayaraq B_6Si kristalında qismən amorfizasiya mexanizmi başlayır.

Kristallarda amorflaşma dərəcəsini müəyyən etmək üçün şüalanmamış kristallarda formalaşan piklərinin sahələrinin şüalanmış kristalların sahələrinə nisbəti şəklində təyin olunur. Həmçinin $D \geq 145.5$ kQr-dən sonra qamma adsorbsiya dozası artırdıqda, spektrlərin bəzi difraksiya intensivliyi azalır. Şəkil 6.2.19 qamma şüalanma dozasından asılı olaraq B_6Si kristalında amorfizasiya dərəcəsi göstərilmişdir. 145.5 kQr udulma dozasında amorfizasiya dərəcəsi 54%, 194 kQr adsorbsiya dozası üçün 69 % müşahidə edilmişdir.



Şəkil. 6.2.19 Qamma şüalanma dozasından asılı olaraq amorfizasiyası dərəcəsi.

Ritveld metodu ilə B_6Si kristalının qəfəs parametrləri hesablanmış, qamma şüalanmanın udulma dozalarından asılı olaraq qəfəs parametrlərinin qiyməti $a=0,164$ Å, $b=0,009$ Å, $c=0,09$ Å-ə qədər artır və kristal strukturun həcmi $V=30,9$ Å³ müəyyən olunmuşdur. Şüalanmış B_6Si kristalının elementar qəfəsində müşahidə olunan parametrlərin və həcmnin dəyişməsi cədvəl 6.2.1-də verilmişdir.

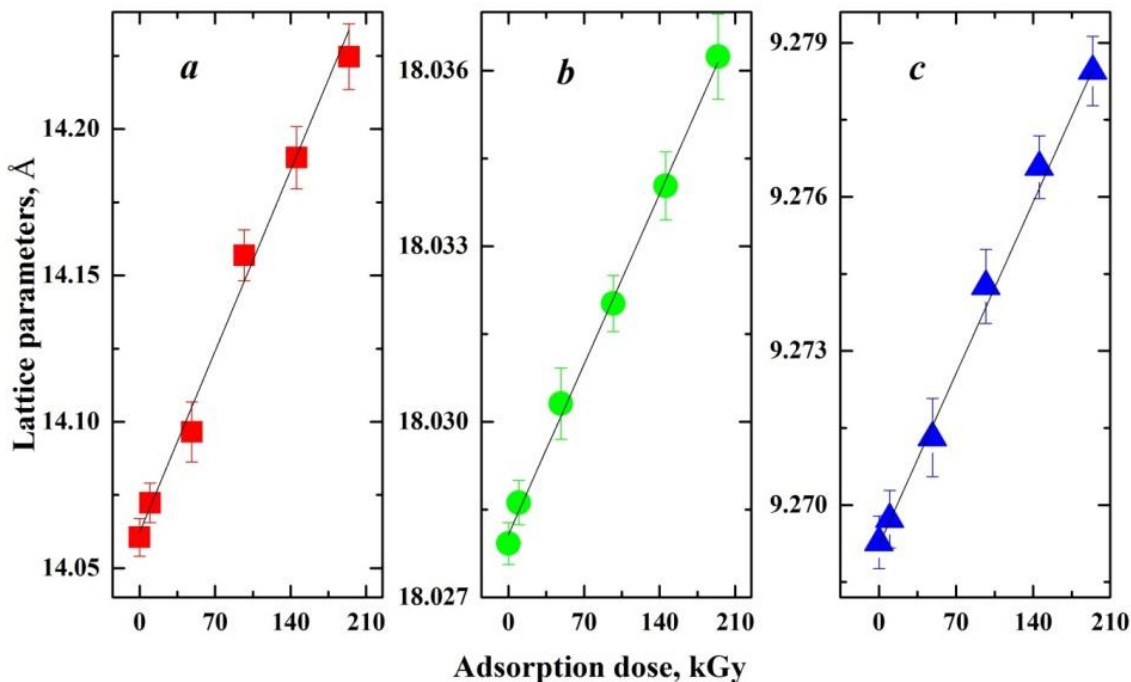
Cədvəl 6.2.1. Müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış B₆Si kristalında qəfəs parametrləri və həcmi.

Udulan doza, (kQr)	Qəfəs parametrləri və həcmi			
	$a, \text{Å}$	$b, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$V, \text{Å}^3$
0	14.060(6)	18.027(9)	9.269(2)	2349.(6)
9.7	14.072(2)	18.028(6)	9.269(7)	2351.(8)
48.5	14.096(5)	18.030(3)	9.271(3)	2356.(4)
97	14.156(9)	18.032(2)	9.274(2)	2367.(5)
145.5	14.190(2)	18.034(2)	9.276(5)	2373.(9)
194	14.224(7)	18.036(2)	9.278(4)	2380.(5)

Cədvəl 6.2.1-də alınan nəticələr göstərir ki, şüalanma dozası ilə qəfəs parametrləri artır, şüalanmamış kristal üçün qəfəs parametri 14.060 Å, 48,5 kQr və 194 kQr şüalanmadan sonra qəfəs parametrləri müvafiq olaraq 14,096 Å və 15,224 Å-ə intervalında dəyişir. Şüalanma dozasının artması ilə kristalların həcmi şüalanmadan əvvəl 2349 Å³-dən 48.5 kQr-də şüalanmadan sonra müvafiq olaraq 2356 Å³ və 2380 Å³-ə qədər artmışdır. Qəfəsin həcmnin və parametrlərinin artması materialın xarici faktorların təsirini göstərir. B₆Si kristalı qamma udulma dozəsindən asılı olaraq a, b və c qəfəs parametrlərinin dəyişmə mexanizminin şəkil 6.2.20 -də verilmişdir. Şüalanma əmsalları 6.2.1 tənliyi ilə hesablanmışdır.

$$K_i = \left(\frac{1}{a_{i0}}\right) \left(\frac{da_i}{dD}\right)_{P,T} \quad 6.2.1$$

Hardaki, K_i genişlənmə əmsalı, a_{i0} şüalanmamış kristalın qəfəs parametrləri, a_i şüalanmış kristalın qəfəs parametrləri və D qamma şüalanma hesabına udulan doza qəbul edilir. Nəticədə K_i üçün alınan qiymətlər (qəfəs parametrlərini xətti genişlənməsi) $k_a = 6.2 \times 10^{-5} \text{ kQr}^{-1}$, $k_b = 2.3 \times 10^{-6} \text{ kQr}^{-1}$, and $k_c = 5.2 \times 10^{-6} \text{ kQr}^{-1}$ kimi təyin olunmuşdur.



Şəkil 6.2.20. B_6Si qəfəs parametrlərinin adsorbsiya dozadan asılılıqları. Xətlər təcrübə məlumatlarının xətti funksiya polinomları ilə interpolasiyasıdır.

Sonuncu qrafikdən də görüldüyü kimi, qamma şüalanmasının udulma dozasının artması B_6Si qəfəsinin həcmnin artması ilə nəticələnir. Bundan əlavə, qəfəsin həcmi $V_0 = 2349. (6) \text{ \AA}^3$ dən $V_{194 \text{ kQr}} = 2380. (5) \text{ \AA}^3$ dək artması qəfəsin həcmnin 1.31% faiz artımına göstərir. Qəfəs strukturunda qamma şüalanmasının təsiri nəticəsində faza keçidinin baş vermədiyi aydın olmuşdur. Qamma şüalanmanın intensivliyi və enerjisi atomların qəfəsdəki koordinatlarını dəyişir və uzaq nizamlılıq qanunauyğunluğu pozulur. Yüksək udulma dozasında qamma şüalanması kristalda miqrasiya edə bilən müxtəlif nöqtəvi defektlər və aktiv mərkəzlər formalaşır ki, növbəti paragrafda bu haqqda geniş məlumat verilmişdir.

6.3 Qamma şüaların təsiri altında rəng mərkəzlərinin formalaşması

Qamma şüalarla şüalanmış B_4C kristallarının (diametri 7 mkm, qalınlığı 200-500 nm və skan sürəti 600 nm/dəq) optik udulma ölçüləri UV-V Gary 50 Scan spektrofotometrindən istifadə etməklə aparılmışdır. Doza gücü $D=0.27 \text{ Qr/san}$ olan Co^{60} radioizotopu ilə 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr şüalanmış B_4C kristalı üzərində yerinə yetirilmişdir. Optik udulma spektrləri 200-800 nm dalğa uzunluğu intervalında təyin olunmuşdur. F tip rəng mərkəzlərinin udulma zolaqlarının 460 nm və M rəng mərkəzlərinin 700 nm müşahidə

olunur. Kristallarda formalaşan defektlərin həcmi konsentrasiyası 6.3.1 tənliyi ilə yarıempirik Smakula tənliyindən istifadə etməklə hesablanmışdır [85].

$$N_{CCs}(cm^{-3}) = Abs \left(\frac{\ln 10}{t} \right) \left(\frac{10^{16}}{2.06 \times f} \right) \quad 6.3.1$$

$$\alpha = Abs \left(\frac{\ln 10}{t} \right) \quad 6.3.2$$

Burada $N_{CCs}(cm^{-3})$ vahid həcmdə F-rəng mərkəzlərin sayı, t kristalın qalınlığı sm, Abs kristalın maksimum udma əmsalı, f rəqsin maksimum gücü 0.8-0.9 intervalında dəyişir, α udulma əmsalı sm^{-1} [19]. Absorbsiya əmsalını 6.2.4 tənliyindən istifadə edərək optik sıxlığı (OS) ilə əlaqəli şəkildə ifadə etmək olar.

$$\alpha = \frac{OS}{\log_{10}^e \times R} = 2.3 \frac{OS}{R} \quad 6.3.4$$

R kristalda qamma şüaların nüfuz etməsidir. Temperaturun artması səbəbindən atomların qəfəs düyünündən yerdəyişməsi, miqrasiyası və nöqtə defektlərin rekombinasiyası baş verir. Zamandan asılı olaraq defektlərin konsentrasiyasın 6.3.5 tənliyi ilə hesablamaq olar.

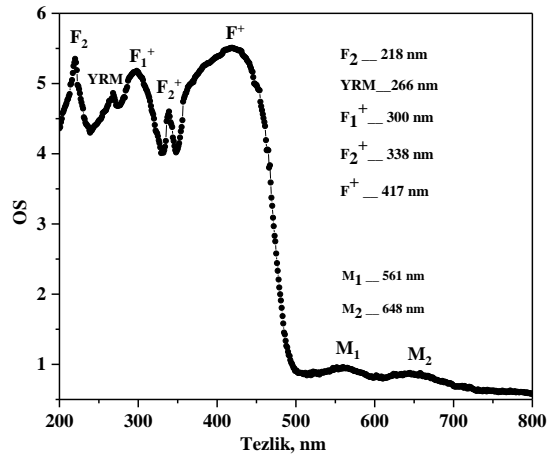
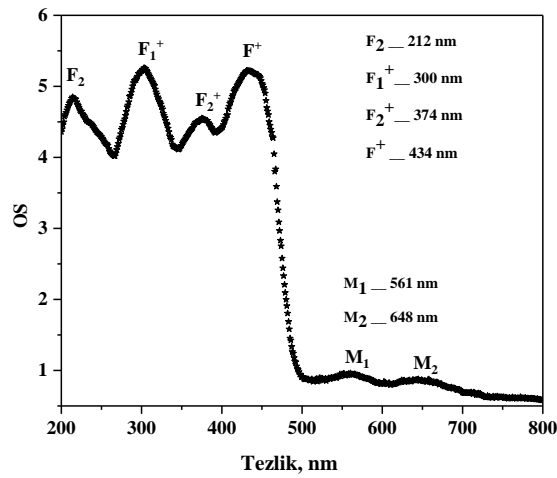
$$\frac{N_F}{N_0} = \exp(-vt) \quad 6.3.5$$

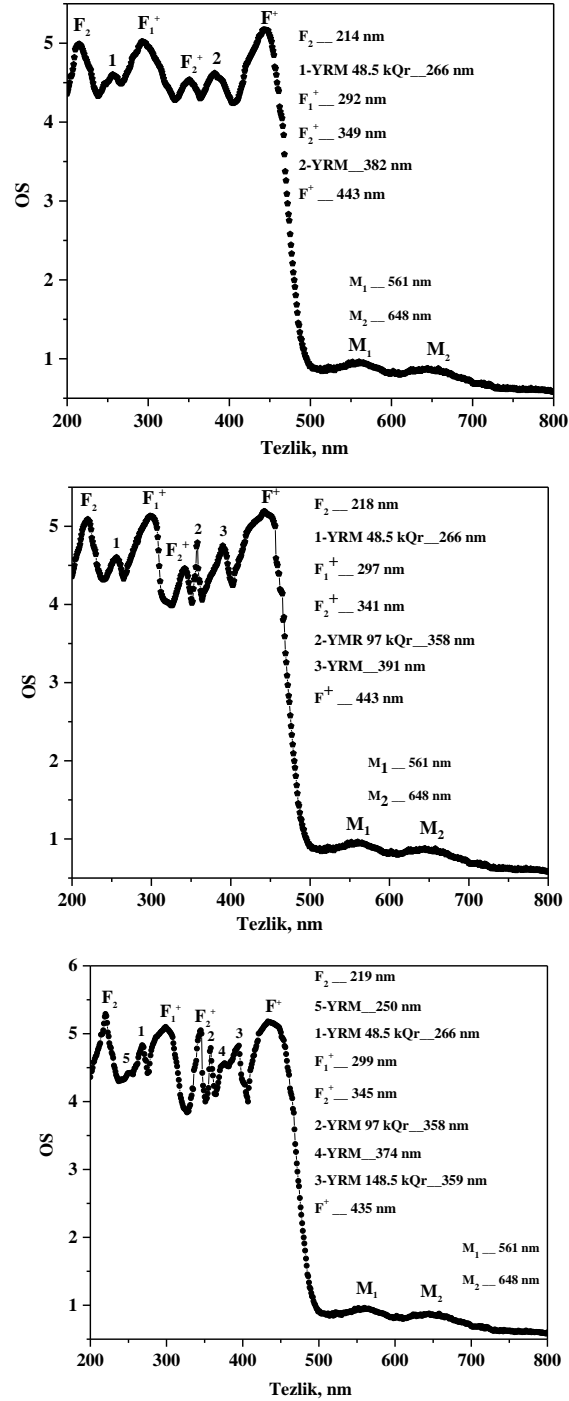
Burada N_0 qamma şüalanmadan sonra verilmiş defektlərin konsentrasiyasıdır. Otaq temperaturunda diffuziya tezliyini nəzərə alaraq

$$\frac{N_F}{N_0} = \exp \left(-v_0 t \times \exp \left(\frac{E_A}{k_B T} \right) \right) \quad 6.3.6$$

Burada v_0 tezlik faktoru olun (0.012 ± 0.004), E_A yaranmış vakansiyaların aktivləşmə enerjisi və k_B Boltsman sabitidir. Şəkil 6.3.1-də şüalanmamış və müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış B_4C kristalını udulma spektrləri göstərilmişdir. B_4C kristalının əsas spektrindən 212 nm, 300 nm, 374 nm və 434 nm dalğa uzunluğunda aktivləşmə enerjisi

1.89 eV olan F^+ rəng mərkəzləri müşahidə edilmişdir. Eyni udulma spektrində aktivləşmə enerjisi 0.1 eV ilə 561 nm və 648 nm-də iki M rəng mərkəzləri aşkar edilmişdir. 48.5 kQr qamma şüalandırdıqdan sonra F^+ rəng mərkəzlərinin udulmasını xarakterizə edən piklərin intensivliyi artır. Qamma şüalanma dozasının artması ilə F^+ rəng mərkəzlərinin udulma spektrləri şəkil 6.3.1-də göstərildiyi kimi 145.5-dən 194 kQr-ə qədər artır. Bu artım yüksək şüalanma dozalarında daha sürətli olmuşdur. Bu təcrübədə aşağı qamma şüalanma dozalarında rəng mərkəzində F-dən F^+ -a dəyişiklik baş vermədi, çünki şüalanma bütün nümunələr üçün otaq temperaturunda aparılıb.





Şəkil 6.3.1. Qamma şüalanmanın təsiri altında bor karbid kristalında rəng mərkəzlərinin formalaşma mexanizmi.

Qeyd etmək lazımdır ki, tədqiqat üçün hazırlanan kristallar otaq temperaturunda və normal atmosfer təzyiqində şüalanmışdır. Bununla belə, kristalları müxtəlif dozalarda qamma şüalanmaya məruz qaldıqda, kristalın həcmi temperaturunda artma baş verir (hissəcik axınından asılı olaraq təxminən 370 K ilə 420 K arasında dəyişir) [17, 20-23].

Əvvəlki tədqiqatlar güclü udulma zolağına malik kristallarda təxminən 2.4-6.0 eV enerji intervalında rəng mərkəzləri əmələ gətirdiyini bildirmişdir. Təcrübələrdə F-ə bağlı mərkəzlər 210 nm ilə 460 nm arasında bir udulma zolağı aşkar olundu. Rəng mərkəzlərinin konsentrasiyası Smakul tənliyi (6.3.1) istifadə edərək hər bir absorpsiyasından ölçülmüşdür. 48.5 kQr udulma dozada şüalanmış B₄C kristalında udulma spektrlərini aydın olur ki, 266 nm udulma zolağında yeni növ defektlərin formalaşması baş verir və 266 nm-də rəng mərkəzi şüalanmamış B₄C kristalda mövcud deyil. Rəng mərkəzləri kristalda az miqdarda təxminən $1.34 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ konsentrasiyada cəmlənmişdir. Defektlərin konsentrasiyası bütün udulma spektrləri üçün hesablanmış və müəyyən edilmişdir ki, $1.01 \times 10^{21} \text{ sm}^{-3}$, $1.34 \times 10^{20} \text{ sm}^{-3}$, $9.81 \times 10^{20} \text{ sm}^{-3}$, $8.75 \times 10^{20} \text{ sm}^{-3}$ və $1.05 \times 10^{21} \text{ sm}^{-3}$ uyğun spektrlərdə 218 nm, 266 nm, 300 nm, 338 nm və 417 nm və aktivləşmə enerjisi qiyməti 1.92 eV təyin olunmuşdur. Bütün rəng mərkəzlərində defektlər təyin olunmuş enerji səviyyələri üzrə yerləşir. 97 kQr udulma dozada şüalanmış B₄C kristalının udulma spektrlərində 332-404 nm dalğa uzunluğu intervalında iki yeni rəng mərkəzinin əmələ gəlməsi aydın olmuşdur. 48.5 kQr şüalanma dozasında yalnız bir yeni rəng mərkəzi, 97 kQr şüalanma dozasında şüalandıqdan sonra dalğa uzunluğu intervalı iki bölgəyə bölünmüşdür. Yaranan yeni əlavə rəng mərkəzlərinin defekt konsentrasiyası 350 nm və 381 nm müvafiq olaraq $8.62 \times 10^{20} \text{ sm}^{-3}$ və $8.75 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ aktivləşmə enerjisi 1.98 eV bərabərdir. Digər tezliklərdə/dalğa uzunluqlarında yaranmış rəng mərkəzlərinin konsentrasiyası sabitdir və yeni enerji səviyyələrinin yaranmaması mənasında başa düşülür. 145.5 kQr udulma dozada şüalanmış B₄C kristalında udulma spektrlərində qamma şüalanma dozasının artması nümunədə defektlərin konsentrasiyasının artmasına səbəb olur. B₄C kristalında yeni rəng mərkəzləri 239-266 nm arasındakı dalğa uzunluğunda formalaşmış və $8.83 \times 10^{20} \text{ sm}^{-3}$ konsentrasiyasına malik olmuşdur. 332-404 nm intervalında dalğa uzunluğu diapazonunda artıq üç (F və F⁺) rəng mərkəzi olsa da, yaradılmış rəng mərkəzlərində defektlərin konsentrasiyası bir enerji səviyyəsində idi. Bunlar 341 nm-də $8.47 \times 10^{20} \text{ sm}^{-3}$, 358 nm-də $9.11 \times 10^{20} \text{ sm}^{-3}$ və 390 nm-də $9.02 \cdot 10^{20} \text{ sm}^{-3}$ aktivləşmə enerjisi 2.01 eV bərabərdir. 194 kQr udulma dozada şüalanmış B₄C kristalının udulma spektrlərində rəng mərkəzləri doqquz enerji səviyyəsi üzrə formalaşır. Dalğa uzunluğunun iki hissəyə bölündü (238-275 nm və 249 nm) $8.39 \times 10^{20} \text{ sm}^{-3}$ defekt

konsentrasiyası ilə rəng mərkəzləri formalaşır, 332-404 nm dalğa uzunluğu diapazonunda defekt konsentrasiyası $8.1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ - $9.59 \times 10^{20} \text{ sm}^{-3}$ qədər artaraq beş rəng mərkəzi yarandı. 48.5-194 kQr udulma dozalarında udulma spektrləri iki hissəyə bölündü. Birinci hissədə rəng mərkəzləri 220-270 nm dalğa uzunluğu intervalında, ikinci hissədə isə rəng mərkəzləri 332-404 nm dalğa uzunluğu intervalında formalaşmışdır. 145.5 kQr qamma şüalanma dozasında formalaşan, 200-270 nm dalğa uzunluğu intervalında rəng mərkəzləri iki enerji səviyyəsində paylanır. 332nm və 404 nm (enerji səviyyələri) dalğa uzunluğu intervalı üçün qamma şüalanma dozası və bir neçə hissəyə bölünən defekt konsentrasiyası asılıdır. Demək olar ki, aşağı qamma şüalanma dozasında rəng mərkəzləri müxtəlif enerji səviyyələrində 220-404 nm dalğa uzunluğu intervalında baş verir. Şəkil 6.3.1-də müxtəlif qamma şüalanma dozalarında B_4C kristallarında defektlərin aktivləşmə enerjisinin dəyişməsini göstərilmişdir. Şüalanma dozasından asılı olaraq enerji səviyyələrin paylanması və defektlərin müxtəlif enerji səviyyələrinə migrasiya aşkar olunmuşdur. Müşahidə etmək olar ki, kristallardan 48.5 kQr-dən 194 kQr-a qədər dozada şüalandıqda, rəng mərkəzləri daha yüksək enerji səviyyələrinə doğru dəyişir. Cədvəl 6.3.1-də müxtəlif qamma şüalanma dozalarında bor karbid kristalında udulma spektrlərində defektlərin konsentrasiyaları təyin olunmuşdur.

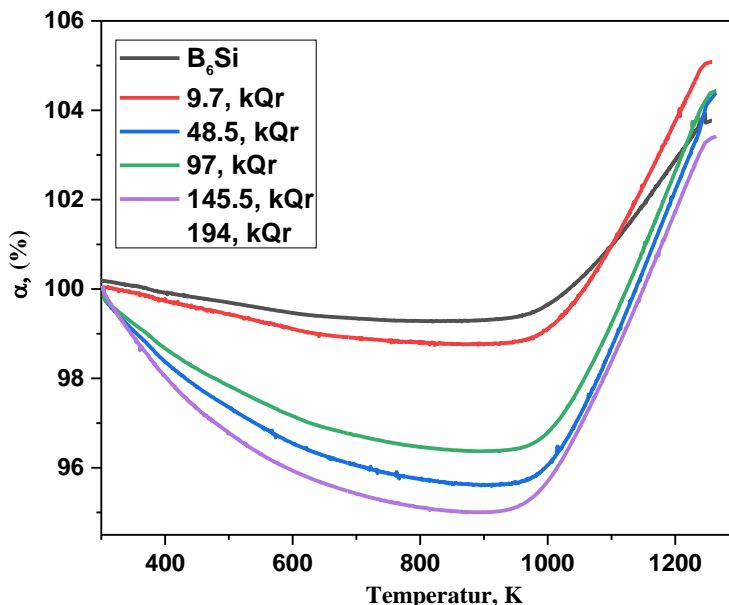
Cədvəl 1. Müxtəlif qamma şüalanma dozalarında B₄C kristalında udma spektrləri və defektlərin konsentrasiyalarında rəng mərkəzləri.

	Şüalanmamış	48.5 kQr	97 kQr	145.5 kQr	194 kQr
Tezlik (nm)	Defektlərin konsentrasiyası/sm ³				
213	$8.92 \cdot 10^{20}$	0.00	0.00	0.00	0.00
220	0.00	$1.01 \cdot 10^{21}$	sabit	sabit	sabit
249	0.00	0.00	0.00	0.00	$8.39 \cdot 10^{20}$
268	0.00	$1.34 \cdot 10^{20}$	sabit	sabit	sabit
297	0.00	$9.81 \cdot 10^{20}$	sabit	sabit	sabit
302	$1.05 \cdot 10^{21}$	0.00	0.00	0.00	0.00
340	0.00	$8.75 \cdot 10^{20}$	sabit	$8.47 \cdot 10^{20}$	sabit
350	0.00	0.00	$8.62 \cdot 10^{20}$	sabit	sabit
358	0.00	0.00	0.00	$9.11 \cdot 10^{20}$	sabit
375	$8.54 \cdot 10^{20}$	0.00	0.00	0.00	0.00
381	0.00	0.00	$8.46 \cdot 10^{20}$	sabit	sabit
390	0.00	0.00	0.00	$9.02 \cdot 10^{20}$	sabit
418	0.00	$1.05 \cdot 10^{21}$	sabit	sabit	sabit
437	$9.68 \cdot 10^{20}$	0.00	0.00	0.00	0.00

Rəng mərkəzinin konsentrasiyası Smakula tənliyi ilə hesablanmış və qamma şüalanma dozası ilə paralel artdığı müəyyən edilmişdir. Udulma spektrlərini iki dalğa uzunluğuna bölmək olar, birincisi 220 nm-dən 270 nm-ə qədər, ikincisi isə 332 nm-dən 404 nm-ə qədər dalğa uzunluğunda müçahidə olunmuşdur. Şüalanmamış kristallarda F⁻ və F⁺ rəng mərkəzləri üçün aktivləşdirmə enerjilərinin qiymətləri təyin olunmuş. Müxtəlif dozalarda qamma şüalanmasından sonra rəng mərkəzlərinin aktivləşmə enerjisi 1.89 eV-dən 2.05 eV-ə qədər artmışdır. Həmçinin qamma şüalanması nəticəsində rəng mərkəzlərinin miqrasiya mexanizmi müşahidə olunmuşdur.

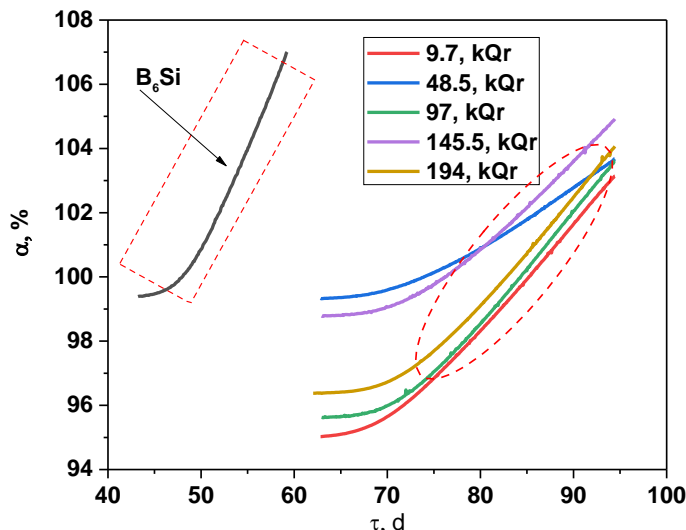
6.4 Yüksək temperaturlarda qamma kvantları ilə şüalandırılmış kristallarda oksidləşmə mexanizmi

Təcrübi tədqiqatlarda keramik materialların yüksək temperaturlarda oksidləşmə mexanizminin öyrənilməsi üçün bir sıra fiziki parametrlər xüsusi səth sahəsi, təmizlik dərəcəsi və kristalın ölçüsü vacib faktorlardan hesab olunur [91-92, 251, 256, 260, 262]. Xarici təsir amillərindən asılı olaraq, xüsusən qamma kvantlarla şüalandırılmış B₆Si kristalında oksidləşmə mexanizminin izah olunması daha mürəkkəbdir. Dəqiq ifadə olunsaydı qamma şüalarının yaratdığı oksidləşmə mexanizmi ilə yüksək temperaturlarda yaranan oksidləşmə mexanizminin cəmləşmiş şəkildədir. Cəm şəkildə oksidləşmə dərəcəsi ($\alpha_t = \alpha_\gamma + \alpha_T$, harda ki α_s – cəm oksidləşmə, α_γ – qamma şüalanmanın təsiri altında oksidləşmə və α_T – temperaturun təsiri altında oksidləşmə) kimi ifadə etmək olar. Məlumdur ki, oksidləşmə dərəcəsi $\alpha_s = \Delta W / \Delta W_{th(\infty)}$ (ΔW – temperatur və zamanında asılı kütlə dəyişməsi, $\Delta W_{th(\infty)}$ – SiB₆ kristalında B₂O₃ və SiO₂ reaksiya məhsullarının kütləsi) ifadəsi ilə təyin olunur. Lakin təcrübi tədqiqatlarda ölçüsü 40 mkm olan mikro kristallarda istifadə olduğu üçün ölçmələrdə hissəciyin ölçüsü və xüsusi səth sahəsi sabit kimi götürülür. Şəkil 6.4.1-də müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış B₆Si kristalının oksidləşmə dərəcəsinin temperatur asılılığı verilmişdir. Şəkil 6.4.1 göstərildiyi kimi SiB₆ kristalında oksidləşmə şüalanmamış və 9.7 kQr, 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr, və 194 kQr udulma dozalarında şüalandırılmış kristallar üçün uyğun olaraq T ≥ 650°C başlayır. Lakin T ≤ 650°C oblastında şüalanmanın udulma dozasından asılı olaraq kristalların kütləsində fərqli miqdarlarda parçalanmalar müşahidə olunur ki, bu da atmosfer şəraitində kristallar tərəfindən asorbsiya olunmuş su buxarlarının parçalanması ilə bağlıdır.



Şəkil 6.4.1. $650 \leq T \leq 1000^\circ\text{C}$ temperatur intervalında müxtəlif qamma şüalanma dozası ilə şüalandırılmış B_6Si kristalı üçün oksidləşmə kinetikasi.

Məhz bu səbəbdən yüksək udulma dozalarında oksidləşmə dərəcəsi kütlə spektrindəki 95% qiymətindən başlayır. Oksidləşmə dərəcəsi udulma dozasından asılılığı əsasən iki hissədən ibarətdir; Qeyri izotermal oblast $650 \leq T \leq 740^\circ\text{C}$ temperatur intervalında və izotermal $T \geq 740^\circ\text{C}$ başlayır. Oksidləşmənin kritik temperaturu kristal üçün 9.7 kQr, 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr udulma dozalarında 970°C temperaturuna uyğundur. Qeyri izotermal oblastda kiçik miqdarda oksidləşmə faizi göstərir ki, oksidləşmə mexanizmi passiv xarakterlidir. B_6Si hissəciklərinin səthində maye B_2O_3 təbəqəsinin formalaşması izotermal oblastda daha aktiv şəkildə baş verir [206]. Şüalanmamış kristalda oksidləşmə 3.5 % təşkil edirsə 194 kQr şüalandırılmış kristallarda 8.2 % bərabərdir. Təcrübi nəticələr göstərir ki, iki mexanizimli oksidləşmə prosesi baş verir. Kritik temperaturdan sonra B_6Si hissəciklərində aktiv fazada oksidləşmə prosesi tamamlanır. Oksidləşmə prosesinin kinetikasının və aktivləşmə enerjisinin təyini üçün prosesin zamandan asılılığı müxtəlif udulma dozalarında müəyyən olunmalıdır. B_6Si kristalı üçün zamandan asılı olaraq müxtəlif udulma dozalarında temperaturun artması ilə oksidləşmə dərəcəsinin asılılığı şəkil 6.4.2-də verilmişdir.



Şəkil 6.4.2. B_6Si kristalının müxtəlif qamma şüalanma dozasında $650 \leq T \leq 1000^\circ C$ temperatur intervalında oksidləşmə dərəcəsinin zamandan asılılığı.

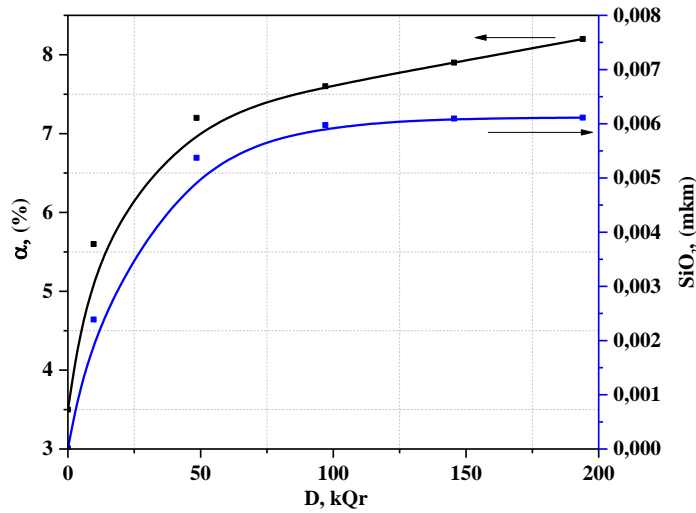
Şəkil 6.4.2-da şüalanmamış nümunədə oksidləşmə zamandan daha asılı olaraq sürətli fazada baş verir. Müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış SiB_6 birləşməsində yüksək udulma dozalarında cəmlənmiş oksidləşmə ($\alpha_\gamma + \alpha_T$) faktoru özünü daha aydın göstərir. $T \leq 650^\circ C$ qiymətlərdə bütün udulma dozalarında oksidləşmə dərəcəsinə qiymət təqribən bir-birinə bərabərdir. Həmçinin B_2O_3 ərimə temperaturunda ($T=450^\circ C$) kiçik qiymətlərdə oksidləşmə müşahidə olunmur. Çünki $450 \leq T \leq 650^\circ C$ temperatur intervalı nümunədə termik stabil oblatdır və istilik selinin sürəti nümunədə hər hansı dinamik dəyişiklik yaramır. Şüalanmadan sonra B_6Si birləşməsində $T \leq 650^\circ C$ kiçik temperaturda oksidləşməsi daha çox “qeyri izotermik oksidləmə” xarakterlidir. Lakin $T \geq 740^\circ C$ zamanın 70 dəqiqəsindən sonra udulma dozəsindən asılı olmayaraq bütün oblat üzrə xətti oksidləşmə müşahidə olunur və bu qiymət kritik həddə çatana qədər artır. Oksidləşmə dərəcəsinin temperaturdan, şüalanmanın udulma dozəsindən və zamandan asılılıqları göstərdi ki, əsas oksid təbəqəsi səth xarakterlidir. Səth xarakterli oksidləşmə proseslərində oksidləşmə dərinliyi və oksidləşmənin diffuziya sürətinin təyini və kritik həddin səviyyəsini müəyyən edir. Səthdə yaran oksidləşmə dərinliyi şüalanmanın udulma dozəsi və temperaturdan önəmli dərəcədə asılı olduğu kimi nümunənin molyar kütləsindən, kimyəvi çevrilmədən sonra yaran birləşmələrin molyar kütləsindən, hissəciyin xüsusi səth sahəsi və hissəciyin ölçüsündən asılıdır. Oksidləşmə reaksiyasında B_6Si -dən B_2O_3 və SiO_2 kimyəvi keçidləri nəzərə alsaq

səthdə yaranan oksid dərinliyini və hər bir udulma dozası üçün yaranan oksid dərinliyi (6.4.1) tənliyi ilə hesablamaq olar.

$$OTQ \text{ (mkm)} = \left(\frac{\Delta W\%}{100S} \right) \times \left(\frac{M_{B_6Si}}{2(M_{B_2O_3} + M_{SiO_2}) - M_{B_6Si}} \right) \times \left(\frac{D_i}{d} \right) \quad (6.4.1)$$

ΔW - B_6Si kütləsi (%), S - B_6Si nümunənin səth sahəsi ($61.73, m^2/g$), M_{B_6Si} nümunənin molyar kütləsi (92.95), $M_{B_2O_3}$ molyar kütləsi (69.59), M_{SiO_2} molyar kütləsi (60.09), D - ^{60}Co mənbəyin doza sürəti (0.27 Qr/san) və d -sıxlığı B_6Si (2.43 g/sm^3).

Şəkil 6.4.3-də oksidləşmə dərəcəsi və oksidləşmə dərinliyinin şüalanmanın udulma dozasından asılılığı verilmişdir.



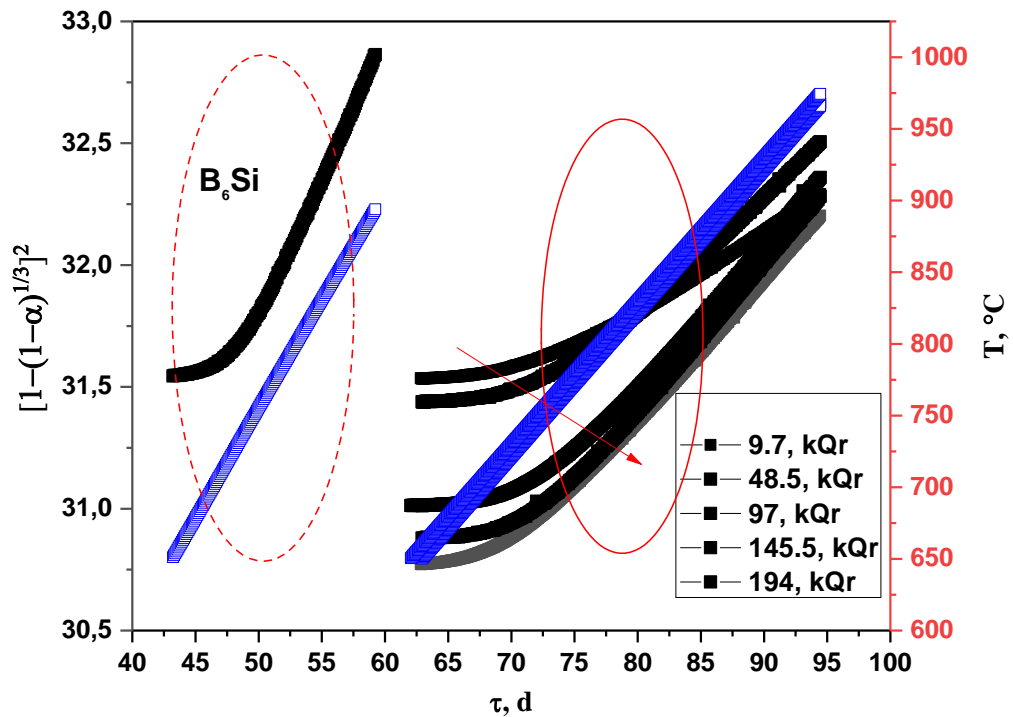
Şəkil 6.4.3. $650 \leq T \leq 1000^\circ C$ temperatur intervalında oksidləşmə dərəcəsi və oksidləşmə dərinliyi ilə qamma şüalanma dozasının əlaqəsi.

Gözləndiyi kimi oksidləşmə dərəcəsi və oksidləşmə dərinliyinin şüalanmanın udulma dozasından və temperaturdan asılı olaraq $\alpha_\gamma + \alpha_T$ ikili mexanizm üzrə baş verir. Süalanmanın 97 kQr udulma dozasından sonra həm oksidləşmə dərəcəsinə həm də səthdə yaranan oksid təbəqəsində stabil oblast başlayır. Bu asılılıq deməyə əsas verir ki, B_6Si birləşməsi üçün 97 kQr oksid təbəqəsi və oksidləşmə dərəcəsi üçün kritik həddir. Lakin şüalanmamış fərqli materiallarda “kritik hədd” faktor özünü müxtlif qiymət və dərinliklərdə saxlayır. Həmçinin xüsusi səth sahəsinin oksidləşmə dərəcəsinə önəmli dərəcədə əhəmiyyətli faktor olması və maddənin kimyəvi cəhətdən təmizlik dərəcəsinin yüksək olması oksidləşmə amilinə ciddi

təsir göstərir. Oksidləşmə prosesində xətilik və stabil oblast müşahidə olunduğu kimi, həmin prosesin kinetikasi səthdə baş verən kimyəvi reaksiyanın mexanizmi ilə izah olunur. Bir çox hallarda səthdə baş verən oksidləşmə təbəqəsinin mexanizmi müxtəlif qanuna uyğunluqlarla baş verir. Fiziki-kimyəvi proseslərdə kinetikanın izah olunmasında k -diffuziya sürəti əmsalından istifadə olunmaqla prosesin kinetikasi qurulur. B_6Si birləşməsi üçün $650 \leq T \leq 1000^\circ C$ temperatur intervalında oksidləşmə kinetikasi (6.4.2) Jander tənliyindən istifadə olunmaqla qurulmuşdur.

$$\left[1 - (1 - \alpha)^{\frac{1}{3}}\right]^2 = kt \quad (6.4.2)$$

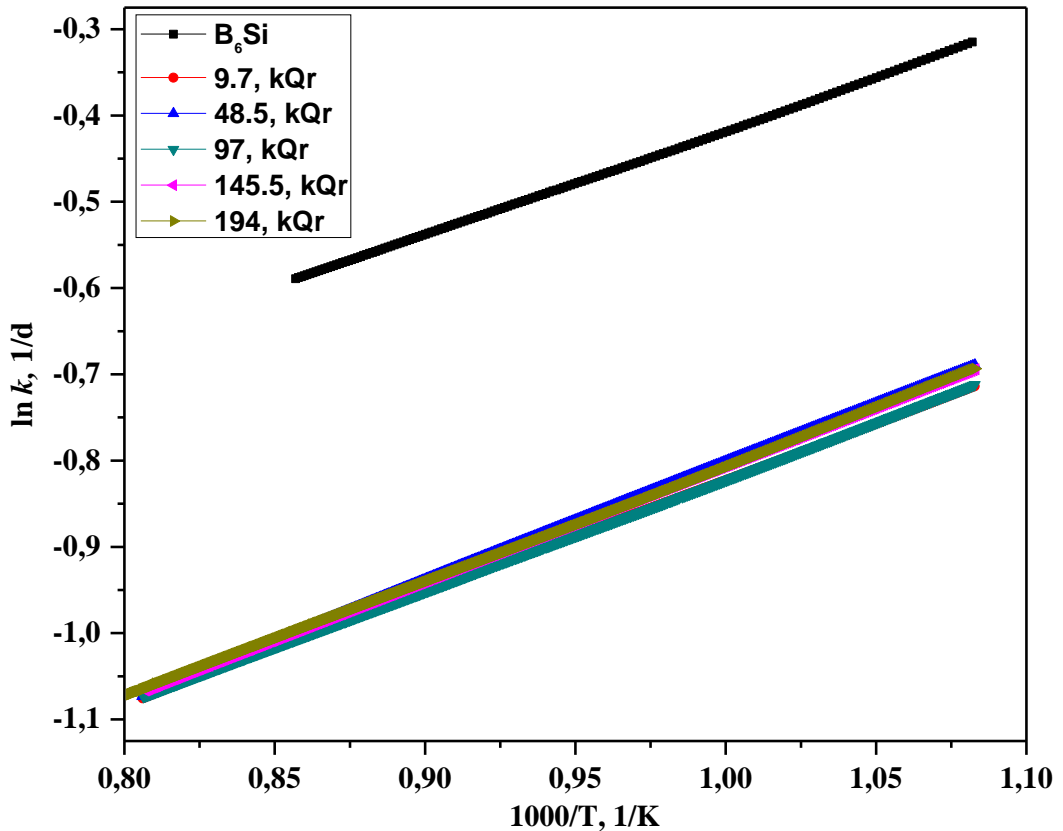
Burada α -oksidləşmə dərəcəsi, k -diffuziya sürətinin əmsalı and t -reaksiya müddəti. Şəkil 6.4.4 müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış B_6Si birləşməsi üçün zamandan və temperaturdan asılı olaraq Jander əyriləri qurulmuşdur.



Şəkil 6.4.4. $650 \leq T \leq 1000^\circ C$ temperatur intervalında müxtəlif qamma şüalanma dozalarında Jander əyriləri

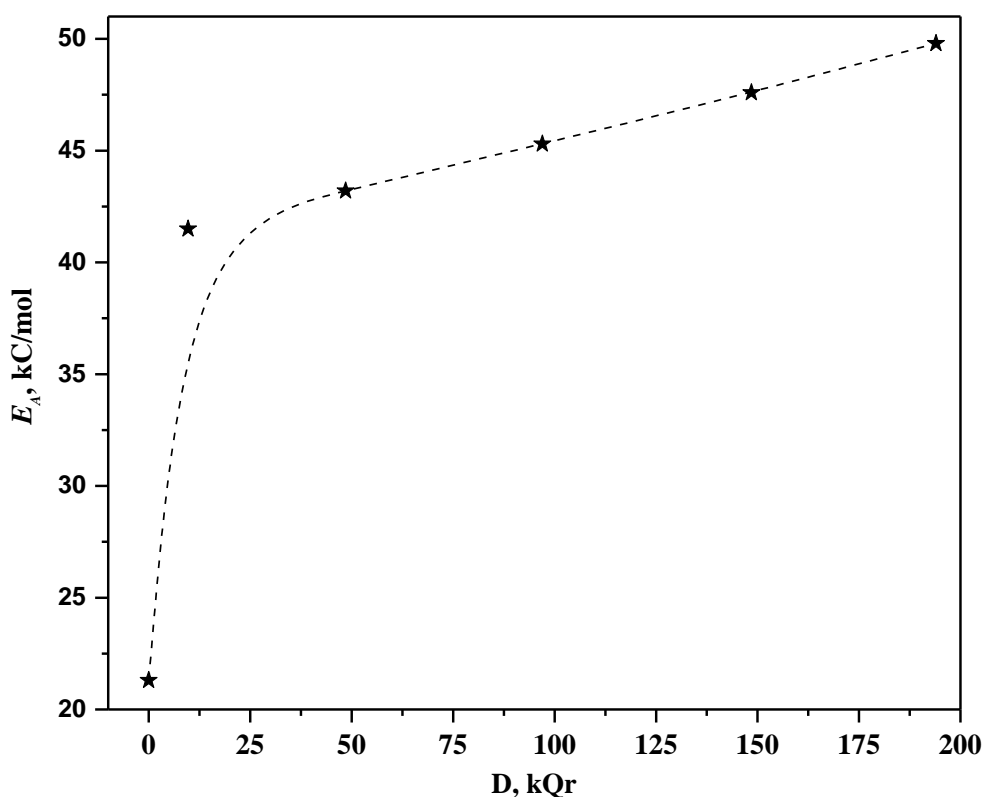
Göründüyü kimi müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış B_6Si birləşməsi üçün $650 \leq T \leq 1000^\circ C$ temperatur intervalında Jander əyriləri iki hissəyə bölünür. Zamandan asılı olaraq temperaturun $740^\circ C$ qeyri-xətti hissədə zəif diffuziyanın yəni passiv oksidləşmənin,

xətti hissə isə oksidləşmə diffuziyasının aktiv fazada baş verdiyini xarakterizə edir. Yüksək udulma dozalarında və temperaturlarda oksidləşmə diffuziyasının daha böyük qiymət alması müəyyən olunmuşdur. Əlavə olaraq oksidləşmə reaksiyasında kütlənin artması ilə paralel B_2O_3 və BO_2 buxarlanma reaksiyası baş verir. Lakin buxarlanma reaksiyasının sürəti oksidləşmə reaksiyasının sürətindən zəyif olduğu üçün qamma şüalanmanın yüksək udulma dozalarında ayrılər daha böyük ədədi qiymətə malik olur. SiO_2 buxarlanma reaksiyası $2230^\circ C$ olduğu üçün SiO_2 yalnız oksidləşmənin diffuziya sürətinin artmasına səbəb olur. Daha dəqiq ifadə etsək $B_2O_3+SiO_2$ oksidləşmə reaksiyası B_2O_3 və BO_2 buxarlanma reaksiyasından daha böyük sürətlə baş verir. Şəkil 6.4.5-də şüalanmamış və müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış B_6Si birləşməsində yaranan oksid təbəqəsi üçün Arrhenius ayriləri verilmişdir. Bunun üçün oksidləşmənin diffuziya sürətinin $\ln k$ logorifmik qiymətinin temperaturun əks qiymətindən $1000/T$ asılılığı qurulmuşdur.



Şəkil 6.4.5. $650 \leq T \leq 1000^\circ C$ temperatur intervalında müxtəlif qamma şüalanma dozalarında Arrhenius ayriləri

Müəyyən olunmuşdur ki, şüalanmamış nümunə üçün 21.3 kC/mol və 9.7 kQr, 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr udulma dozaları üçün uyğun olaraq 41.5 kC/mol, 43.2 kC/mol, 45.3 kC/mol, 47.6 kC/mol, and 49.8 kC/mol qiymətlərini alır. Alınmış qiymətlərdən şüalanmamış B_6Si üçün alınan standart qiymətlərin nəticələrinə yaxındır. Aktivləşmə enerjisinin qiymətində baş verən dəyişmələr göstərir ki, müxtəlif zamanlarda şüalandırılmış B_6Si birləşməsi yüksək temperaturlarda oksidləşərək təmizlik dərəcəsini müəyyən qədər itirir. Şəkil 6.4.6-da aktivləşmə enerjisinin şüalanmanın udulma dozəsindən asılılığı bir daha yuxarıda qeyd olunan eksperimental nəticələri təsdiq edir.

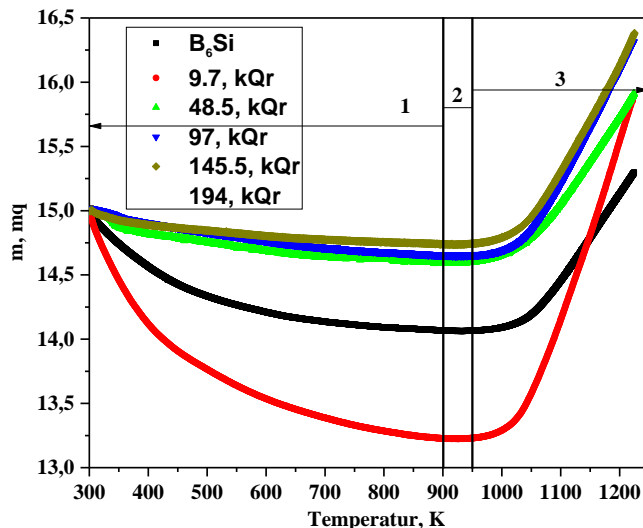


Şəkil 6.4.5. 650-1000°C temperatur intervalında müxtəlif qamma udulma dozasının aktivləşmə enerjisindən asılılığı.

B_4C birləşməsinin müxtəlif qamma şüalanma dozası ilə şüalandırıldıqdan sonra kütlə kinetikasını xarakterizə edən əyriləri Şəkil 6.4.6-də göstərilmişdir. TG əyrilərində otaq temperaturundan nümunələr 1230 K-ə qədər qızdırılaraq əldə olunmuşdur (qızdırma sürəti 5 K/dəq və ölçmə çəkisi 13,5 mq). Şüalanma B_4C nümunələrinin kütlə əyriləri müvafiq olaraq üç bölgəyə bölünür.

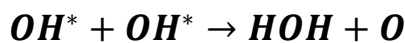
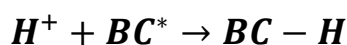
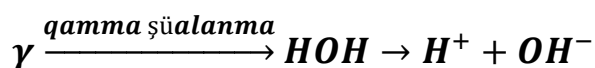
❖ $300 \leq T \leq 900$ K azalan oblast

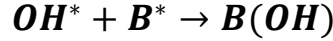
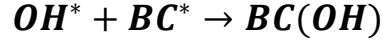
- ❖ $900 \leq T \leq 950$ K sabit oblast
- ❖ $950 \leq T \leq 1250$ K artan oblast (oksidləşmə reaksiyası)



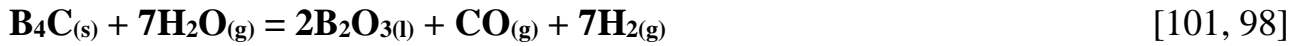
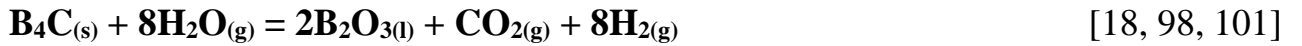
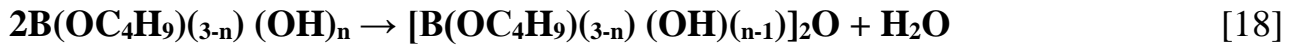
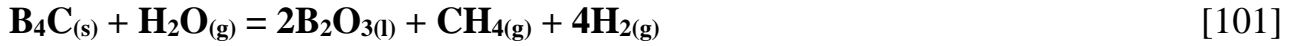
Şəkil 6.4.6. B_4C birləşməsinin müxtəlif qamma şüalanma dozası ilə şüalandırıldıqdan sonra kütlə əyriləri

Şəkil 6.4.6-də aydın şəkildə göstərilir ki, B_4C nümunələrində qamma şüalanmasından sonra su buxarı ilə qarşılıqlı təsir sürəti artır və birləşmələrin absorpsiya xassələri artır. Lakin $300 \leq T \leq 900$ K temperatur diapazonlarında su buxarları və solvotermal kimyəvi reaksiya ilə qarşılıqlı əlaqə haqqında məlumat verilir. Bundan əlavə, qamma şüalarının təsiri altında fiziki və kimyəvi proseslərin solvotermal kimyəvi reaksiyası mürəkkəbləşir. Digər tərəfdən, adsorpsiya edilmiş su molekulları mürəkkəb qamma şüalanma mexanizmi əsasında parçalanır. Yaranan hidrogen atomları və (OH) hidroksid qrupları struktur defektləri, həyəcanlanmış B atomları, sərbəst karbon, həyəcanlanmış karbon atomları və aktiv mərkəzlər tərəfindən tutulur. O, həmçinin molekulyar hidrogenləşməyə səbəb olur. Hidrogen atomları üçün sxematik olaraq aşağıdakı kimi təsvir edilə bilər.



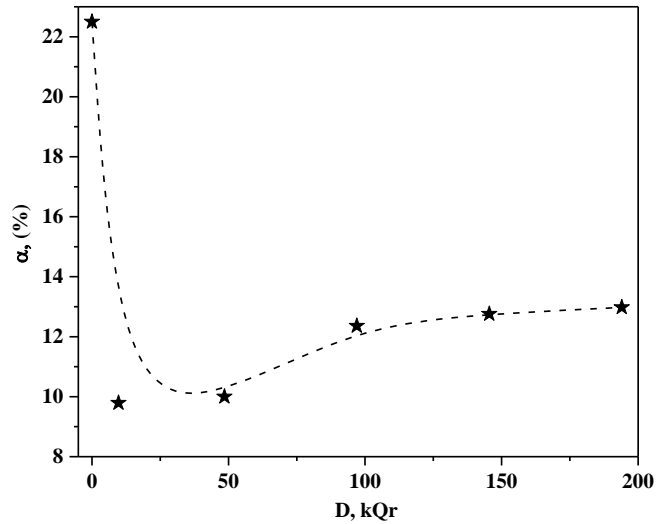
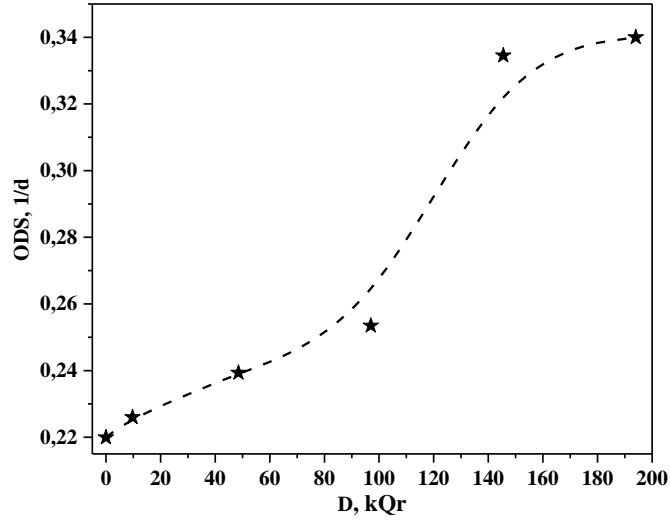


Yuxarıda qeyd olunan sxematik keçidlərə bəzi eksperimental təcrübələrdə rast gəlmək olar. Atmosfer şəraiti toz halında olan B₄C nümunələrinin su buxarları ilə müxtəlif kimyəvi qarşılıqlı reaksiyaları mövcuddur [163, 301].



[98] tədqiqat işində nümunələrə ötürülən enerji təsiri nəticəsində mümkün reaksiya məhsulları və onların əmələ gəlmə aktivliyi (fiziki və kimyəvi reaksiyalar baxımından) ifadə olunmuşdur. Şəkil 6.5.6-da göstərildiyi kimi 300-900 K temperatur intervalında qamma şüalanma nəticəsində kütlə itkisi mövcuddur. Mexanizm olaraq B₄C hissəciklərinin səthində qamma şüalanması müəyyən bir dərinliyə malik səth xarakterli amorflaşma yaradır və amorf səth su buxarı ilə daha çox qarşılıqlı əlaqə reaksiyası yaradır. B₄C nümunəsində qamma şüalanma bərk B₂O₃ oksid təbəqəsinə və sərbəst C(s), həmçinin CH_{4(g)}, CO_{2(g)}, CO_(g), H_{2(g)} və (OH)_n formada qaz əmələ gəlməsinə səbəb olur. Aydınır ki, bərk fazanın (B₂O₃ və C_(s)) əmələ gəlmə sürəti parçalanma məhsullarının əmələ gəlmə sürəti (CH_{4(g)}, CO_{2(g)}, CO_(g), H_{2(g)} and (OH)_n) çox kiçikdir. Həmçinin, 900-950 K temperatur intervalında sabit oblast, udulmuş suyun tam parçalanması və kristal strukturunda defekt mərkəzlərin tam rekombinasiyası hissələrinə bölünməsi göstərilmişdir. Şüalanmamış nümunədə oksidləşmə 22.50 % bərabərdir. Lakin qamma udulma dozasının artması ilə oksidləşmə dərəcəsi azalır, oksidləşmə dərəcəsi maksimum 12.76 % uyğundur.

Şüalanmamış nümunələrdə $950 \leq T \leq 1250$ K temperatur intervalında oksidləşmə dərəcəsi 22.50 % qədər artır. B_4C birləşməsində ədəbiyyatdan da verildiyi kimi oksidləşmə kinetikasi ölçü və təmizlik dərəcəsindən ciddi şəkildə asılıdır. Tədqiq olunan nümunələrdə təmizlik dərəcəsi yüksək 99.5 % olduğundan şüalanmamış nümunədə oksidləşmə kinetikasi daha çox ölçü faktorundan ciddi şəkildə asılıdır. Ölçü faktoru hesabına baş verən oksidləşmə mexanizmi xüsusui səth sahəsi ilə bağlıdır. Xüsusi səth sahəsi böyük olan materialların aktiv səthləri oksigen atomları ilə qeyri izotermal oksidləşmə reaksiyasına daxil olur. Lakin $950 \leq T \leq 1200$ K temperatur intervalından B_4C birləşməsində baş verirən oksidləşmə reaksiyası şüalanmanın 145.5 kQr udulma dozasında azalır. Şüalanmış nümunələrin amorflaşmış quruluş strukturuna keçidi nəzərə alsaq, amorflaşmış quruluşun oksidləşmə kinetikasi təmiz nümunələrlə müqayisədə daha zəyif olduğu məlumdur. 145.5 kQr udulma dozası intervalında oksidləşmə dərəcəsi 3.96 % artır və udulma dozasından başlayaraq oksidləşmə dərəcəsi zəyif sürətlədir. Qamma şüalanmanın udulma dozasından asılı olaraq oksidləşmə dərəcəsinin artması şüalanmanın təsirindən yaranmış aktiv mərkəzlərin oksigen atomları ilə tutulması və səth xarakterli oksidləşmə reaksiyasına daxil olmasıdır. Oksidləşmə dərəcəsinin stabil oblasta yaxınlaşması artıq aktiv mərkəzlərin oksigen atomları ilə tam tutulmuş hissəsidir. Oksidləşmə prosesinin kinetikasi və aktivləşmə enerjisinin təyini üçün oksidləşmə reaksiyasının zamandan asılılığı müxtəlif udulma dozalarında müəyyən olunmuşdur. B_4C birləşməsi üçün zamandan asılı olaraq müxtəlif udulma dozalarında $950 \leq T \leq 1200$ K temperatur intervalından TG spektrləri şəkil 6.4.7-də verilmişdir.



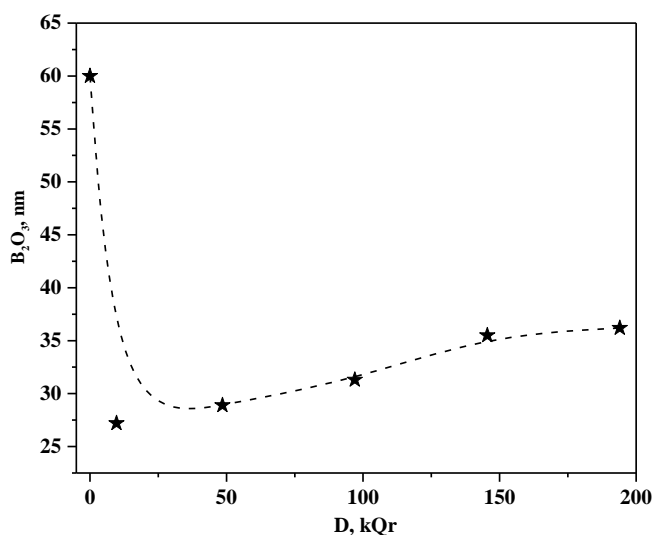
Şəkil 6.4.7. $950 \leq T \leq 1250$ K temperatur intervalında müxtəlif qamma şüalanma dozalarında B_4C birləşməsinin oksidləşmə kinetikası

Şəkil 6.4.7-dən görüldüyü kimi şüalanmamış B_4C nümunəsinin kütlə spektrinin zamandan asılı olaraq oksidləşməsi daha böyük zaman intervalında baş verir. Lakin, müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış B_4C nümunələrində daha zəif sürətli olması aydın seçilməkdədir. Yüksək udulma dozalarında oksidləşmə kinetikasının azalması məlum aktiv mərkəzlərin oksigen atomları ilə tam tutulmasıdır. Şüalanmadan sonra B_4C birləşməsində oksidləşməsi daha çox “qeyri-izotermal oksidləşmə” xarakterlidir [132] və zamanın 118 min dəqiqəsindən sonra bütün udulma dozısından asılı olmayaraq oksidləşmə

reaksiyası tamamlanır. Oksidləşmə kinetikasının temperaturdan, şüalanmanın udulma dozasından və zamandan asılılıqlarından alınan qiymətlər göstərir ki, əsas oksid təbəqəsi səth xarakterlidir. Səth xarakterli oksidləşmə proseslərində əsasən, B_4C hissəciklərinin səthində yaranan oksid təbəqəsinin dərinliyi və oksidləşmənin diffuziya sürətini müəyyən etmək mümkündür. Səthdə yaranan oksid təbəqəsinin dərinliyi şüalanmanın udulma dozası və temperaturdan önəmli dərəcədə asılıdır. Oksidləşmə reaksiyasında oksid təbəqəsinin dərinliyi kimyəvi çevrilmədən sonra yaranan birləşmələrin molyar kütləsindən, hissəciyin xüsusi səth sahəsi və hissəciyin ölçüsündən asılıdır. Oksidləşmə reaksiyasında B_4C -dən B_2O_3 kimyəvi çevrilmə reaksiyası baş verir. Səthdə yaranan B_2O_3 oksid təbəqəsinin dərinliyini və hər bir udulma dozası üçün (6.4.1) tənliyi ilə hesablamaq olar.

$$OTQ (mkm) = \left(\frac{\Delta W\%}{100S} \right) \times \left(\frac{M_{B_4C}}{2M_{B_2O_3} - M_{B_4C}} \right) \times \left(\frac{D_i}{d} \right) \quad (6.4.3)$$

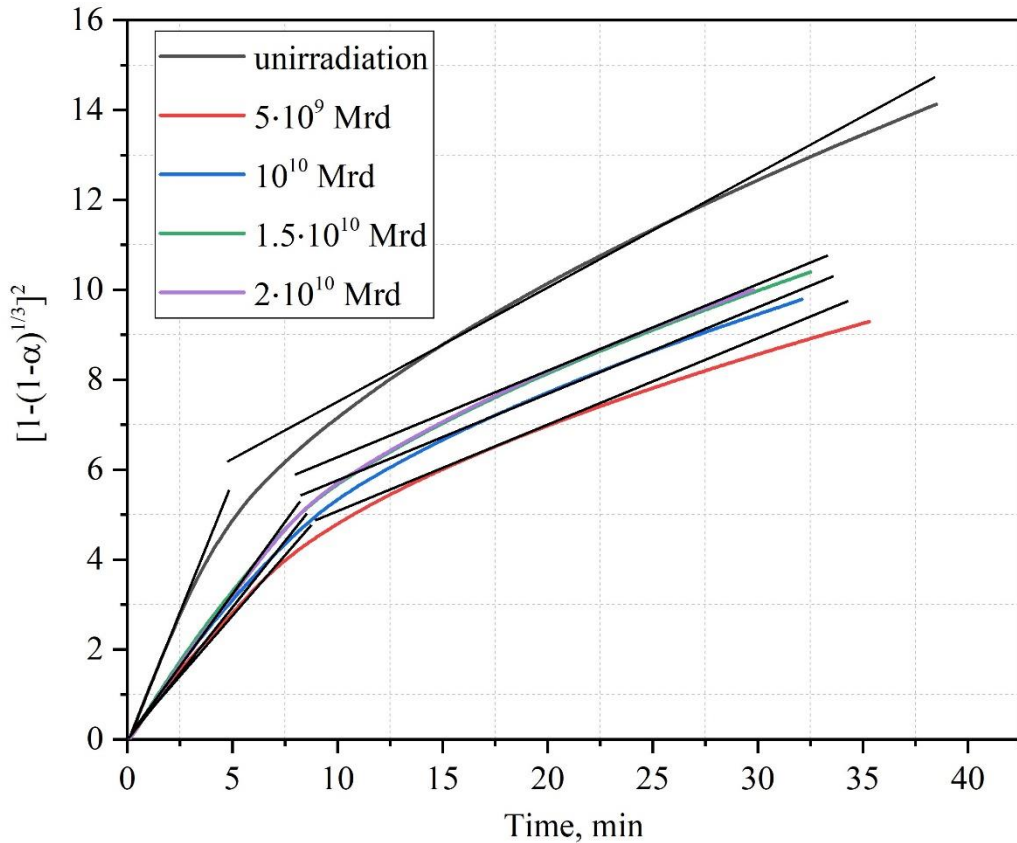
Gözlənilirdiyi kimi B_2O_3 oksid təbəqəsinin dərinliyinin şüalanmanın udulma dozasından asılı olaraq ikili mexanizm üzrə baş verir (şəkil 6.4.8). Şüalanmamış bor karbid nümunəsində B_2O_3 oksid təbəqəsinin dərinliyi 60 nm ətrafında dəyişir. Lakin numunələr şüalanmanın udulma dozasından asılı olaraq oksid təbəqəsinin dərinliyi azalır və udulma dozasının artması ilə artır.



Şəkil 6.4.8 $950 \leq T \leq 1250$ K temperatur intervalında müxtəlif qamma şüalanma dozalarında B_4C oksidləşmə dərinliyi

Səthdə yaran oksidləşmə dərinliyi şüalanmanın udulma dozası və temperaturdan önəmli dərəcədə asılı olduğu kimi nümunənin molyar kütləsindən, kimyəvi çevrilmədən sonra yaran birləşmələrin molyar kütləsindən, hissəciyin xüsusi səth sahəsi və hissəciyin ölçüsündən asılıdır. Oksidləşmə reaksiyasında B_6Si -dən B_2O_3 və SiO_2 kimyəvi keçidləri nəzərə alsaq səthdə yaranan oksid dərinliyini və hər bir udulma dozası üçün yaranan oksid dərinliyi (6.4.1) tənliyi ilə hesablamaq olar. Hər iki mexanizmin kinetikasi oksidləşmə dərəcəsinin şüalanmanın udulma dozasından asılılığında özünü doğruldur. Oksidləşmə prosesinin kinetikasi səthdə baş verən kimyəvi reaksiyanın mexanizmi ilə izah olunur və reaksiyanın kinetikasi k - oksidləşmənin diffuziya sürətindən asılıdır. B_4C birləşməsi üçün $950 \leq T \leq 1250$ K temperatur intervalında oksidləşmə kinetikasi (6.4.4) ifadəsindən istifadə olunmaqla qurulmuşdur (şəkil 6.4.9).

$$\left[1 - (1 - \alpha)^{\frac{1}{3}}\right]^2 = kt \quad (6.4.4)$$



Şəkil 6.4.9. $950 \leq T \leq 1250$ K temperatur intervalında müxtəlif qamma şüalanma dozalarında B_4C Jander əyriləri

Göründüyü kimi müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış bor karbid birləşməsi üçün 950-1200 K temperatur intervalında oksidləşmənin diffuziya sürəti iki hissəyə bölünür. Ümumilikdə 40 dəq davam edən oksidləşmə reaksiyası ilk 10 dəq qədər zəif, sonrakı hissə isə oksidləşmənin böyük diffuziya sürəti ilə baş verdiyi aşkar görülməkdədir. Yüksək udulma dozalarında və temperaturlarda oksidləşmə diffuziyasının daha böyük qiymət alması bütün eksperimental tədqiqatlarla ardıcıl əlaqəli müəyyən olunmuşdur. Əlavə olaraq oksidləşmə reaksiyasında B_2O_3 oksid təbəqəsindən əlavə paralel BO_2 qazın alınması ilə buxarlanma reaksiyası baş verir. Lakin buxarlanma reaksiyasının sürəti oksidləşmə reaksiyasının sürətindən zəif olduğu üçün gamma şüalanmanın yüksək udulma dozalarında əyriyə daha böyük ədədi qiymətə malik olur. Müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış B_4C birləşməsində baş verən oksidləşmə reaksiyası üçün aktivləşmə enerjisinin qiyməti hesablanmışdır. Məlumdur ki, oksidləşmə reaksiyasında temperatur üstün faktordur. Qamma şüalanma və amorflaşmış quruluş strukturu oksidləşmə mexanizminə ciddi təsir edir. Bütün bunları ayrı ayrılıqda nəzərə alsaq kimyəvi reaksiyanın umumi aktivləşmə enerjisinin riyazi ifadəsi (6.4.5) ifadəsi şəkilində olacaqdır. Bunun üçün oksidləşmənin diffuziya sürətinin $\ln k$ logarifmik qiymətinin temperaturun əks qiymətindən $1000/T$ asılılığı şəkil 6.4.10 verilmişdir .

$$\left[\ln \left(\frac{d\alpha}{dt} \right) \right]_T + \left[\ln \left(\frac{d\alpha}{dt} \right) \right]_\gamma + \left[\ln \left(\frac{d\alpha}{dt} \right) \right]_{Amorf} = -A \cdot \left[\frac{E_\alpha + E_\gamma + E_{Amorf}}{RT} \right] \quad (6.4.5)$$

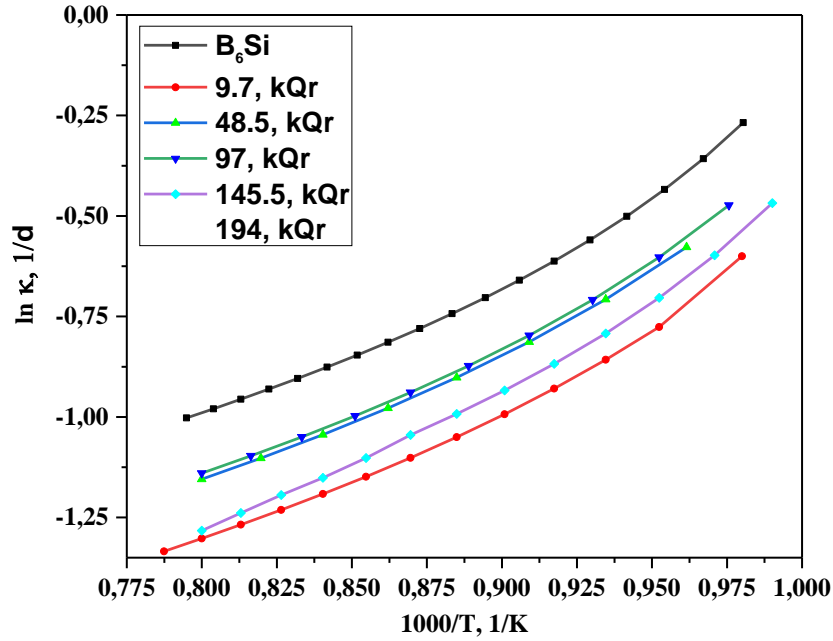


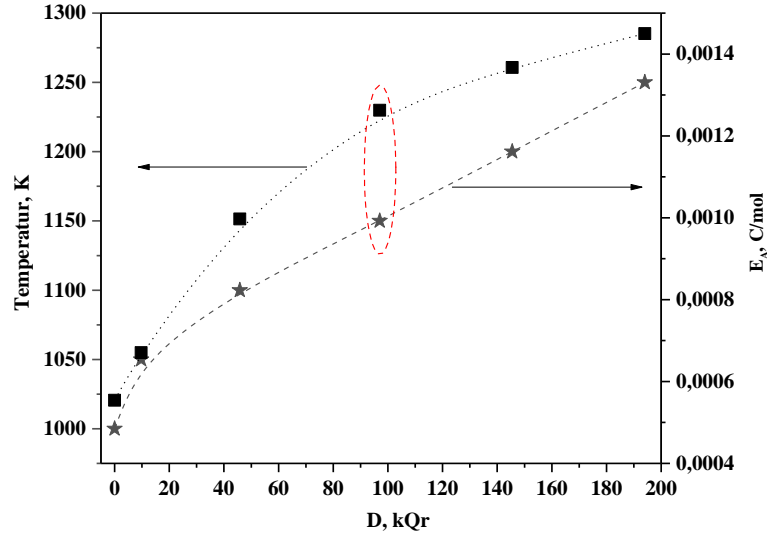
Figure 6.4.10. Müxtəlif qamma udulma dozalarında bor karbid nümunələrinin Arrhenius əyriləri

Müəyyən olunmuşdur ki, şüalanmamış nümunə üçün $97.70 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}$ və $5\cdot 10^9$; 10^{10} ; $1.5\cdot 10^{10}$ və $2\cdot 10^{10}$ Mrd udulma dozaları üçün uyğun olaraq $102.93 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $100.59 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $100.05 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, and $99.59 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ qiymətlərini alır. Birincisli nümunənin təmizlik dərəcəsinin aktivləşmə enerjisinin təyin olunan qiyməti üçün vacib faktor olduğunu nəzərə almaq lazımdır. Müxtəlif udulma dozalarında aktivləşmə enerjisi üçün alınmış qiymətlərində baş verən dəyişmələr göstərir ki, (6.4.6) ifadəsində qamma şüalanma və amorflaşma mexanizmi də aktivləşmə enerjisinin qiymətinə təsir edir. Həm qamma şüalanmanın udulma dozası həm də amorflaşma hesabına ümumilikdə aktivləşmə enerjisinin payı $5\cdot 10^9$; 10^{10} ; $1.5\cdot 10^{10}$ and $2\cdot 10^{10}$ Mrd udulma dozaları üçün uyğun olaraq $5.22 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $2.86 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $2.35 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, and $1.89 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ qiymətlərini alır.

Şəkil 6.4.11 da aktivləşmə enerjisinin şüalanmanın udulma dozasından asılılığı bir daha yuxarıda qeyd olunan eksperimental nəticələrini təsdiq edir. Müxtəlif udulma dozalarında yerinə yetirilmiş hər eksperiment üçün oksidləşmə dərəcəsi ilə aktivləşmə enerjisi arasında əlaqəni aşağıdakı ifadə ilə yazmaq olar.

$$\left[\ln \left(\frac{dD_i}{dT_\alpha} \right) \right]_i = -A \cdot \left[\frac{E_T + E_\gamma + E_{Amorf}}{RT} \right] \quad (6.4.6)$$

Burada D_i - ^{60}Co qamma mənbəyinin udulma dozası (30 rad/san), T_α - oksidləşmə temperaturu, E_T - temperaturu aktivasiya enerjisi, E_γ - qamma mənbəyinin aktivasiya enerjisi və E_{Amorf} - amorflaşmanın aktivasiya enerjisidir.



Şəkil 6.4.11 Müxtəlif qamma udulma dozalarında bor karbid nümunələrinin aktivləşmə enerjisi

Şəkil 6.4.11-də görüldüyü kimi temperaturdan asılı olaraq aktivləşmə enerjisinin dəyişmə kinetikasi şüalanmanın udulma dozasından asılı olaraq dəyişməsi göstərir ki, şüalanmanın udulma dozasının artması ilə aktivləşmə enerjisinin qiyməti artır. Yüksək udulma dozalarında yuxarıda sadalanan bütün parametrlərdə görüldüyü kimi figur 7 də yaxın qiymətlər bir-birinə yaxındır. Oksid təbəqəsinin üçün təyin olunmuş dərinlik qiymətindən aydın görüldüyü kimi yüksək udulma dozalarında aktiv mərkəzlər tərəfindən oksigen atomlarında tam tutulması və yaranmış oksidləmə reaksiyasının tamamlanmasıdır. Mürəkkəb mexanizim ilə baş verən oksidləşmə reaksiyasında yaranan oksid təbəqəsi üçün təyin olunmuş aktivləşmə enerjisinin qiyməti udulma dozasından sonra alınan maksimum qiymətləri bir birinə yaxındır. Yüksək təmizlik dərəcəsinə malik boron carbide birləşməsinin temperatur və gamma şüalanmanın təsiri altında oksidləşmə kinetikasının mexanizmi ətraflı tədqiq olunmuşdur. TG analizlərindən müəyyən olunmuşdur ki, toz şəkilli

bor karbid nümunələrində aparılan tədqiqatlar göstərdi ki, temperatur intervalından asılı olaraq kütlə kinetikasi fərqli mexanizimlərdə dəyişir. Həmçinin bor karbid birləşməsində hidooksid qrupunun gamma şüalanmanın təsiri altında parçalanması da öz əksini tapmışdır. Şüalanmanın udulma dozəsindən asılı olaraq yüksək təmizlik dərəcəsinə malik bor karbid birləşmələrində oksidləşmə dərəcəsi yüksək udulma dozalarında stabilləşir. Yüksək temperaturlarda isə qeyri-izotermik oksidləşmə nəticəsində yaranan oksid təbəqəsinin qalınlığı şüalanmanın udulma dozəsindən asılı olaraq artır. Həmçinin zamandan asılı olaraq qurulmuş kinetikada diffuziya sürətinin dəyişməsi və hər bir udulma dozəsindən sonra yaranan oksid təbəqəsinin aktivləşmə enerjisinin qiyməti təyin olunmuşdur.

6.5 Termofiziki xassələrin qamma şüaların təsiri ilə dəyişməsi

Bərk cisimlərdə termodinamik parametirlərin təyini üçün dəqiq istilik sel funksiyasının və xüsusi istilik tutumunun hesablanmasından başlayır. Xüsusi istilik tutumu maddənin enerji xarakterli struktur funksiyası olub, kristal təşkil edən atomların daxili sərbəstlik dərəcəsinə xarakterizə edir. B_4C birləşməsinin $30^\circ C$ temperaturda daxili istilik tutumu hesabına sərbəstlik dərəcəsinin sayı $950^\circ C$ qədər qızdırılmış halındakı sərbəstlik dərəcəsiyə çoxdur. Rentgen struktur analizdən məlum olduğu kimi qamma kvantları hesabına baş verən amorflaşma və yaranan radikalların sərbəstlik dərəcəsi bor-karbidin ilkin haldakından daha da böyükdür. Kristalın xüsusi istilik tutumu additiv kəmiyyət olub müxtəlif alt proseslərdə iştirak edən qəfəsdəki atomların istilik tutumunun cəminə bərabərdir.

$$C_p = C_p(\text{faza keçidi}) + C_p(\text{hərəkət}) + C_p(\text{elektron}) \quad (6.5.1)$$

Xüsusi halda doza gücü $D=0.27 \text{ Gy/saniyə}$ olan Co^{60} radioizotopu ilə şüalanmış B_4C birləşməsinin xüsusi istilik tutumu alt qruplardan əlavə qamma kvantlarının nümunədə yaratdığı aktiv mərkəzlər, radikalların xətti və qeyri-xətti istilik tutumlarının cəmi şəklində ifadə etmək olar.

Xətti hallarda,

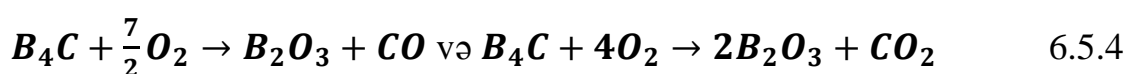
$$C_p = \frac{7}{2}R + C_p(\text{hərəkət}) + C_p(\text{elektron}) + C_p(\text{radiakal}) + C_p(\text{aktiv mər.}) \quad 6.5.2$$

Qeyri-xətti hallarda,

$$C_p = \frac{8}{2}R + C_p(\text{hərəkət}) + C_p(\text{elektron}) + C_p(\text{radiakal}) + C_p(\text{aktiv mərk.}) \quad 6.5.3$$

riyazi şəkildə olmalıdır. Şəkil 6.5.1-də B_4C (ilkin) və müxtəlif udulma dozalarında şüalandırmadan sonra xüsusi istilik tutumunun temperaturdan asılılığı verilmişdir.

B_4C birləşməsinin xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığı iki hissədən 30-420 °C və 450-950 °C intervallarında geniş yayılmış effektlərlə müşahidə olunur. Birinci oblast mərkəzi pikin maksimum hündürlüyü 210 °C olan və 420 °C tamamlanan effektdir. Kütlə spektrindən aydın olunmuşdur ki, verilmiş temperatur intervalında B_4C (ilkin) 2%, 9.7-194 kGy şüalandırdıqda isə nümunənin kütləsində 8% azalma müşahidə olunur. Bu azalmada üstün pay qamma kvantların hesabına nümunədə yaranmış defektlərin rekombinasiyası ilə izah olunur. Qamma kvantların B_4C birləşməsində yaratdığı aktiv mərkəzlər (S^*) və radikallar (e^- , $\cdot B$, $\cdot C$ və e^+) temperaturun artması ilə rekombinasiya olunur. Lakin bütün hesablamalarda $C_p(\text{elektron})$, $C_p(\text{aktiv mərkəzlər})$ və $C_p(\text{radikal})$ xüsusi istilik tutumuna baxılmaz və riyazi təyini mürəkkəb proses olduğundan baxılmaz. Ancaq vibrasiya hesabına nümunənin xüsusi istilik tutumu 700°C qədər baxılır. Temperaturdan asılı olaraq rekombinasiya olunmuş defektlərin faizlə nisbəti entropiyanın qiymətindən ilə təyin olunmuşdur. 30-420°C temperatur intervalında daxili enerjini dəyişməsi isə entalpiyanın qiyməti ilə hesablanmışdır. Entalpiya sistemin hal funksiyası olub sistemin daxili enerjisinin dəyişməsinə xarakterizə edir. Xüsusi istilik tutumunun məlum qiymətlərində riyazi yaxınlaşmadan istifadə edərək entalpiyanın dəyişməsinə hesablamaq olar [19]. Müəyyən olunmuşdur ki, 30-420°C temperatur intervalında entalpiyanın qiyməti 1952 J/g, 194 kQr şüalanmış nümunədə entalpiyanın qiyməti 1685 J/g bərabərdir. Daxili enerjinin yüksək udulma dozalarında azalması amorflaşma hesabına struktur pozulması ilə bağlıdır. İkinci 450-950 °C intervallarında geniş endoeffekt B_4C birləşməsində oksidləşmə prosesini xarakterizə edir. Bu zaman nümunə aşağıda qeyd olunmuş sxematik ardıcılıqla oksidləşir [14].



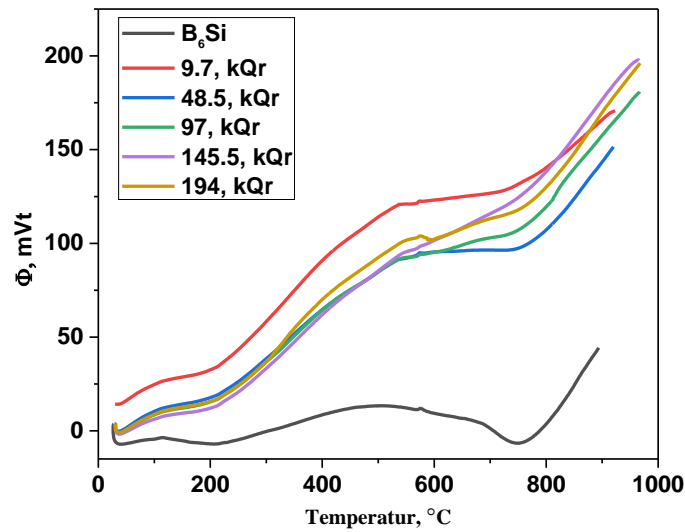
Oksidləşmə prosesində entalpiyanın qiyməti 194 kQr şüalanmış nümunə üçün 8974 J/g, ilkin və 145.5 kQr qədər şüalanmış nümunələrdə isə entalpiyanın qiyməti 6854 J/g

ətrafındadır. Amorlaşmış strukturda oksidləşmə prosesində daxili enerji artmışdır. Bu rekombinasiya prosesindəki daxili enerjiden 4.68 dəfə çoxdur. Şəkil 6.5.2-də ilkin halda B₄C birləşməsinin və 9.7 kQr, 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr şüalanmış B₄C birləşməsinin entropiyasının temperaturdan asılılığı verilmişdir. Entropiya termodinamik hal funksiyası olub, sistemin makroskopik halını və daxili xaotikliyi xarakterizə edir. Entropiya yalnız statistik mənə daşıyır ki, təklənmiş hissəciyin, aktiv mərkəzin və yaxud radikalın entropiyasından danışmaq olmaz.

Statistik tarazlıq halında entropiya maksimum qiymətə malikdir. Şüalanmamış B₄C birləşməsində entropiyanın qiymətinin temperaturdan asılı olaraq azalması, həmin birləşmədə xaotikliyin artması hesabına baş verir. 30-950°C temperatur intervalında 9.7 kQr şüalanmış 38.77%, 48.5 kQr şüalanmış 37.12%, 97 kQr şüalanmış 32.17%, 145.5 kQr şüalanmış 36.38%, 194 kQr şüalanmış isə 34.38 % xaotikliyə malikdir. Müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış B₄C birləşməsində qamma kvantların hesabına xaotikliyin pozulması otaq temperaturda sistemin ən dayanıqlı tarazlıq halında qamma şüalanma hesabına xaotiklik 97 kQr şüalanmış 2.02%, 48.5 kQr şüalanmış 5.23%, 97 kQr şüalanmış 11.85%, 145.5 kQr şüalanmış 20.35 %, 194 kQr şüalanmış 30.80% təşkil edir. 950 °C temperaturda entropiyanın ən kiçik qiymətində qamma şüalanma hesabına xaotiklik kiçik olması eksperimental olaraq rekombinasiya prosesini təsdiq edir. Entropiyanın additivlik xassəsindən istifadə edərək. Energetik səviyyə arasındakı məsafəni hesablam üçün riyazi aparat mürəkkəb olduğu üçün bu sual açıq olaraq qalır. Müəyyən olunmuşdur ki, B₄C birləşməsində 30-950 °C temperatur intervalında energetik səviyyələrin sayı azalır. Udulma dozəsindən asılı olaraq energetik səviyyələrin azalması $C_p = F(T)$ funksiyasında geniş effektlərlə izah olunur. Burada aktiv mərkəzlərin və radikalların temperaturdan asılı olaraq rekombinasiyası bir daha eksperimental olaraq təsdiq olunur.

Bir sıra elmi tədqiqat işlərində B₆Si birləşməsinin quruluş və termofiziki xassələrinin temperaturdan asılı olaraq dəyişmə dinamikası tədqiq olunmuşdur. Gamma şüalarla şüalandırılmış silicon hexaborid birləşməsində yaranan defektlər, aktiv mərkəzlər (S*), Si* və B* atomlarının həyəcanlanmış forması və kristallik amorflaşma həmin birləşmənin termik xassələrində müəyyən dəyişikliklər yaradır. Həmçinin defektlərin temperaturdan asılı olaraq

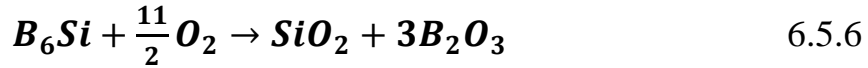
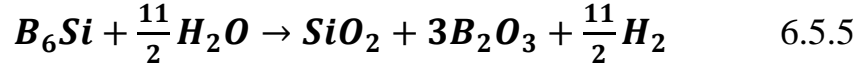
energetik səviyyələrdə miqrasiyası və rekombinasiyası paralel şəkildə baş verir. Yaranan defektlərin termofiziki xassələrə təsirinin aydınlaşdırmaqdan üçün silicon heksaborid birləşmələri $D=0.27$ Qr/san doza gücünə malik ^{60}Co mənbəyi ilə otaq temperaturunda şüalandırılmışdır. Şüalanmadan sonra SiB_6 nümunələri normal atmosfer şəraitində Ar mühütündə, $5^\circ\text{C}/\text{dəq}$ termik işlənmə sürətində otaq temperaturundan 1000°C qədər DSC analizləri yerinə yetirilmişdir. Şəkil 6.5.3 şüalanmamış və 9.7, 48.5, 97, 145.5, və 194 kQr udulma dozalarında şüalandırılmış B_6Si birləşməsinin istilik selinin spektrləri verilmişdir.



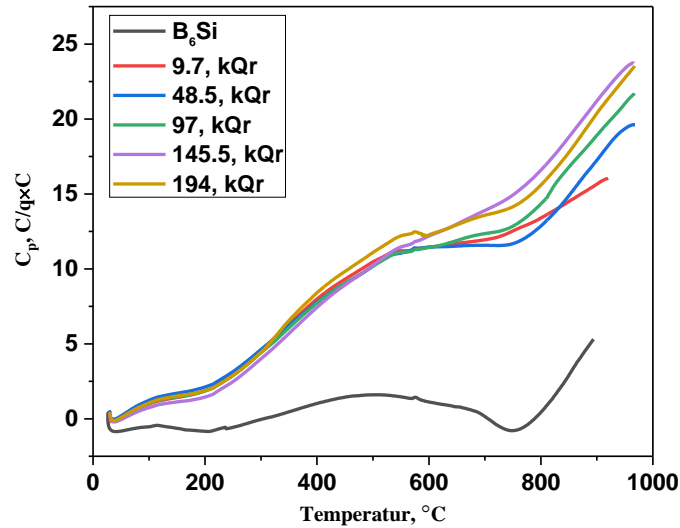
Şəkil 6.5.3. Şüalanmamış və 9.7, 48.5, 97, 145.5 və 194 kQr udulma dozalarında şüalandırılmış B_6Si birləşməsinin istilik selinin temperatur asılılığı

Şəkil 6.5.3-də şüalanmamış nümunə ilə şüalanmış nümunələr arasında istilik selinin fərqli mexanizimlərlə ötrüldüyünü aydın müşahidə etmək olar. Şüalanmamış bor silisid birləşməsində DSC spektrinin dəyişmə kinetikasi iki hissədən, $T \leq 200^\circ\text{C}$ qeyri-xətti parçalanma oblastından hansı ki, yuxarıda qeyd olunduğu kimi atmosferdən adsorbsiya olunmuş su buxarlarının parçalanması nəticəsində yaranır. İkincisi $T \geq 500^\circ\text{C}$ sonra nümunənin oksidləşməsi nəticəsində yaranan exothermal peak ilə xarakterizə olunur. Həmçinin $200 \leq T \leq 500^\circ\text{C}$ temperatur intervalında istilik selinin qiyməti xətti olaraq 14 mW qədər artır. Atmosfer şəraitində aparılan eksperimental tədqiqatlarda bor tərkibli birləşmələrinin havadakı su molekulları və oksigen ilə qarşılıqlı təsir reaksiyası qaçılmazdır. Hər iki mexanizmdə (parçalanma və oksidləşmə) təyin olunmuş kimyəvi çevrilmələrin faiz

nisbəti bir-birindən fərqlidir və bu ətraf mühüt şəraitindən çox asılıdır. Hər iki mexanizmi birləşdirsək onda aşağıdakı ardıcılıq üzrə baş verən reaksiyalar mümkündür.

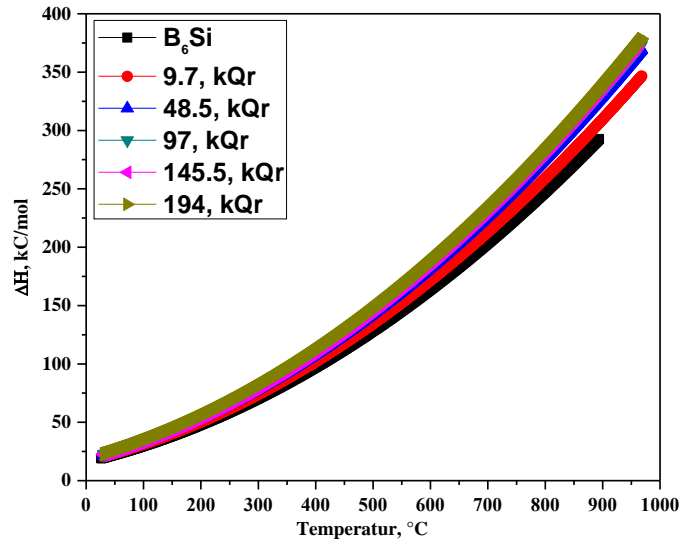
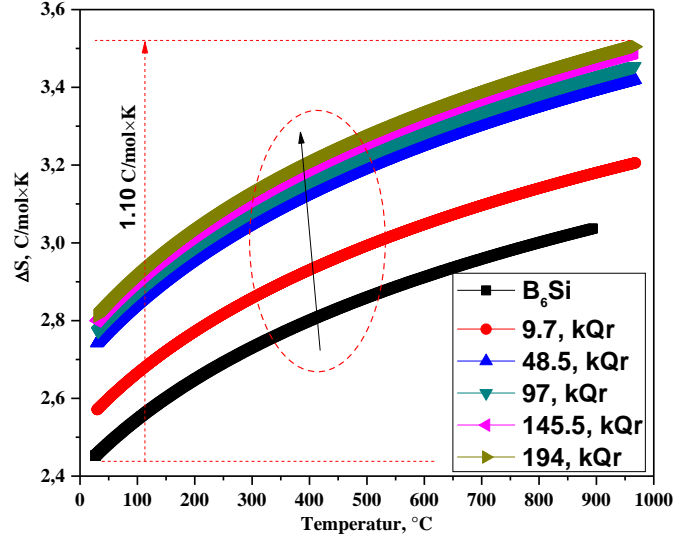


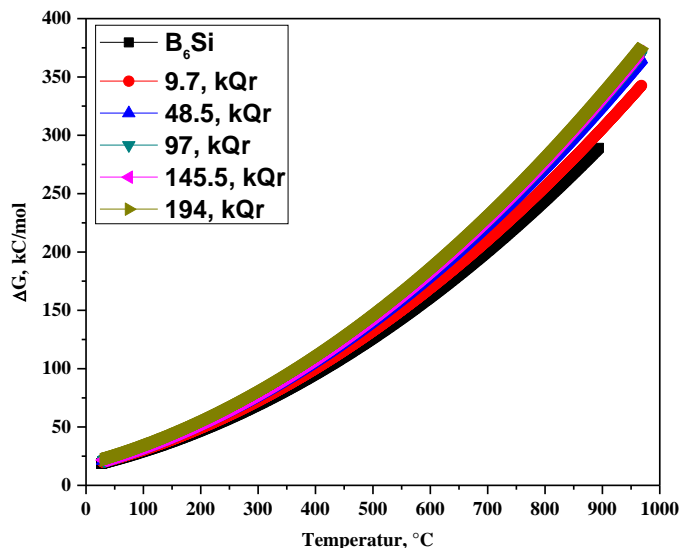
Şəkil 6.5.3-dən aydın görünür ki, şalanmış B_6Si birləşməsində kristtalik quruluşda yaranan pozulma istilik selinin fonon-fonon qarşılıqlı təsir və radiasiya ilə ötrülmə mexanizminə ciddi təsir göstərir.



Məhz ona görə şüalanmış B_6Si birləşməsində DSC spektrlərində istiliyin ötrülməsi azalaraq daha çox xətti şəkildə formalaşır. Formalaşmış sahələrin hesablanması üçün, istilik tutumunun temperaturdan asılı olaraq dəyişən məlum funksiyasından istifadə olunmalı və termodinamik funksiyaların temperatur asılılığı müəyyən olunmalıdır. Müxtəlif udulma

dozalarında şüalandırılmış B_6Si birləşməsi üçün təyin olunmuş istilik tutumunun məlum funksiyalarından istifadə olunaraq hesablanmışdır [187].





Şəkil 6.5.4. Şüalanmamış və 9.7, 48.5, 97, 145.5 və 194 kQr udulma dozalarında şüalandırılmış B_6Si birləşməsinin entropiya, entalpiya və Gibbs enerjisinin temperatur asılılığı

Şəkil 6.5.4-də müxtəlif udulma dozalarında otaq temperaturunda, 10^5 Pa təzyiqlik altında şüalandırılmış B_6Si birləşməsi üçün termodinamik funksiyaların ΔS , ΔH and ΔG temperatur asılılığı verilmişdir. Termodinamik funksiyaların dəyişməsi istilik tutumunun məlum ifadəsindən hesablanmışdır. Keramik materiallar üçün hər hansı kimyəvi çevrilmə zamanı termodinamik funksiyalar temperaturdan asılı olaraq böyük qiymətə malik olur [18]. Lakin SiB_6 birləşməsi üçün gamma şüalanma və temperaturun təsiri altında baş verən dəyişikliklər yeni tədqiq olunmuşdur. Oksidləşmə kinetikasının əsasları bir daha aydın göstərir ki, əsas mexanizm silikon hexaborid birləşməsinin səthində B_2O_3 , BO_2 və SiO_2 təbəqəsinin alınması ilə gedən oksidləşmə reaksiyası durur. Qamma şüaların və temperaturun təsiri altında oksidləşmə reaksiyasında hər bir termodinamik funksiya üçün qeyri xətti və xətti hissə mövcuddur. Entropiyanın temperatur asılılığı verilmişdir. Entropiya hər hansı fiziki miqdar təyin etmir. Lakin nümunədə istilik hərəkətliliyinin xarakterizə edir. Göründüyü kimi temperaturun artması ilə entropiya $3.5 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ sonra stabil oblağa yaxınlaşır. Daha dəqiq ifadə etsək oksidləşmə oblastının tamamlanması ilə entropiyanın xətti hissəsi üst-üstə düşəcək ki, bununlada istilik hərəkətliliyi stabil olacaqdır. Gibbs enerjisinin müxtəlif udulma dozalarında temperatur asılılığı göstərilmişdir. Alınmış qiymətlərin yüksək olması

və nəzəri olaraq mənfi qiymətdən dəfələrlə böyük olması göstərir ki, səth xarakterli oksidləşmə reaksiyası yükək enerji təsiri altında baş verir.

VII FƏSİL

DEFEKT ƏMƏLƏGƏLMƏ MEXANİZMİNİN RİYAZİ ƏSASLARI VƏ MOLEKULYAR DİNAMİKA

Sonuncu fəsildə III-VI fəsillər üzrə yerinə yetirilən təcrübələrin qarşılıqlı müqayisəli analizi yerinə yetirilmişdir. Şüalanma növündən, sel sıxlığından və enerjisindən asılı olaraq kristal strukturda atomların yerdəyişmə mexanizmləri, defekt əmələgəlmə və rekombinasiya kimi mühüm proseslərin kinetikasına diqqət ayrılmışdır. Ağır ionların təsir altında tədqiqat kristallarında termofiziki parametrlərin qarşılıqlı müqayisə və əsaslandırılması yerinə yetirilmişdir. Çoxlu informasiyaları email etmə qabiliyyətinə malik avadanlıqlardan istifadə olunaraq tədqiqat kristalları üçün molekulyar dinamika analizləri aparılmış, səth effektlərin dəyişmə mexanizmi izah olunmuşdur.

7.1 Kristallik struktura enerji ötürmə mexanizminin riyazi əsasları

Məlum kinetik enerjiyə malik hissəciklərin kristal strukturun ilkin atomları ilə qarşılıqlı təsirindən sonra yaratdığı kaskad toplusu və yaxud defekt paketi mövcuddur. Bu qrup atomlar kristal qəfəsin digər atomları ilə qarşılıqlı təsirdə olur və struktur daxili hərəkət formalaşdırır. Bəzi hallarda kristal strukturda yerləşən tək atom deyil, eyni zamanda iki və yaxud çoxlu sayda atomların yerdəyişməsinə səbəb olur. Qarşılıqlı təsirdə üçüncü və yaxud növbəti atomlar iştirak edərsə yekun prosesdə kaskad qarşılıqlı təsirin yaranmasına gətirib çıxarır. Kaskad toqquşma kristal strukturda vakansiya və atomlar arasındakı düyünlərin fəza paylanması və onun məhdudlaşdırılmış sərhədlərini göstərir. Məhz bu şəkildə qarşılıqlı təsirlər kristal, yarımkəçirici və kompozitlərin fiziki və mexaniki xassələrinin dəyişməsinə səbəb olur. İonlaşdırıcı mühütdə kaskad qarşılıqlı təsir zamanı strukturda atomlar arasındakı düyünlərin və vakansiyaların sayını müəyyən etmək əsas məsələlərdən biridir. Başlanğıc enerjiyə malik E_i neytronların kristal quruluşun atomları ilə qarşılıqlı təsir zamanı məlum sayda atom struktur yerdəyişməsinə məruz qalır. Neytron selinin atom və nüvə ilə mümkün elastiki və qeyri-elastiki qarşılıqlı təsirin mexanizmi və təbiəti haqqında III fəsildə geniş şərh

edilmişdir. Əsas məsələ kristal struktura ötürülən kinetik enerji hesabına yaranan ilk qarşılıqlı təsirdəki atomların sayını müəyyən etmək üçün radiasiya təsirinin yaranma sürətinin araşdırılması tələb olunur.

$$R_d = N \int_{E^0}^{E^j} \phi(E_i) \sigma_D(E_i) dE_i \quad 7.1.1$$

N -struktur qəfəsdə mövcud atomların sıxlığı, $\phi(E_i)$ –kinetik enerjini daşıyan hissəciklərin seli, $\sigma_D(E_i)$ – yerdəyişmənin çarpaz en kəsiyini göstərir. Şüalanmış hissədə yerdəyişməyə məruz qalan atomların ehtimalını çarpaz en kəsiyi

$$\sigma_D(E_i) = \int_{T^0}^{T^j} \sigma(E_i, T) \nu(T) dT \quad 7.1.2$$

$\sigma(E_i, T)$ - E_i başlanğıc enerjiyə malik hissəciyin kristal struktura ötürdüyü T enerjinin ehtimalı, $\nu(T)$ -qarşılıqlı təsirdə yerdəyişmə edən atomların sayı. III fəsildə müxtəlif enerji intervalında və fərqli şüalanmalarda çarpaz en kəsiyin aldığı qiymətlər verilmişdir. Tədqiq olunan fəsildə əsas məsələ (7.1.2) tənliyinin ikinci üzvünün struktura ötürülən kinetik enerjinin hesabına yaranan yerdəyişmənin təyin edilməsi üzərində qurulmuşdur. İlk öncə müəyyən kinetik enerji hesabına təpmə enerjisi aldıqdan sonra kristal strukturda yerdəyişmə edən atomların $P_d(T)$ – ehtimalını müəyyən etməkdir. Əlbətdə ki, bunun üçün ilk yerdəyişmə edən atomlara ötürülən minimum enerji təyin olunmalıdır. Əgər həmin enerjinin qiymətini E_d - ilə qeyd etsək və onun qiymətinin kristalloqrafik strukturdan, ilkin təpməyə məruz qalan atomların strukturda istiqamətlənməsindən, qəfəsdəki atomların istilik enerjisindən və s., parametirlərdən asılıdır. $T < E_d$ halında E_d qiymətinin ehtimalı sıfıra, $T > E_d$ halı üçün vahidə bərabərdir və strukturda atomların rəqsi hərəkəti qəfəs düyünlərinə ötürülən enerjinin qiymətindən asılıdır.

$$\begin{aligned} P_d(T) &= 0, & T < E_d \\ P_d(T) &= 1, & T > E_d \end{aligned}$$

(7.1.1) və (7.1.2) tənlikləri real olaraq daha çox amorf halda mövcud sistemi xarakterizə edir. Daha real nizamlı kristal strukturda yerdəyişmə edən atomların ehtimalı üçün

$$\begin{aligned}
 P_d(T) &= 0, & T < E_{d(\min)} \\
 P_d(T) &= f(T), & E_{d(\min)} < T < E_{d(\max)} \\
 P_d(T) &= 1, & T > E_{d(\max)}
 \end{aligned}$$

$f(T)$ – funksiyası yerdəyişmə etməyən atomlarla vahid sayda yerdəyişmə edən atomların ehtimal nisbətini xarakterizə edir. Növbəti əsas məsələ sürüşmənin ehtimalını nəzərə almaq və ötürülən enerjinin qiymətindən asılı olaraq sürüşmələrin sayının təyin edilməsidir. Bunun üçün Kinçin və Pize metodundan istifadə edərək məlum strukturda təpmə enerjisinin hesabına yerdəyişmə edərək yaranan düyün atomların və vakansiyaların sayını təyin etmək mümkündür. Atomlar arasındakı düyün və vakansiyaların təyin edilməsində aşağıdakı prinsipial quruluşları qeyd etmək lazımdır.

1. $T < E_d$ halında E_d qiymətinin ehtimalı sıfıra bərabərdir;
2. $T > E_d$ şərti daxilində atomların yerdəyişmə ehtimalı vahidə bərabərdir;
3. Kristal strukturun atomu başlanğıc təpmə enerjisindən və T' qəfəsə ötürülən enerji ilə birlikdə yeni atomlar arasındakı düyünlərin yaranması və tam enerjisi $T = T' + e$ kimi qeyd edilməlidir;

Ən sadə modellərdə qarşılıqlı təsir və defekt əmələgəlmə mexanizmi yerdəyişmə edən atomların strukturda hərəkəti ilə analiz edilir. Qarşılıqlı təsir bitdikdən sonra yerdəyişmə edən atomların $T - \varepsilon$ qalıq enerjisinə, təpməyə məruz qalmış atomlar isə $\varepsilon - E_d$ enerjiyə malik olacaqdır. $v(T)$ - yerdəyişmə edən atomların sayı üçün

$$v(T) = v(T - \varepsilon) + v(\varepsilon - E_d) \quad 7.1.3$$

E_d -baş verən təsirdə sərf olunan enerji $\varepsilon \gg E_d$ şərti daxilində (7.1.3) tənliyini digər formada ifadə edilə bilər.

$$v(T) = v(T - \varepsilon) + v(\varepsilon) \quad 7.1.4$$

(7.1.4) tənliyi $v(T)$ qiymətini təyin edilməsi üçün kifayət etmir. Bu zaman struktura ötürülən $v(\varepsilon)$ enerjinin qiyməti məlum deyil. Yerdəyişmə və qəfəsin düyünlərindəki atomlar eyni olduğu üçün ötürülən enerjinin qiyməti $0 < \varepsilon < T$ intervalında mövcud ola bilər. Lakin, $(\varepsilon, d\varepsilon)$ intervalında qarşılıqlı təsir zamanı ötürülən enerji ehtimalının məlum qiymətini (7.1.4) tənliyinə hasili bütün ε -nin

qiymətləri üçün inteqrallasaq alınan qiymət orta sayda yerdəyişmə edən atomların sayını təyin etməyə imkan verir. Bənzər atomlar üçün bərk halda olan sfera ilə qarşılıqlı təsir zamanı ötürülən enerjinin çarpaz en kəsiyi

$$\sigma(T, \varepsilon) = \frac{\sigma(T)}{\gamma T} = \frac{\sigma(T)}{T}, \quad \gamma = 1 \quad (7.1.5)$$

və ehtimalı T ötürülən enerji ilə $(\varepsilon, d\varepsilon)$ intervalında

$$\frac{\sigma(T, \varepsilon) d\varepsilon}{\sigma(T)} = \frac{d\varepsilon}{T} \quad (7.1.6)$$

(7.1.6) tənliyinin sağ tərəfini (7.1.4) tənliyinə vurub 0-dan T -dək inteqrallasaq

$$\nu(T) = \frac{1}{T} \left[\int_0^T \nu(T - \varepsilon) + \nu(\varepsilon) \right] d\varepsilon \quad (7.1.7)$$

$\varepsilon' = T - \varepsilon$ əvəzləməsi yerinə yetirsək

$$\nu(T) = \frac{1}{T} \left[\int_0^T \nu(\varepsilon') + \nu(\varepsilon) \right] d\varepsilon \quad (7.1.8)$$

Həqiqətən (7.1.8) tənliyi iki eyni ayrı-ayrı inteqrallardır və yekun şəkildə

$$\nu(T) = \frac{2}{T} \left[\int_0^T \nu(\varepsilon) \right] d\varepsilon \quad (7.1.9)$$

(7.1.9) tənliyi ilə müxtəlif şüalanma mühütlərində və seçilmiş şərtlər daxilində müxtəlif fiziki mənalara özündə ehtiva etməklə orta sayda yerdəyişmə edən atomların sayını və vakansiyaları təyin etməyə imkan verir .

7.2 Formalaşan defektlərin termodinamik funksiyalarını riyazi qanuna uyğunluqlarla təyin edilməsi

Termodinamikanın birinci qanunu enerji və istilik selinin dönən və dönməyən proseslər üçün, ikinci qanunu fiziki sistemin qeyri tarazlıq halında dönməyən prosesləri üçün xarakterizə edilməsi məlumdur. Tədqiqat işlərində məlum molekulyar kütləyə və məlum sayda atoma malik kristallarda bəhs edildiyi üçün N sayda atomdan ibarət kristallar üçün termodinamik funksiyaları aşağıdakı kimi yazmaq mümkündür.

$$dU = TdS - PdV + \mu dN \quad (7.2.1)$$

$$dH = TdS + VdP + \mu dN \quad (7.2.2)$$

$$dF = -dST - PdV + \mu dN \quad (7.2.3)$$

$$dU = dST - dVP + \mu dN \quad (7.2.4)$$

μ kristalın kimyevi potensialını adlanır və (7.2.5) ifadəsi ilə təyin olunur.

$$\mu = \left. \frac{dG}{dN} \right|_P \quad (7.2.5)$$

Bərk cisimlərin termodinamik funksiyalarının temperatur asılılığını sabit təzyiqdə təyini üçün istilik sel funksiyasının xüsusi istilik tutumuna keçid qiyməti müəyyən olunmalıdır. İstilik tutumunun temperatur asılılığında kvant region təyin olunmalı, temperaturun bölünmüş intervalı verilməlidir. Məlumdur ki, aşağı temperatur intervalında istilik tutumunun kvant regionu Debay temperaturuna qədər artan sürətlə davam edir. Orta temperatur intervalında istilik tutumunun qiyməti zəyif sürətli artması, yüksək temperaturlarda isə sıçrayışlı artma müşahidə olunur. Yüksək temperaturlarda istilik tutumunda artma yüksək nizamlılığa malik anharmoniya adlandırılır. Müxtəlif ionlaşdırıcı şüaların və sürətli ağır ionlarla şüalanma zamanı istilik tutumunun qiymətinin anharmonik oblastı süalanmamış kristallarda (7.2.6) fərqi qədər zəif sürətlə baş verir.

$$\frac{dh^f}{dT} + \frac{(h^f)^2}{kT^2} \quad (7.2.6)$$

h^f formalaşan defektin enerjisini xarakterizə edir. Məlumdur ki, entolpiya istilik tutumu və temperatur funksiyasıdır. Temperaturdan asılı olaraq şüalanmış kristalın entropiyasında defektlərin formalaşma mexanizmini nəzərə almaq şərti ilə entropiyanın ümumi qiyməti (7.2.7) şəklində ifadə etmək olar.

$$\eta(s^f + k + \frac{g^f}{T}) \quad (7.2.7)$$

Gibbs enerjisinin qiymətini ηkT qədər artma müşahidə olunmaqla təyin etmək mümkündür. Şüalanmış kristallarda yaranan vakansiyaların sayını n , strukturda mövcud atomların sayını N , şüalanmamış kristalın termodinamik funksiyalarını G_0, S_0, H_0 , şüalanmış kristalın termodinamik funksiyalarını G, S, H qəbul etsək n sayda vakansiya üçün Gibbs enerjisini qiymətini (7.2.8) şəklində olur.

$$G = A + ng^f - TS \quad (7.2.8)$$

Gibbs enerjisinin TS hissəsi fərqli hallarda mövcud vakansiyaların

konfigurasiya hallarını xarakterizə edir. $A + ng^f$ vakansiyaların enerjisini və temperatur təsiri altında hərəkətini xarakterizə edir. Vakansiyaların $n=0$ halı üçün TS və ng^f qiyməti sıfıra bərabər olur. Bu halda $A=G_0$ şüalanmaya məruz qalmayan kristalların Gibbs enerjisi kimi qəbul etmək olar. Yekun ifadəni (7.2.9) şəklində yazmaq olar.

$$G = G_0 + ng^f - TS \quad (7.2.10)$$

Digər tərəfdən n sayda vakansiya üçün kristalın ümumi entropiyasını

$$S_c = k \ln \left(\frac{(n+N)!}{N!n!} \right) \quad (7.2.11)$$

Şüalanma təsiri altında strukturda yaranan vakansiyaların sayı ümumi atom sayından çox-çox kiçik olduğunu nəzərə alsaq entropiya üçün yekun ifadəni almış oluruq

$$n = N \exp \left(-\frac{g^f}{T} \right) \quad (7.2.12)$$

$$S_c = n \left(k + \frac{g^f}{T} \right) \quad (7.2.13)$$

Entalpiya üçün yekun ifadəni Gibbs enerjisinin və entolpiyanın məlum ifadələrinə əsaslanaraq

$$H = G_0 + TS_0 + n(g^f + Ts^f) \quad (7.2.14)$$

$g^f + Ts^f$ vahid sayda defekt üçün formalaşmış entropiya adlanır.

7.3 Riyazi modelləşdirilmə əsasında molekulyar dinamika

“Molekulyar dinamikanın simulyasiya”sı tədqiqat kristalları ilə qarşılıqlı təsirdə olan hissəciklər selinin strukturda yaratdığı təsirlərin paylanmasının 3D təqdim edilməsinə əsaslanır [10, 152]. Tədqiqat kristallarının səth morfologiyasının dəyişməsi qeyd olunan hissəciklərin hərəkəti nəticəsində baş verir. Modelləşdirilmə “Las Palmeras Molecular Dynamics” proqram paketi əsasında Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutunun İnformasiya Texnologiyaları Lobaratoriyasında yerləşən “QOVORUN” superkompüterində həyata keçirilmişdir. Molekulayar dinamikanın fiziki əsasları

kvant mexanikanın qanunları əsasında, atomların strukturda hərəkət trayektoriyasının ehtimalı və hissəciklərin qarşılıqlı təsiri əsasında qəbul olunur. Atomlar arası qarşılıqlı təsir qüvvəsinin potensialı, hissəciyin dəqiq hərəkət trayektoriyası və makroskopik (termodinamik) xarakteri nəzərə alınması tələb olunan şərtlərdən biridir. Hissəciklərin qarşılıqlı təsir potensialın dəqiq təyin edilməsi molekulyar dinamikanın doğru modelləşdirilməsinə gətirib çıxarır.

$$U = \sum U_{rabitə} + \sum U_{bucaq} + \sum U_{a-a} + \sum U_{a-h} + \sum U_{cüt} \\ + 3 \sum U_{çox-h-atom} + \sum U_{Tersof} + \sum U_{metal}$$

$\sum U_{rabitə}$ atomlar arasında birbaşa qarşılıqlı təsiri xarakterizə edən potensial

$\sum U_{bucaq}$ atomlar arasında birbaşa qarşılıqlı təsirdə olmayan potensial

$\sum U_{a-a}$ atomlar arası qarşılıqlı təsir potensialı

$\sum U_{a-h}$ atom-hissəcik arasında qarşılıqlı təsiri təsvir edən potensial

$\sum U_{cüt}$ çox hissəcikli potensial

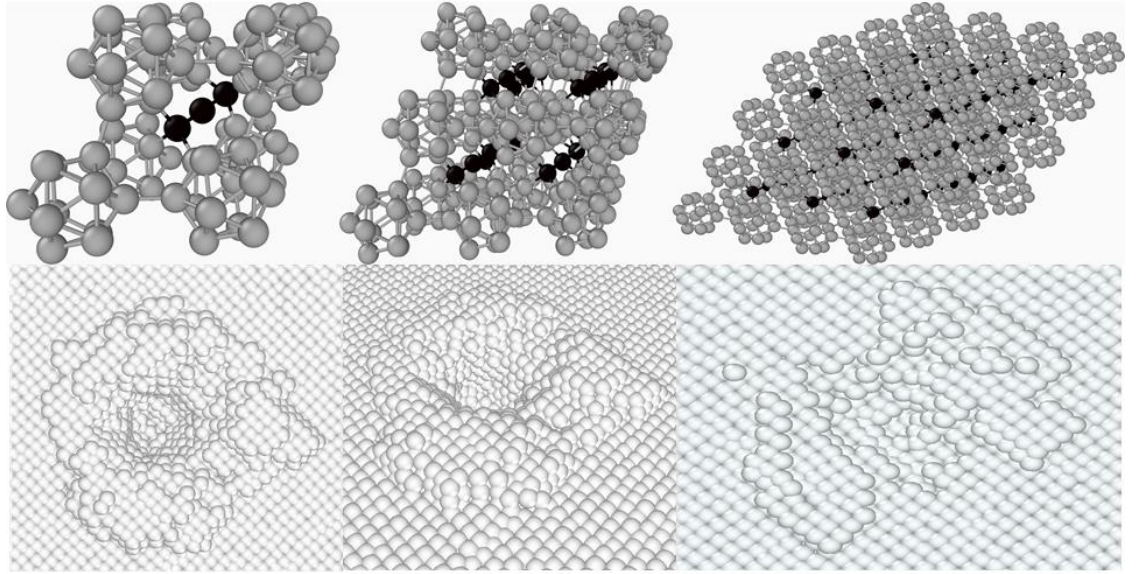
$\sum U_{3-body}$ çox hissəcikli potensial

$\sum U_{4-body}$ çox hissəcikli potensial

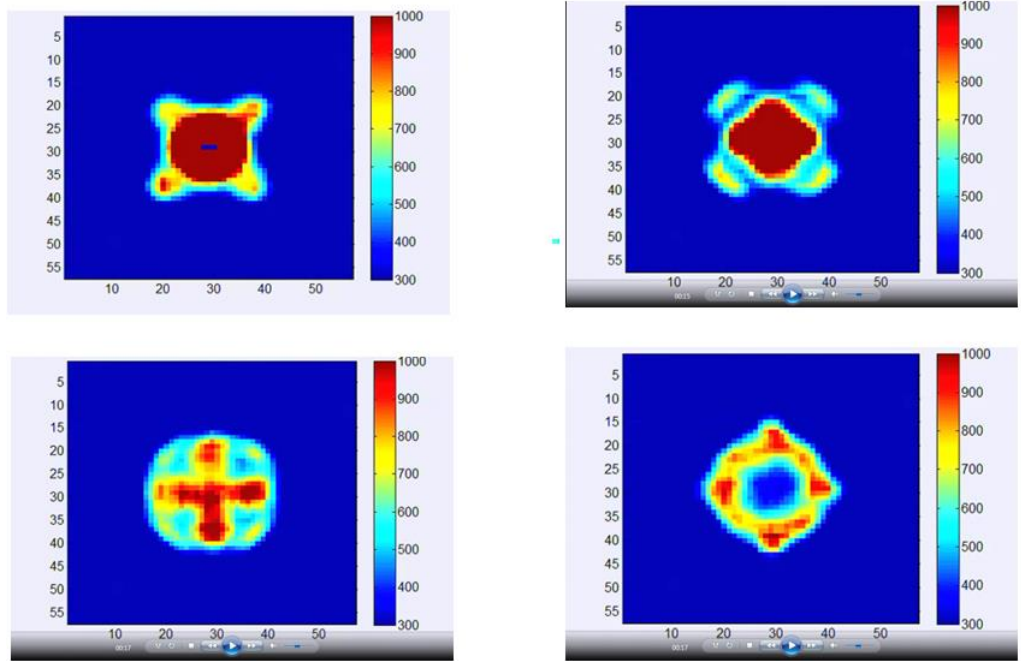
$\sum U_{Tersof}$ çox komponentli potensial

$\sum U_{metal}$ metallik potensial

Şəkil 7.3.1-də 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ sürətli ağır ion seli ilə 20 ps zaman müddətində şüalanmış B_4C hədəf kristalın səth morfologiyasının 80 Å ölçüdə, 45° bucaq altında molekulyar dinamikasının təsviri verilmişdir. Məlumdur ki, qarşılıqlı təsir prosesi yüksək temperatur intervalında baş verir. Nəzəri yaxınlaşma funksiyalarından istifadə edərək B_4C hədəf kristalının təyin olunmuş ölçüsündə elektron-fonon qarşılıqlı təsir əmsalının qiyməti $g=8.1 \times 10^{12} \text{ Vt}/(\text{sm}^3 \times \text{K})$ olması müəyyən olunmuşdur.



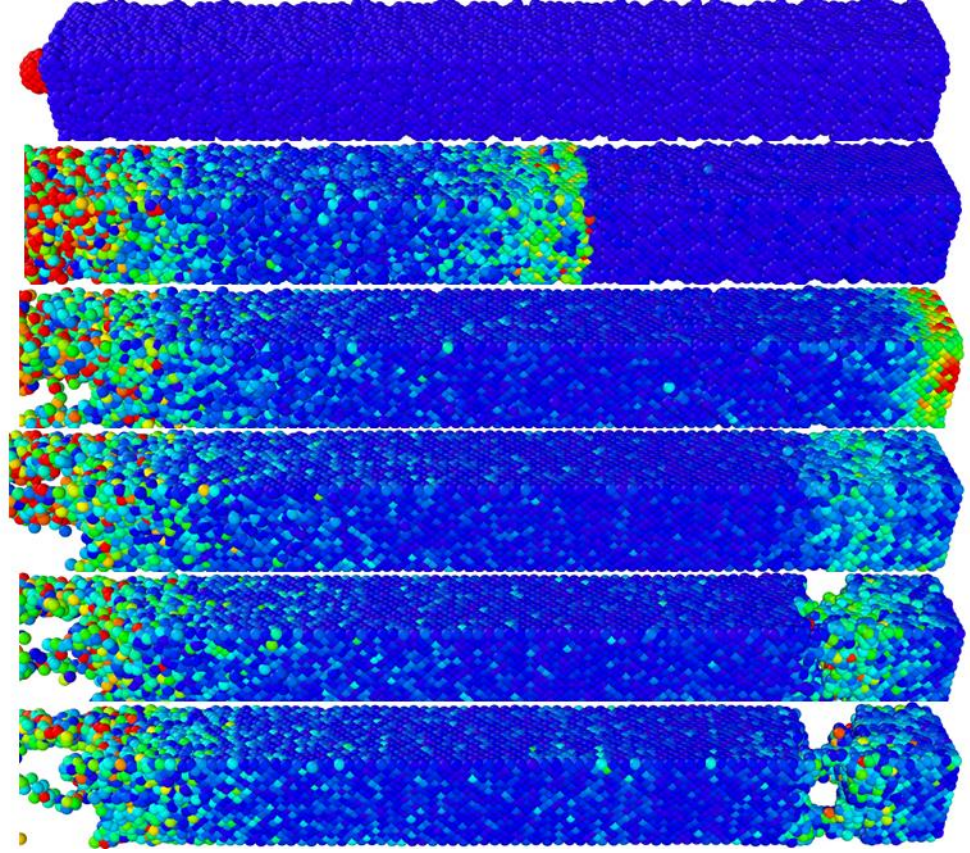
Şəkil 7.3.1. 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ sürətli ağır ion seli ilə 20 ps şüalanma zamanı B_4C kristalının səth morfologiyası.



Şəkil 7.3.2. 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ sürətli ağır ion seli ilə 20 ps şüalanma zamanı B_4C kristalında səthində istilik sahəsinin paylanması.

Şəkil 7.3.2-də $^{132}\text{Xe}^{26+}$ sürətli ağır ion selinin B_4C kristalının səth morfologiyası ilə qarşılıqlı təsiri zamanı istilik sahəsinin formalaşma, zamandan asılı olaraq istiliyin strukturun həcmi boyu paylanması göstərilmişdir. Molekulyar dinamik hesablama nəticələri elektron-fanon qarşılıqlı təsir əmsalının istilik sahəsi üçün $g=4.05 \times 10^{12} \text{ Vt}/(\text{sm}^3 \times \text{K})$, radial enerji paylanma

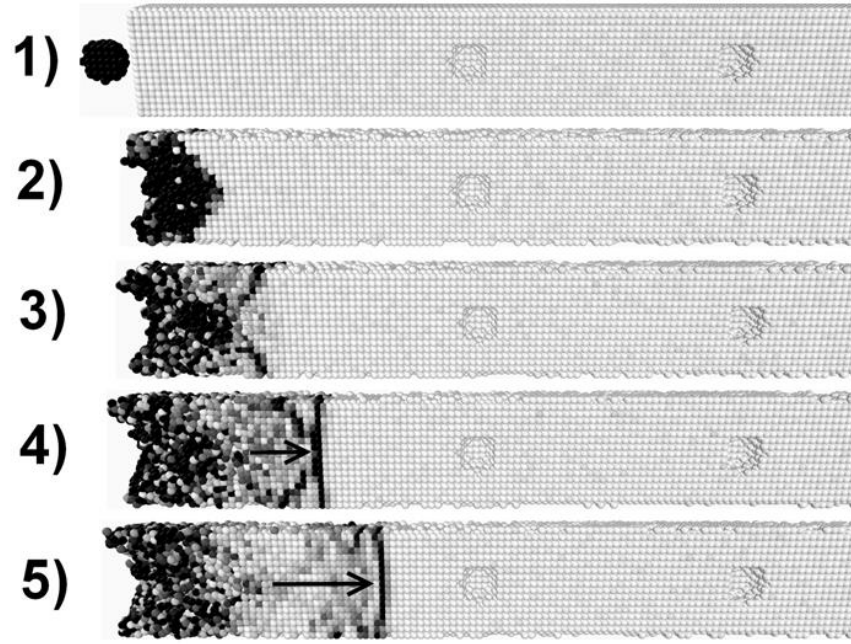
parametrinin 2.8 nm olması müəyyən olunmuşdur.



Şəkil 7.3.3. $3.8 \times 3.8 \times 30$ nm sahədə 167 MeV enerjili sürətli $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ağır ionların B_4C kristalı ilə qarşılıqlı təsirin molekulyar dinamikası.

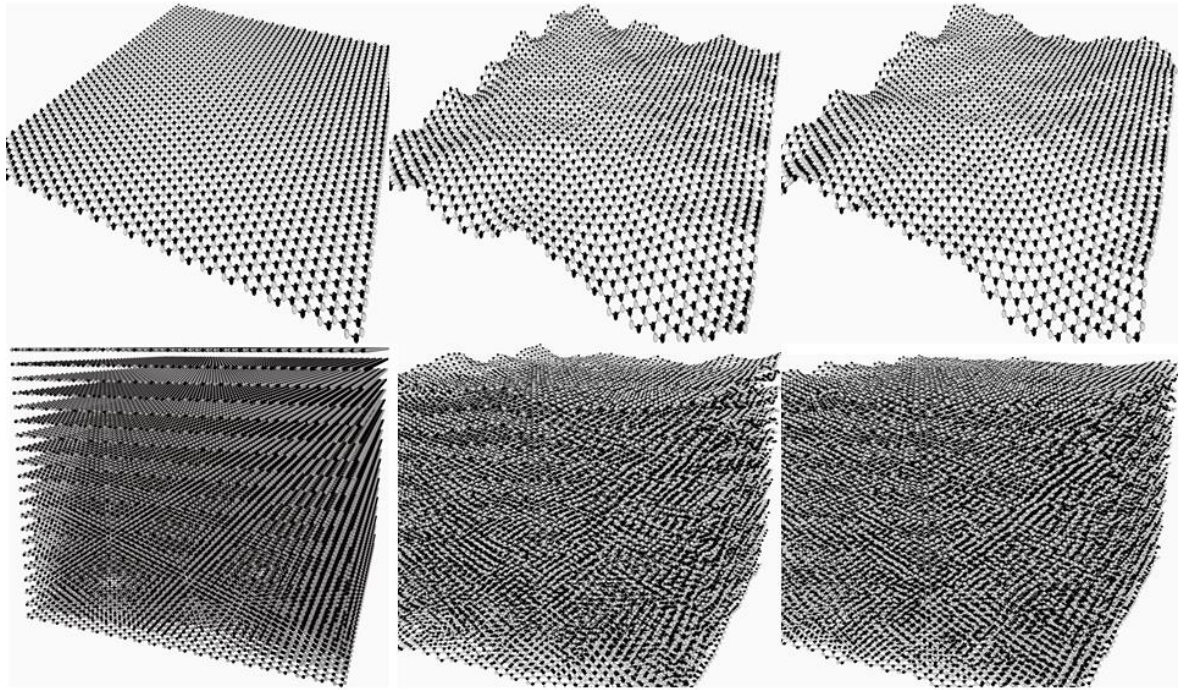
Şəkil 7.3.3-də $3.8 \times 3.8 \times 30$ nm sahədə 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ sürətli ağır ionlarının B_4C kristal quruluşu ilə qarşılıqlı təsirin molekulyar dinamikası göstərilmişdir. $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ionlarının struktura ötürdüyü kinetik enerji dalğasının strukturun həcmi boyu paylanması, təyin olunmuş ölçüdə struktur degradasiya mexanizminin aydın müşahidə olunur.

167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ sürətli ağır ionların kristalda maksimum nüfuz etmə dərinliyinin 15 mkm məsafəyə qədər çatdığını nəzərə alsaq 30 nm ölçüdə enerji ötürmə kinetikasi ən yüksək səviyyədə olduğunu təyin etmək olar. Şəkil 7.3.4-də 0 ps, 0.5 ps, 1 ps, 1.5 ps, 2 ps. 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ağır ionlarının B_4C kristal strukturu ilə qarşılıqlı zərbə dinamikasının və dalğasının formalaşma mexanizmi göstərilmişdir. Dalğa mexanizmi enerjinin ötürülməsi ilə təsdiq olunmuşdur.



Şəkil 7.3.4. 167 MeV enerjili sürətli $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ağır ionlarının B_4C kristal strukturu ilə qarşılıqlı zərbə dinamikası və dalğasının formalaşma mexanizmi;

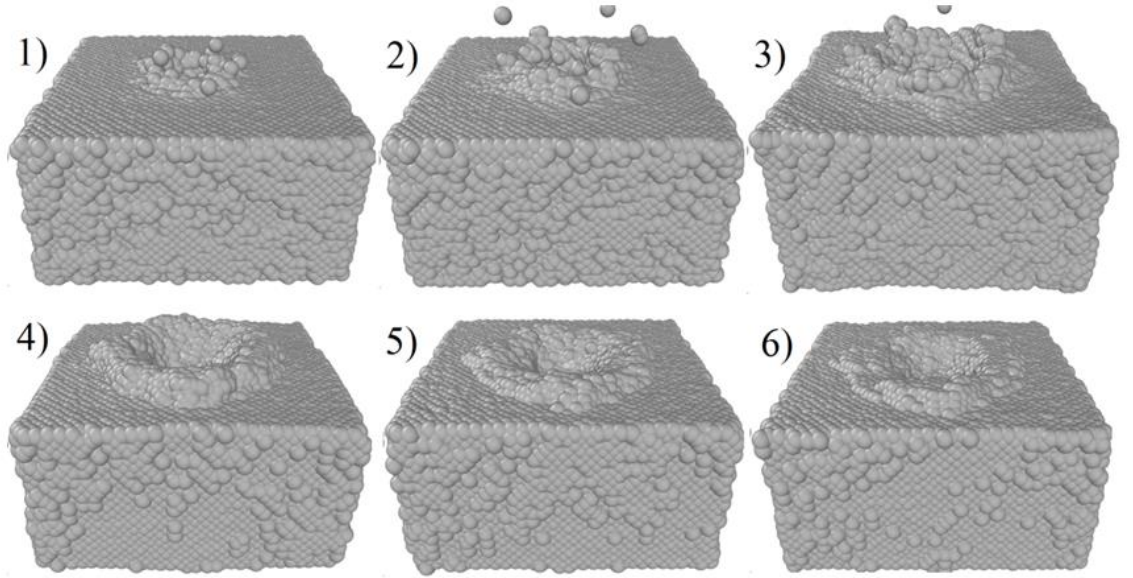
1) 0 ps, 2) 0.5 ps, 3) 1 ps, 4) 1.5 ps, 5) 2 ps.



Şəkil 7.3.5. 600°C temperaturda BN kristal strukturunda rəqsin dalğa mexanizmi

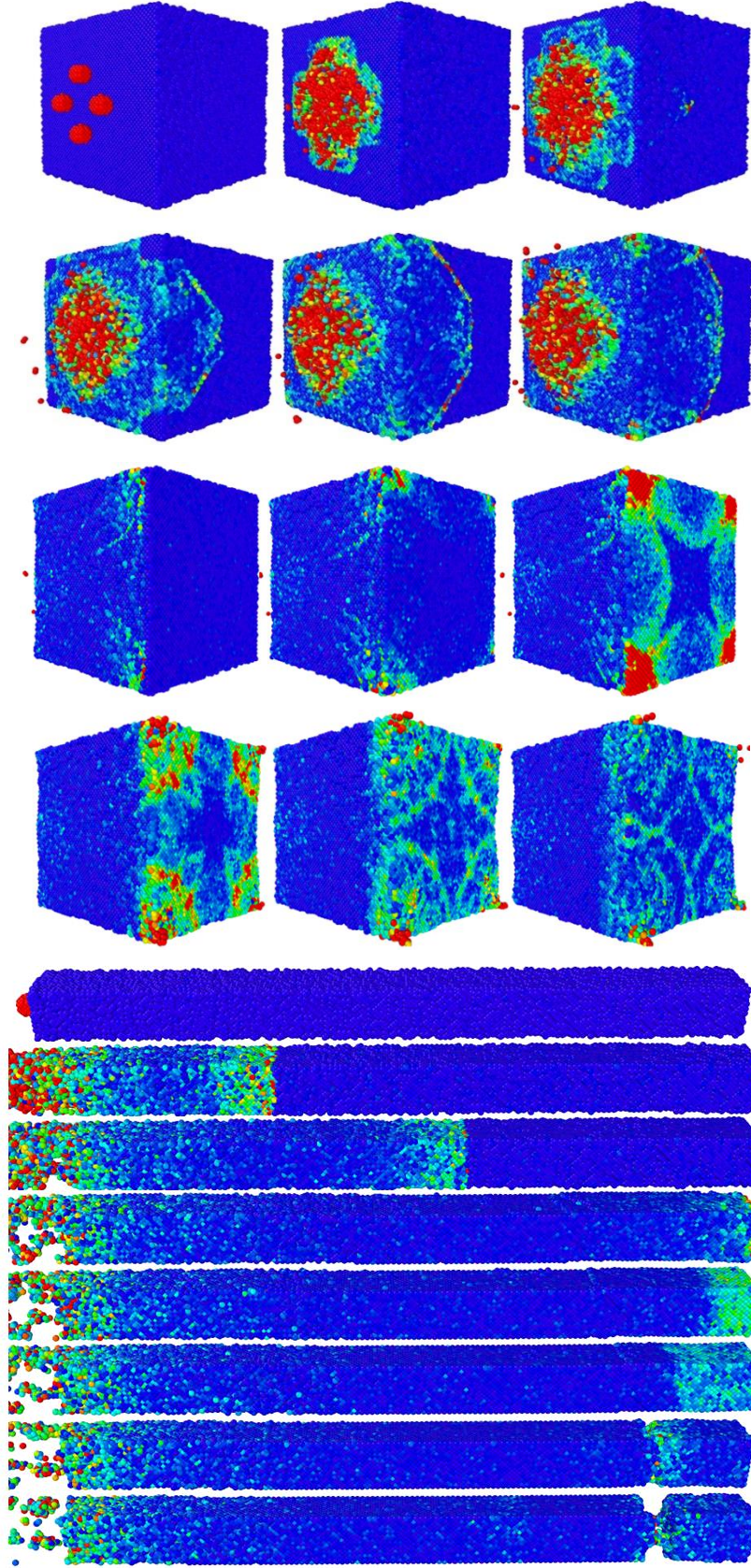
Şəkil 7.3.5-də BN kristal quruluşunun 600°C temperaturda hərəkət dinamikası verilmişdir. Temperaturun təsiri altında kristal strukturun rəqsləri molekulyar dinamikada istifadə olunan potensialların təyini üçün vacib

qiymətlərdəndir. Molekulyar dinamikanın BN kristalında 0.5 ps, 1 ps, 2 ps, 5 ps, 10 ps və 20 ps müddətində 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ağır ionları ilə qarşılıqlı təsir göstərilmişdir (şəkil 7.3.6). Zamandan asılı olaraq nöqtələrində enerji ötürülməsi ilə hədəf kristalda kraterlərin yaranmasının dinamikası baş verdiyi məlum olmuşdur.



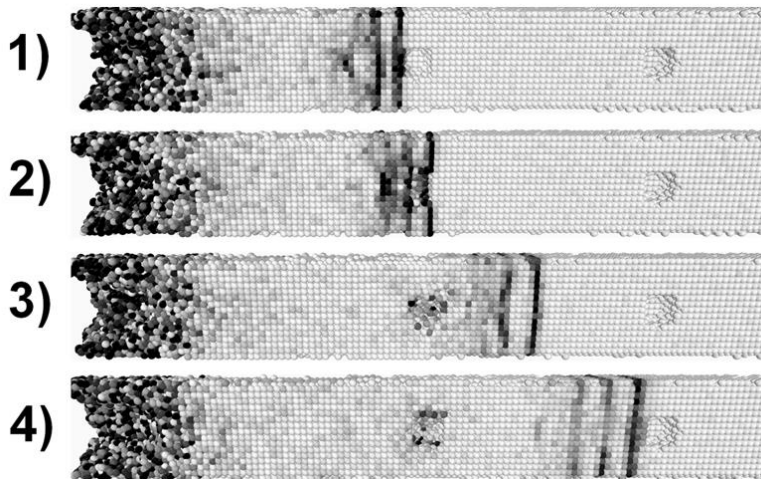
Şəkil 7.3.6. 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ sürətli ağır ionlar ilə şüalanmış BN kristalının səth morfologiyası; 1) 0.5 ps, 2) 1 ps, 3) 2 ps, 4) 5 ps, 5) 10 ps, 6) 20 ps.

Şəkil 7.3.7-də 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ sürətli ağır ion seli ilə şüalanmış BN kristalında atomlar strukturu səth morfologiyasında artan rəqsi hərəkəti, qarşılıqlı təsir zamanı istilik sahəsinin formalaşması, zamandan asılı olaraq istiliyin strukturun dərinliyi boyu paylanması, dalğa enerjisinin mexanizmi göstərilmişdir. Elektron-fanon qarşılıqlı təsir əmsalının istilik sahəsi üçün $g=3.15 \times 10^{12} \text{ Vt}/(\text{sm}^3 \times \text{K})$, radial enerji paylanma parametrinin 2.50 nm təyin edilmişdir. İstilik dinamikasının kraterin mərkəzində 1000 K ətrafında olması, temperatur təsiri nəticəsində iynə dəliklərin formalaşması məhz bir başa yüksək kinetik enerjiyə malik hissəciyin struktura verilməsi əsasında izahının verilməsi təcrübələrlə ən yaxın uyğunluğu təşkil edir.



Şəkil 7.3.7. $3.3.8 \times 3.8 \times 72$ nm BN-in sahəsində 167 MeV enerjili sürətli $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ağır ionlarının qarşılıqlı təsirin molekulyar dinamikası və səthində istilik sahəsinin paylanma kinetikasi.

Şəkil 7.3.8-də 5.4 ps, 6 ps, 8 ps və 10 ps zaman intervalında 167 MeV enerjili $^{132}\text{Xe}^{26+}$ sürətli ağır ionları ilə şüalandırılmış BN kristal strukturunda sərbəst dinamikasının və dalğasının formalaşma mexanizmi göstərilmişdir.



Şəkil 7.3.8. 167 MeV enerjili sürətli $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ağır ionlarının BN kristal strukturunu ilə qarşılıqlı sərbəst dinamikasının və dalğasının formalaşma mexanizmi; 1) 5.4 ps, 2) 6 ps, 3) 8 ps, 4) 10 ps.

7.4 Təcrübi nəticələrin müzakirəsi

Təqdim olunan dissertasiya işinin əsas istiqaməti olan borlu birləşmələr B_4C , B_6Si , BN və B_2O_3 üzərində sürətli neytron, elektron, sürətli ağır ion və qamma şüaların təsiri nəticəsində baş verən struktur çevrilmələri və termofiziki xassələrin qarşılıqlı müzakirəsi və mexanizmlərinin təhlili yerinə yetirilmişdir. Elektrostatik neytral neytron selinin kristalın atom nüvələri ilə qarşılıqlı təsirin mürəkkəb mexanizmi, qeyri elastiki səpilmə nəticəsində baş verən proseslər, strukturunu təşkil edən atomların nüvələri tərəfindən tutulan neytronun hesabına yeni izotoplara çevrilmə və nüvə həyəcanlaşmasına səbəb olmuşdur.

Baş verən bütün proseslər fonunda yaranan sərbəst elektronlar və qamma kvantlar struktur nizamlılığında müəyyən dəyişikliklər yaradır və tamamlanmış prosesdə termofiziki və qəfəs parametirlərin dəyişməsi baş verir. Sürətli neytron selinin təsiri nəticəsində B_2O_3 və BN kristalında termofiziki xassələr və B_2O_3 kristalının aktiv

səth morfologiyası tərəfindən zəyif qarşılıqlı təsirdə olan su molekullarının parçalanma mexanizminə baxılmışdır.

Aydın olmuşdur ki, 1.3×10^{13} n/sm² neytron sel sıxlığında nano kristallik B₂O₃ üzərində absorbsiya olunmuş su molekullarının parçalanma mexanizmi və yeni funksional qrupların formalaşması baş verir. Sürətli neytronların yüksək sel sıxlığında məruz qaldıqdan sonra B₂O₃ səthində formalaşan yeni funksional qrupların qüvvə sabitinin maksimum qiyməti 376.1 N/kq təyin olunmuşdur.

Raman spektroskopik tədqiqat nəticələrinə əsaslanaraq nano kristallik B₂O₃ kristalın ölçü neytron süalından asılı olaraq 90 nm-dən 138 nm-ə qədər artır, formalaşan yeni OH qrupları, B-OH xarakterik rabitələri infraqırmızı analiz nəticələri ilə təsdiq etmiş olur.

Termofiziki xassələrin öyrənilməsi B₂O₃ və BN kristalları üzərində yerinə yetirilmişdir. B₂O₃ kristalının istilik selinin spektri $100 \leq T \leq 800$ K temperatur intervalında müxtəlif sürətli neytron selindən asılılığını əhatə edir. Seçilmiş temperatur intervalında B₂O₃ kristalının bütün termofiziki xassələri tədqiq olunmuşdur. Məyyən olunmuşdur ki, neytron seli nano kristallik səthində absorbsiya olunmuş su molekullarının (H-OH və B-OH rabitələri) mərhələli parçalanmasını həyata keçirir.

Mərkəzi piki 443 K və 460 K temperaturda olan dublet effektlərin sahə enerjisinin qiyməti 70-800 mC aralığında dəyişir. Həmçinin 460-580K temperatur intervalında OH qrupunun mərhələli parçalanması aşkar olunmuşdur. Termodinamik funksiyaların qiyməti $100 \leq T \leq 800$ K temperatur intervalında 1.0×10^{15} n/sm² neytron selində entalpiya üçün maksimum 199 C/q, entropiyanın 0.48 C/q və Gibbs sərbəst enerjisinin qiyməti 155 C/q-a qədər artması müəyyən olunmuşdur.

Məlumdur ki, şüalanmanın təsirinə məruz qalmış hər bir struktura müxtəlif tip defektlərin formalaşma mexanizmi baş verir. Sürətli neytron selinin təsir ilə bor nitrid kristalında Vigner enerjisinin qiyməti müəyyən olunmuş və neytron selindən asılı olaraq kinetika müəyyən olunmuşdur. Neytron selindən asılı olaraq Vigner enerjisi 400 C/q qədər artır, 1220 K qədər bor nitrid kristalında 56-57.89 eV/atom müəyyən olunmuşdur.

Yüksək enerjili elektron seli ilə $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$ və $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ şüalandırılmış bor karbid kristalının struktur analizi yerinə yetirilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, otaq temperaturunda aparılan təcrübələrin nəticələri bor karbid kristalı R-3m fəza qrupuna, (B₁₂)CBC kristallik quruluşa malikdir. Elektron seli B₄C kristalında kiçik dəyişikliklərdən başqa struktur faza keçidi yaratmır. Qəfəs parametirlərinin qiyməti $a=5.62922 \text{ Å}$, $c=12.13944 \text{ Å}$ şüalanmamış halda bor karbidi xarakterizə edərsə, $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$ və $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ sel sıxlıqlarında $a=5.624 \text{ Å}$, $c=12.126 \text{ Å}$ qədər azalır. Şüalanma selindən asılı olaraq qəfəs parametrləri elektron selinn sıxlığından asılılıq qanunauyğunluğu müəyyən olunmuşdur. Rəngli xətlər mexanizmi ilə kiçik enerjili rabitələrin yüksək enerjili rabitələrlə səthin müəyyən dərinliklərində əvəzlənməsi göstərilmişdir.

Bor karbid kristalı ilk dəfə yüksək elektron selinin təsiri altında B1, C11, B2, B3, C1 və B11 kordinatları üzrə yerləşən atomların vəziyyəti müəyyən olunmuşdur. Struktur quruluşda mövcud B-B, B-C və C-C atomlar arasındakı məsafənin orta qiyməti $d(B-B)=12.138 \text{ Å} - 12.126 \text{ Å}$, $d(C-C) = 5.628 \text{ Å} - 5.624 \text{ Å}$ dəyişdiyi aşkar olunmuşdur. Digər tərəfdən struktur quruluşda C-B-C, C-B-B, B12, B₁₁C zəncirlərinin on bir (beş A_{1g} və altı E_g) aktiv Raman modalarının simmetriyası müəyyən olunmuşdur. Bor karbidin mövcud struktur birləşmələri ilə B_{10.37}C, B_{8.52}C, B_{7.91}C, B_{6.3}C və B_{4.3}C müqayisədə tədqiq olunan (B12)CBC kristal quruluşuna daha yaxın olduğu təsbit olunmuşdur. Elektron selinin artması ilə Raman spektrlərində intensivliyin azalması qismən səth morfologiyasında amorflaşma mexanizminin baş verdiyini və yaxud təyin olunmuş rabitələr zəncirində uzaq nizamlılığın pozulması kimi qiymətləndirmək mümkündür. Raman tədqiqatları nəticəsində əsas kimyəvi rabitələr arasında qarşılıqlı təsir qüvvəsinin qiyməti müəyyən olunmuşdur.

Termofiziki xassələr, istilik seli və istilik tutumunun dəyişməsi mikro və nano kristallarda (B₄C, B₆Si, BN B₂O₃) $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$ və $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron sel sıxlıqlarında öyrənilmişdir. B₄C kristalında istilik selinin yayılması $T < 146 \text{ K}$ zəyif, $T > 146 \text{ K}$ başlayaraq sürətli fazada dəyişməsi müəyyən olunmuşdur. 146 K qiymətinin bor karbid kristalında istilik selinin keçid temperaturu kimi qeyd etmək

mümkündür. Bor karbid kristalından fərqli olaraq B_6Si kristalında istilik selinin $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında keçid qiyməti yoxdur, istilik selinin ötürülməsi bir mexanizimlidir.

İstilik tutumunun qiyməti B_4C üçün iki fazada, B_6Si kristalı üçün bir fazada xətti artması müşahidə olunmuş və riyazi ifadələri müəyyən olunmuşdur. Müxtəlif elektron seli ilə şüalandırılmış B_4C kristalında $T < 146$ K istilik tutumunun qiyməti $0.017 \text{ C/q} \times \text{K}$, $T > 146$ K-dən sonra $0.021-0.060 \text{ C/q} \times \text{K}$ intervalında, B_6Si kristalında $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında $0.005-0.021 \text{ C/q} \times \text{K}$ aralığında xətti artması müşahidə olunmuşdur. BN və B_2O_3 kristalları üçün istilik selinin və istilik tutumunun dəyişmə kinetikasi $100 \leq T \leq 300$ K temperatur aralığında müəyyən olunmuşdur. Əlavə olaraq yüksək elektron selinin təsiri altında termofiziki parametirlərin dəyişməsi BN və B_2O_3 kristalı üçün ilk dəfə tədqiq olunmuşdur. Müəyyən olunmuşdur ki, verilmiş temperatur intervalında BN və B_2O_3 kristallarında istilik selinin spektri iki hissəyə bölünür. $T < 150$ K zəyif və $T > 150$ K sürətli istilik selinin paylanması müşahidə olunmuşdur. Temperaturun 150 K qiyməti BN və B_2O_3 kristalı üçün istilik selinin keçid temperaturu adlandırmaq mümkündür. Xüsusi istilik tutumunun qiyməti istilik selinin dəyişmə kinetikasi ilə eyni mexanizimli olub şüalanmış BN kristalında $0.2 \text{ C/q} \times \text{K}$, fərqli elektron selində $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$ $0.5 \text{ C/q} \times \text{K}$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$ $0.62 \text{ C/q} \times \text{K}$ və $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ $0.81 \text{ C/q} \times \text{K}$ müəyyən olunmuşdur.

B_2O_3 nano kristalında şüalanmamış halda istilik tutumu $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında $0.015-0.022 \text{ C/q} \times \text{K}$, $4.16 \times 10^{16} - 1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron sel sıxlıqlarında $0.001- 0.01 \text{ C/q} \times \text{K}$ intervalında dəyişir. İstilik sel funksiyasından əsas termofiziki parametirlərə istilik keçiriciliyi və termik diffuziyanın qiymətləri müxtəlif elektron seli üçün təyin olunmuşdur.

B_4C kristalında 120 K temperaturda istilik keçiriciliyinin qiyməti $0.0247 \text{ W/sm} \times \text{K}$, $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$, $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ sel sıxlıqlarında $0.0243 \text{ Vt/sm} \times \text{K}$, $0.02420 \text{ Vt/sm} \times \text{K}$ və $0.02401 \text{ Vt/sm} \times \text{K}$, $120 \leq T \leq 146$ K intervalda istilik keçiriciliyin xətti artması və 300 K temperaturda istilik keçiriciliyinin qiyməti $0.0844 \text{ Vt/sm} \times \text{K}$ müəyyən olunmuşdur.

B_6Si kristalında $120 \leq T \leq 300K$ temperatur intervalında istilik keçiriciliyinin qiyməti $0.0175-0.035 \text{ Vt/sm} \times K$, $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$, $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron selində $0.015-0.0412 \text{ Vt/sm} \times K$, $0.010-0.0322 \text{ Vt/sm} \times K$, $0.009-0.0335 \text{ Vt/sm} \times K$ qiymətləri təyin olunmuşdur. Termik diffuziyanın qiyməti $120 \leq T \leq 300K$ temperatur intervalında B_4C kristalı üçün $0.791-0.806 \text{ sm}^2/\text{san}$, $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$, $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron selində şüalanmadan sonra $0.808-0.794 \text{ sm}^2/\text{san}$, $0.798-0.716 \text{ sm}^2/\text{san}$, $0.767-0.690 \text{ sm}^2/\text{san}$ müəyyən olunmuşdur. $120 \leq T \leq 300K$ temperatur intervalında B_6Si kristalının termik diffuziya qiyməti $0.576-0.591 \text{ sm}^2/\text{san}$, $4.16 \times 10^{16} \text{ sm}^2$, $1.20 \times 10^{17} \text{ sm}^2$, $1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^2$ elektron seli üçün $0.577-0.579 \text{ sm}^2/\text{san}$, $0.54-0.559 \text{ sm}^2/\text{san}$, $0.44-0.566 \text{ sm}^2/\text{san}$ təyin olunmuşdur.

Sürətli $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ağır ionları ilə baş verən şüalanmanın yaratdığı radiasiya təsirlərinin təməl prinsiplərindən olan səpilmə əmsalının riyazi qanunauyğunluğu, korroziya əmsalının qiyməti araşdırılmışdır. Ağır ionlarla şüalanma zamanı baş verən unikal səth morfologiyasının dəyişməsi $3.83 \times 10^{14} \text{ ion/sm}^2$ ion selində geniş tədqiq olunmuşdur.

Müəyyən olunmuşdur ki, tədqiqat kristallarının səthində $^{132}\text{Xe}^{26+}$ ionlarının təsiri nəticəsində gözlənilən qabarmaların formalaşma mexanizmi öyrənilmişdir. Mikrostrukturun 4.8 mkm intervalında yerinə yetirilən tədqiqatlarda formalaşan böyük qabarmaların kiçik qabarmaları absorbsiya etməsi və nəticədə daha böyük həcmli qabarmaların yaranmasına səbəb olur. Çox komponentli birləşmələrdə bu tip prosesləri dislokasiya formalaşması kimi müəyyən olunur.

İon şüalanmanı təsiri altında tədqiqat kristallarında termofiziki xassələri kiçik və yüksək temperatur aralığında tədqiq olunmuşdur. $120 \leq T \leq 300K$ temperatur intervalında kristalın istilik seli funksiyasının təhlili göstərir ki, BN kristalında $T < 150K$ qiymətlərdə daha zəyif, $150 \leq T \leq 300K$ intervalında sürətli fazada paylanma olduğu halda B_2O_3 eyni dəyişmə müşahidə olunmur. İstilik tutumunun qiyməti B_2O_3 şüalanmamış və sürətli ionların təsirinə məruz qaldıqda sonra çox kiçik qiymət ətrafında $0.053 \text{ C/q} \times K$ dəyişir. Temperaturdan asılı olaraq istilik tutumu BN və B_2O_3 kristalları üçün riyazi tənlikləri hər bir şüalanma seli üçün ayrı-ayrılıqda müəyyən olunmuşdur.

B_6Si və B_4C kristallarında $120 \leq T \leq 300K$ temperatur aralığında istilik selinin dəyişməsi eyni ilə elektron selinin təsiri altında baş verən termofiziki prosesə yaxındır. İstilik tutumunun qiyməti tədqiq olunmuş temperaturlarda sürətli ion selinin təsiri altında $0.015-0.06 C/q \times K$, B_6Si kristalında $0.005-0.02 C/q \times K$ dəyişməsi müşahidə olunmuşdur. Elektron selindən fərqli olaraq sürətli ion şüalanmadan sonra istilik tutumunun qiyməti standart qiymətindən fərqli olaraq azalır ki, bərk cisimlərdə müşahidə olunan fiziki effektlərlə uyğunluq təşkil edir. Xüsusi istilik tutumunun dəyimə kinetikasi göstərir ki, $120 \leq T \leq 300K$ temperatur intervalında B_4C kristalında 3.59 dəfə, B_6Si kristalında 4.42 dəfə artır. Sürətli ion təsiri nəticəsində kiçik dəyişmə ilə xarakterizə olunur.

İstilik keçiriciliyin qiyməti $120 \leq T \leq 300K$ -də B_4C kristalı üçün $0.02-0.067 Vt/sm \times K$, B_6Si kristalı üçün $0.14-0.026 Vt/sm \times K$ müəyyən olunmuşdur. Sürətli ion selinə məruz qaldıqdan sonra B_4C kristalında qeyd olunan temperaturda $0.019-0.062 Vt/sm \times K$ intervalında, B_6Si -də $0.06-0.22 Vt/sm \times K$ dəyişməsi aşkar olunmuşdur. İstilik tutumu və istilik keçiriciliyinin məlum qiymətlərinə əsaslanaraq termik diffuziya qiyməti B_6Si və B_4C kristallar üçün təyin olunmuşdur. Termodinamik funksiyaların yüksək temperatur intervalında sürətli ionlarla şüalanmadan sonra 1200 K qiymətinə qədər müəyyən edilmişdir.

Qamma şüalanmanın təsiri altında tədqiqat kristallarında səth morfologiyası və struktur analizləri yerinə yetirilmişdir. Mikro kristalların səth morfologiyası qamma şüalanmanın təsiri altında yüksək ayırd etmə qabiliyyətinə malik elektron mikroskopla tədqiq olunmuşdur. Udulma dozasının artması kristalın səthində amorflaşma mexanizminin baş verdiyini göstərir. Nano B_2O_3 kristallarının aktiv səthinin atmosferdən su molekullarının ilə baş verən zəyif qarşılıqlı təsir nəticəsində $B(OH)$ fazasının meydana gəlməsi müşahidə olunmuşdur. Ümumi yanaşmada səth morfologiyasının və element xəritələnmə dəyişmədiyi təcrübi qeyd olunsada yüksək udulma dozalarında oksigen elementinin kütləcə artması qeyd olunmuşdur. B_4C kristalının Al_2O_3 nümunəsi ilə əmələ gətirdiyi kompozit parçalanmayan SS321 markalı polad üzərində örtük təbəqəsinin sıxlığından asılı olaraq ^{60}Co və ^{137}Cs qamma

mənbələrə ilə radiasiya davamlıq testi yerinə yetirilmişdir. Təcrübələrdən müəyyən olunmuşdur ki, $B_4C+Al_2O_3$ kompozit təbəqəsinin qalınlığının artırılması ilə qamma mənbələrdən fiziki mühafizə 7.64 dəfə azalma müşahidə olunmuşdur. Müxtəlif udulma dozalarının təsiri altında B_4C bə B_6Si kristallarında rentgen difraksiya metodu ilə quruluş analizi yerinə yetirilmişdir. Difraksiya spektrlərindən müəyyən olunmuşdur ki, B_4C R-3m fəza qruplu romboedrik simmetriyaya malikdir. Udulma dozasından asılı olaraq qəfəs parametirlərinin qiymətləri, nisbəti və amorflaşma dərəcəsi müəyyən olunmuşdur.

ƏSAS NƏTİCƏLƏR

1. 1 MeV enerjili sürətli neytron seli B_2O_3 kristallarının aktiv səthi tərəfindən tutulan su molekulları ilə qarşılıqlı təsiri nəticəsində sərbəst OH funksional qrupları yadır. Neytron selinin maksimum 1.0×10^{15} n/sm² qiymətində B-OH hidrokسيد qrupları B_2O_3 kristallarının səthində anion və kation halda mövcuddur, neytron selinin qiymətindən asılı olmayaraq kristalın səthində formalaşan və yeni qrupların qüvvə sabitləri B-O rabitəsi üçün 24.2-126.0 N/kq, B-OH qarşılıqlı təsiri üçün 67.2-376.1 N/kq və sərbəst OH qrupları üçün 75.4-125.8 N/kq müəyyən edilmişdir
2. Sürətli neytron selinin təsiri altında B_2O_3 kristallarında B-O kimyəvi rabitələrin qırılması hesabına lokal amorflaşma prosesi baş verir və kristallik ölçünün qiymətində 90 nm-dən 138 nm-ə qədər artma aşkar olunmuşdur.
3. 4.0×10^{12} n/sm², 8.0×10^{12} n/sm², 1.3×10^{13} n/sm² 4.0×10^{14} n/sm² və 1.0×10^{15} n/sm² neytron seli ilə şüalanmadan sonra $100 \leq T \leq 800$ K temperatur intervalında B_2O_3 kristalında müşahidə olunan dublet effektlərin enerjisi 376 C/q, $B_2O_3 \leftrightarrow HBO_2 \leftrightarrow B(OH)_3$ mexanizmilə baş verən faza keçidinin enerjisi 265 C/q təyin olunmuşdur. Müəyyən olunmuşdur ki, $100 \leq T \leq 800$ K temperatur intervalında şüalanmamış B_2O_3 kristal üçün entalpiyanın qiyməti 118.095 C/q, müxtəlif neytron seli ilə şüalandırıldıqda entalpiyanın qiyməti 201.028 C/q qədər artır.
4. Müxtəlif intensivlikli neytron seli ilə şüalandırılmış bor nitrid kristalında $300 \leq T \leq 1300$ K temperatur intervalında Viqner enerjisinin qiymətləri 95.8 C/q, 93.89 C/q və 1002 K-də 94.49 C/q müəyyən olunmuşdur. 1.0×10^{15} n/sm² neytron selində bor nitrid kristalında mərkəzi piki 969 K-də formalaşan effektin enerji üçün 373.609 C/q müəyyən edilmişdir.
5. Elektron selinin intensivliyindən asılı olaraq B_4C və B_6Si kristalları üçün xüsusi istilik tutumunun qiyməti temperaturun aşağı və yüksək oblastında müəyyən olunmuş və riyazi tənlikləri alınmışdır. 120 K-də B_4C kristalında istilik keçiriciliyinin qiyməti 0.0247 Vt/sm×K, maksimum elektron selində şüalanmadan sonra istilik keçiriciliyinin qiymət 0.0240 Vt/sm×K, B_6Si kristalının 120 K-də istilik keçiriciliyinin qiyməti 0.0175 Vt/sm×K, 1.03×10^{18} sm² elektron selində 0.009 Vt/sm×K təyin olunmuşdur. B_4C

kristalının termik diffuziyası 100-300 K temperatur aralığında 0.791-0.806 sm²/san, elektron selindən asılı olaraq 0.808 sm²/san qədər artır. B₆Si kristalları üçün göstərilən temperatur aralığında termik difuziyanın qiymətinin 0.591 sm²/san müəyyən olunmuşdur.

6. 167 MeV enerjili sürətli ağır ¹³²Xe²⁶⁺ ionlarının təsiri altında B₂O₃, B₄C, B₆Si və BN kristallarının səth morfologiyasında nano ölçülü iynə formalı dəşiklərin formalaşması müşahidə olunmuş və dəşiklərin ölçüləri 18-20 nm aralığında dəyişməsi müəyyən olunmuşdur. Kristalların səthində qabarmaların qarşılıqlı birləşməsi və böyümə sürəti təyin olunmuşdur. Ağır ionlarla şüalanmış kristallarda qabarmaların ölçüsü şüalanmamış kristallardan 2.2 dəfə böyük olması aşkar olunmuşdur. Ağır ionların B₄C hədəf kristalı ilə qarşılıqlı təsiri zamanı elektron-fonon əmsalının qiyməti 8.1×10^{12} Vt/(sm³×K), elektron-fonon qarşılıqlı təsirin istilik sahəsi 4.05×10^{12} Vt/(sm³×K), radial enerji paylanma parametri 2.8 nm olması müəyyən olunmuşdur.

7. 167 MeV enerjili sürətli ağır ¹³²Xe²⁶⁺ ionlarla şüalandırılmış BN və B₂O₃ kristallarında $100 \leq T \leq 300$ K temperatur aralığında xüsusi istilik tutumunun qiyməti 0.0053 C/K×q, həmin temperatu aralığında B₄C kristalı üçün xüsusi istilik tutumunun qiyməti BN və B₂O₃ kristallarının qiymətindən 3.59 dəfə və B₆Si kristalı üçün 4.42 dəfə çox olması müəyyən edilmişdir.

8. 167 MeV enerjili sürətli ağır ¹³²Xe²⁶⁺ ionları ilə şüalandırılmış B₄C kristalında $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında termodiffuziyanın qiyməti 1.19 dəfə, B₆Si kristalında 1.45 dəfə artır. 167 MeV enerjili ¹³²Xe²⁶⁺ ionları şüalanmadan sonra B₂O₃ kristalında $100 \leq T \leq 700$ K temperatur intervalında istilik tutumu və termodinamik funksiyalar zəyif sürətlə artma qanunauyğunluquna tabe olduğu müəyyən olunmuşdur.

9. Müxtəlif udulma dozalı qamma-kvantlarla şüalandırılmış B₄C, B₆Si və BN kristallarının səth morfologiyasında 15-22 nm ölçülü lokal amorflaşma izləri müəyyən olunmuşdur. Kimyəvi tərkibin elementə görə xəritələnmə analizi əsasında qamma-kvantlarla şüalandırılmış B₄C, B₆Si və BN kristallarında B, C, Si, və N atomlarının qeyri bircins paylanması və 1.4% oksigenin olması aşkar edilmişdir.

10. Bor karbid kristalının udulma spektrlərində aktivləşmə enerjisi 1.89 eV olan F,

enerjisi 0.1 eV olan iki M rəng mərkəzləri aşkar edilmişdir. Qamma şüalanma dozasının artması ilə yeni F⁺ rəng mərkəzlərinin formalaşması müəyyən olunmuşdur. Qamma kvantlarla şüalanmış B₄C və B₆Si kristallarında oksidləşmənin kritik temperaturu 970 °C, yüksək temperaturlarda kristalların səthində maye B₂O₃ təbəqəsinin və SiO₂ amorf kristallarının formalaşması müəyyən olunmuşdur. Şüalanmamış kristallarda oksidləşmə dərəcəsi 3.5 %, şüalandırılmış kristallarda 8.2 % qədər artır. Səthdə yaran oksidləşmə dərinliyi şüalanmanın udulma dozası və temperaturdan asılı olaraq 60 nm olması müəyyən olunmuşdur.

DİSSERTASIYANIN ƏSAS NƏTİCƏLƏRİ ÜZRƏ ÇAP OLUNMUŞ ELMİ İŞLƏRİN SİYAHISI

1. R.Q. Qəribov, M.N. Mirzəyev, Bor karbid birləşməsinin mikrostrukturu və termik analizi, AMEA, Xəbərləri, Fizika-Texnikavə Riyaziyyat elmləri seriyası, XXXVI, №5, (2016) s.119-122.
2. M.N. Mirzəyev, R.Q. Qəribov, A.A. İbrahimov, B₆Si, B₄C və BN birləşmələrinin səth morfologiyasının tarayıcı elektron mikroskop ilə tədqiqi, Journal of Qafqaz University-Physics, №4(1), (2016) s.80-84
3. M.N. Mirzəyev, X.F. Məmmədov, R.Q. Qəribov, Q.R. Allahverdiyev, Ş.Ə. Hübətov, Termik işlənmə sürətindən asılı olaraq B₆Si və B₄C birləşməsinin səth morfologiyası, mikrotərkibi və istilik xassələrinin tədqiqi, Bakı Universitetinin xəbərləri, №1 (2017) s.199-207.
4. M.N. Mirzayev, S.H. Jabarov, E.B. Asgerov, R.N. Mehdiyeva, T.T. Thabethe, S. Biira, N.V. Tiep, Crystal structure changes and weight kinetics of silicon-hexaboride under gamma irradiation dose, Results in Physics. 10 (2018) 541-545.
5. M.N. Mirzayev, Kh.F. Mammadov, R.G. Garibov, E.B. Askerov, Thermophysical properties of boron carbide irradiated by ionizing radiation, High Temperature 56(3) (2018) 374–377.
6. M.N. Mirzayev, R.N. Mehdiyeva, R.G. Garibov, N.A. Ismayilova, S.H. Jabarov, Influence of gamma irradiation on the surface morphology, XRD and thermophysical properties of silicide hexaboride, Modern Physics Letters B Vol. 32, №14, 1850151, 2018.
7. M.N. Mirzayev, R.N. Mehdiyeva, Kh.F. Mammadov, S.H. Jabarov, E.B. Asgerov, Calculation of the thermal parameters of boron silicide by differential scanning calorimetry, Physics of Particles and Nuclei Letters (Physics of Solid State and Condensed Matter), 2018, Vol. 15, №. 6, pp. 673–677
8. M.N. Mirzayev, Kh.F. Mammadov, V.A. Skuratov, E. Demir, S.H. Jabarov, N.A. Ismayilova, S. Biira, B. Abdurakhimov, E. Popov, Oxidation kinetics and

- thermophysical properties of gamma irradiated silicon hexaboride, *Journal of Alloys and Compounds*, 801 (2019)151-157.
9. M.N.Mirzayev, E. Demir, K. Mammadov, R. Mehdiyeva, S. Jabarov, A.B. Tugrul, S.Biira, N. Tiep, T.Thabethe, Thermodynamics kinetics of boron carbide under gamma irradiation dose, *International Journal of Modern Physics B*, Vol. 33, No. 9 (2019) 1950073.
 10. M.N. Mirzayev, R.N. Mehdiyeva, S.Z. Melikova, S.H. Jabarov, T.T. Thabethe, S. Biira, M.A. Kurbanov, N.V. Tiep, Formation of Color Centers and Concentration of Defects in Boron Carbide Irradiated at Low Gamma Radiation Doses, *Journal of the Korean Physical Society*, Vol. 74, No. 4, 2019, pp. 363-367.
 11. Matlab N. Mirzayev, Oxidation kinetics of boron carbide ceramic under high gamma irradiation dose in the high temperature, *Ceramics International*, 46 (3), 2816-2822, 2020.
 12. Mirzayev, M.N., Demir, E., Mammadov, K.F. et al. Amorphisation of boron carbide under gamma irradiation. *Pramana-Journal of Physics*, 94, 110 (2020).
 13. Matlab N. Mirzayev, Study thermodynamic assessment of the B-C and B-Si binary systems with swift heavy ions and high intense electron beam irradiation at the low temperature, *Modern Physics Letters B*, 2050395, 2020.
 14. Matlab N. Mirzayev, High-flux neutron irradiation of boron trioxide analyzed with Raman and FTIR spectroscopy, *International Journal of Modern Physics B*, 34 (18), 2050160, 2020.
 15. Matlab N. Mirzayev, E. Popov, E. Demir, B.A. Abdurakhimov, D.M. Mirzayeva, V.A. Sukratov, A.K. Mutali, V.N. Tiep, S. Biira, M.Yu. Tashmetov, K. Olejniczak, O. Kristavchuk, Thermophysical behavior of boron nitride and boron trioxide ceramics compounds with high energy electron fluence and swift heavy ion irradiated, *Journal of Alloys and Compounds*, 834 (2020) 155119.

16. Matlab N. Mirzayev, Simultaneous measurements of heat flow rate and thermal properties of nano boron trioxide under neutron irradiation at the low and high temperature, *Vacuum*, 173, 109162, 2020.
17. M.N Mirzayev, B.A Abdurakhimov, S.H. Jabarov, M.Yu. Tashmetov, E. Demir, N.V. Tiep, N.A. Ismayilova, Y.I. Aliyev, E. Popov, D.M. Mirzayeva, S.I. Karaaslan, G.I. Georgiev, Effect of high intense electron beam irradiation on structural and Raman properties of boron carbide micro powder, *International Journal of Modern Physics B*, 34 (04) (2020) 2050008.
18. Matlab N. Mirzayev, Heat transfer of hexagonal boron nitride (h-BN) compound up to 1 MeV neutron energy: Kinetics of the release of wigner energy, *Radiation Physics and Chemistry*, 180 (2021) 109244.
19. Matlab N Mirzayev, Alexander A Donkov, Evgeni A Popov, Ertugrul Demir, Sakin H Jabarov, Levan S Chkhartishvili, Samuel A Adejo, Aleksandr S Doroshkevich, Alexey A Sidorin, Asif G Asadov, Thabsile T Thabethe, Mayeen U Khandaker, Sultan Alamri, Hamid Osman, Alex V Trukhanov, Sergei V Trukhanov, Modeling and X-ray analysis of defect nanoclusters formation in B₄C under ion irradiation, *Nanomaterials*, 12(15) (2022) 2644.
20. M.N. Mirzayev, Kh. Mammadov, R.N. Mehdiyeva, R.G. Garibov, BA. Skuratov, N.V. Tiep, E.B. Askerov, E. Demir, A.B. Tugrul, S.H. Jabarov, Study of atom dynamics of the (SS GRADE 321) +B₄C+Al₂O₃ compounds under heavy ion irradiation, *Journal of Radiation Researches*, 2018, No2, 5, pp.173-178
21. M.N. Mirzayev, E. Popov, E. Demir, B. Abdurakhimov, D.M. Mirzayeva, V.N. Tiep, G.I. Georgiev, A.K. Mutali, M.B. Mamatova, Thermophysical behavior of nano boron trioxide under high intense electron beam irradiation, *Advanced Physical Research*, 1 (2), 63-69, 2019
22. O.A. Səmədov, M.N. Mirzəyev, Sürətli ağır ion, neytron, elektron və qamma şüalanmanın təsiri nəticəsində borlu binar birləşmələrdə defekt əmələgəlmə mexanizmi və termofiziki effektlər, *AJP Fizika*, XXVIII, №1, (2022) s.18-30.

23. M.N. Mirzayev, Kh.F.Mammadov, R.N.Mehdiyeva, S.H.Jabarov, E.B.Asgerov, S.M. Akberova, Chances crystal structure of silicon hexaboride irradiated under gamma ray, 18th International Conference on Radiation Physics and Chemistry of Condensed Matter, EFRE-2018, September 16-22, Tomsk, Russia, 2018. P.528
24. M.N. Mirzayev, Kh.F. Mammadov, R.N. Mehdiyeva, Microstructural, macroscopic length and lattice parameters changes in gamma-irradiated boron carbide. Modern Trends in Condensed Matter Physics, MTCMP – 2018, September 24-26, Baku, Azerbaijan, 2018. P.118
25. Mirzayev M.N, Demir E, Mirzayeva D.M, Abdurakhimov B, Assessment of oxidation kinetics of boron carbide under gamma irradiation conditions, The Ninth International Conference "Modern Problems of Nuclear Physics and Nuclear Technologies", September 24-27, Tashkent, Uzbekistan, 2019, p. 262.
26. A. Dalcalı, I. Koçak, M.N. Mirzayev, E. Demir, V. Uglov, V. Shymanski, B. Büyük, Boron mine and assesment of Regional Development (3rd International Regional Development and The Role of Universities Symposium) November 21st-22nd, 2019/ Bandırma-Balıkesir, Turkey
27. E.P. Popov, A.N. Chernikov, A.I. Beskrovnyi, J. Waliszewski, M.N. Mirzayev, Cryostat for cooling samples in the study of low-temperature structural and magnetic phase transitions by neutron diffraction, Journal of Physics: Conference Series 1492 (1), 012054, 2020.
28. M.N. Mirzayev, Kh.F. Mammadov, D.M. Mirzayeva, V.A. Skuratov, E. Demir, E. Popov, Defects processes and formation of Wigner enthalpy in boron carbide under neutron irradiation, 7th International Conference on Energy Fluxes and Radiation Effects, EFRE-2020, September 14-25, Tomsk, Russia, 2020. p.459.
29. E. Demir, M.N. Mirzayev, E. Popov, D.M. Mirzayeva, An experimental study on thermal properties of boron based compounds under ionization irradiation “Multidisciplinary approaches in solving modern problems of fundamental and applied sciences” 2020, Baku, Azerbaijan.

30. Kh.F. Mammadov, M.N. Mirzayev, R. Garibov, G. Allahverdiyev, Study of the processes of changing the crystal structure of boron carbide after the destruction of a nuclear reactor as a result of earthquake, Natural disasters and human life safety, 2017
31. M.N. Mirzayev, E. Popov, A.S. Doroshkevich, E. Demir, F. Mamedov, I.G. Genov, R.N. Mehdiyeva, Z.A. Sharipov, Thermic and electrical analogy of B_4C and BN under different irradiation, «РАДИАЦИОННАЯ ФИЗИКА ТВЁРДОГО ТЕЛА» Севастополь, 05-10 июля 2021 г. p.313-315.
32. S. Makatsaria, L. Chkhartishvili, M. Mirzayev, N. Barbakadze, O. Tsagareishvili, I. Jinikashvili, R. Chedia, Nanopowder h-BN:Fe(Fe_3O_4) as ^{10}B delivery agent in BNCT, ISBB2022, the 21st International Symposium on Boron, Borides and related materials related, from 5 to 9 September 2022, Paris, France.
33. N. Gogolidze, L. Chkhartishvili, M. Mirzayev, N. Barbakadze, O. Tsagareishvili, M. Buzariashvili, O. Lekasvili, R.Chedia, Preparation of sandwich-like B_4C/W neutron-shield materials, ISBB2022, the 21st International Symposium on Boron, Borides and related materials related, from 5 to 9 September 2022, Paris, France.

İSTİFADƏ EDİLMİŞ ƏDƏBİYYAT SİYAHISI

1. Abdelghany A.M., Elbatal H.A. Effect of TiO₂ doping and gamma ray irradiation on the properties of SrO-B₂O₃ glasses // *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2013, v.379, pp.214-219
2. Abdelbagi H.A.A., Skuratov V.A., Motlounq S.V., Njoroge E.G., Mlambo M., Hlatshwayo T.T., Malherbe J.B. Effect of swift heavy ions irradiation on the migration behavior of strontium implanted into polycrystalline SiC // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2019, v.451, pp.113-121
3. Abfalterer W.P., Bateman F.B., Dietrich F.S., Finlay R.W., Haight R.C., Morgan G.L. Measurement of neutron total cross-sections up to 560 MeV // *Physical Review C*, 2001, v.63, pp.044608
4. Agayev F.G., Jabarov S.H., Ayyubova G.Sh., Mirzayev M.N., Trukhanov S.V., Trukhanova E.L., Darwish M.A., Podgornaya S.V., Vinnik D.A., Hoang T.P., Dang N.T., Trukhanov A.V. Structure and thermal properties of BaFe_{11.1}In_{0.9}O₁₉ hexaferrite // *Physica B: Condensed Matter*, 2019, v.580, pp.411772
5. Ahmed K., Dahal R., Weltz A., Lu J.J.Q., Danon Y., Bhat I.B. Metalorganic chemical vapor deposition of hexagonal boron nitride on (001) sapphire substrates for thermal neutron detector applications // *Vacuum*, 2017, v.137, pp.81-84
6. Ahmad I., et al., Substitutional carbon doping of hexagonal multi-walled boron nitride nanotubes (h-MWBNNTs) via ion implantation // *Journal of Nanoparticle Research* volume, 2014, v.16, pp.2170
7. Alekperov A.S., Jabarov S. H., Mirzayev M.N., Asgerov E.B., Ismayilova N.A., Aliyev Y.I., Thabethe T.T., Dang N.T. Effect of gamma irradiation on microstructure of the layered Ge_{0.995}Nd_{0.005}S // *Modern Physics Letters B*, 2019 v.33, pp.1950104
8. Albert B., Hillebrecht H. Boron: Elementary challenge for experimenters and theoreticians: *Angewandte Chemie - International Edition*, 2009, 326 p.

9. Aliyev Y.I., Khalilzade P.R., Asadov Y.G., Ilyasli T.M., Mammadov F.M., Ismayilova N.A., Mirzayev M.N., Jabarov S.H., Dang N.T. Behavior of thermal properties of $\text{AgCu}_{1-x}\text{Fe}_x\text{S}$ compounds under non-isothermal conditions // International Journal of Modern Physics B, 2019, v.33, pp.1950339
10. Albe K., Moller W., Heinig K.H. Computer simulation and boron nitride // Radiation Effects and Defects in Solids, 1997, v.141, pp.85-97
11. Amned F., et al. Dielectric dispersion and high field response of multilayer hexagonal boron nitride // Advanced Functional Materials, 2018, pp.1804235.
12. Anas F.I., Muhamad P, Muhammed A.M.S., Abdul A.M. Study of moderator (collimator) materials for boron neutron capture therapy (BNCT) facilities using SANS // Journal of Nuclear and Related Technologies, 2017, v.14, pp.6-15
13. Andrievski R.A. Micro and nanosized boron carbide: Synthesis, structure and properties // Russian Chemical Reviews, 2012, v.81, pp.549-559
14. Andrew D.H., Ellen E.D, Brian W.R., Shireen A. Boron-rich semiconducting boron carbide neutron detector // Japanese Journal of Applied Physics, 2005, v.44, pp.444
15. Armas B., Male G., Salanoljbat D., Chatillon C., Allibert M. Determination of the boron-rich side of the B-Si phase diagram // Journal of the Less Common Metals, 1981, v.82, pp.245-254
16. Arora M., Baccaro S., Sharma G., Singh D., Thind K.S., Singh D.P. Radiation effects on $\text{PbO-Al}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ glasses by FTIR spectroscopy // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2009, v.267, pp.817-820
17. Aryal S., P. Rulis, W.Y. Ching, Mechanism for amorphization of boron carbide B_4C under uniaxial compression // Physical Review B, 2011, v.84, pp.18
18. Ashish J., Anthonysamy S. Oxidation of boron carbide powder // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2015, v.122, pp.645-652
19. Ashton T.S., Moore A.L. Foam-like hierarchical hexagonal boron nitride as a non-traditional thermal conductivity enhancer for polymer-based composite

- materials // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2017, v.115, pp.273-281
20. Askerov B.M., Figarova S.R. Thermodynamics, Gibbs Method and Statistical Physics of Electron Gases. Pub., Springer, 2010.
 21. Atkins P., J.Paua. Physical Chemistry for the Life Sciences, New York. Oxford Univeristy Press, (2006) 256-259.
 22. Awasthi A.P., Subhash G. High-pressure deformation and amorphization in boron carbide // Journal of Applied Physics, 2019, v.125, pp.215901
 23. Avincola V. A., Grosse M., Stegmaier U., Steinbrueck, Seifert H.J. Oxidation at high temperatures in steam atmosphere and quench of silicon carbide composites for nuclear application // Nuclear Engineering and Design, 2015, v.295, pp.468-478
 24. Ayuni J.N., Halimah M.K., Talib Z.A., Sidek H.A.A., Daud W.M., Zaidan A.W., Khamirul A.M. Optical properties of ternary $\text{TeO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-ZnO}$ glass system // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 2011, v.17, pp.012027
 25. Bae J., Kim H.W., Kang I.H., Yang G., Kim J. High breakdown voltage quasi-two-dimensional beta- Ga_2O_3 field-effect transistors with a boron nitride field plate // Applied Physics Letters, 2018, v.112, pp.122102
 26. Bahri T.N.H.T.K., Wagiran H., Hussin R., Hossain I., Kadni T. Thermoluminescence properties of $\text{CaO-B}_2\text{O}_3$ glass system doped with GeO_2 // Radiation Physics and Chemistry, 2014, v.102, pp.103-107
 27. Bahatti S.S., Singh K.J. Acoustical and mechanical properties of $x\text{MnO}_{(0.9x)}\text{B}_2\text{O}_3\text{-}_{0.10}\text{Fe}_2\text{O}_3$ glass system // Journal of Pure and Applied Ultrasonics, 1994, v.16, pp.78-89
 28. Bateman F.B., Grimes S.M., Boukharouba N., Mishra V., Brient C.E., Pedroni R.S., Massey T.N., Haight R.C. Determination of the ^{29}Si level density from 3 to 22 MeV // Physical Review C, 1997, v.55, pp.133

29. Baumann T. et al. Construction of a modular large-area neutron detector for the NSCL // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2005, v.543 pp.517-527
30. Baldissarelli V.Z., Benetoli L.O.B., Cassini F.A., Souza I.G., Debacher N.A. Plasma-assisted production of carbon black and carbon nanotubes from methane by thermal plasma reform // Journal of the Brazilian Chemical Society, 2014, v.25, pp. 126-132
31. Ben-Galim Y., Wengrowicz U., Raveh A., Orion I. Gamma scintillator system using boron carbide for neutron detection // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2014, v.756, pp.62-67
32. Bhimanapati G.R., Glavin N.R., Robinson J.A. Chapter three-2D Boron Nitride: Synthesis and Applications // Semiconductors and Semimetals, 2016, v.95, pp.101-147
33. Blaich T. et al. A large area detector for high-energy neutrons // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 1992, v.314, pp.136-154
34. Blom K.J. Press formability of stainless steels // Stainless Steel, 1997, v.77, pp.213-216
35. Bose D.K., Nair K.U., Gupta C.K. Production of high purity boron carbide // High Temperature Materials and Processes, 1986, v.7, pp.133-140
36. Bratchenko M.I., Bryk V.V., Dyuldya S.V., Kalchenko A.S., Lazarev N.P., Voyevodin V.N. Comments on DPA calculation methods for ion beam driven simulation irradiations // Problems of Atomic Science and Technology, 2013, v.2, pp.11-16
37. Bray P.J., Bucholtz F., Geissberger A.E., Harris I.A. NMR studies of the structure of non-metallic glasses // Condensed Matter Physics, 1981, v.1, pp.584

38. Buyuk B., Beril T.A. An investigation on gamma attenuation behaviour of titanium diboride reinforced boron carbide–silicon carbide composites // *Radiation Physics and Chemistry*, 2014, v.97, pp.354–359
39. Burke A.R., Brown C.R., Bowling W.C., et al. Ignition Mechanism of the titanium–boron pyrotechnic mixture // *Surface Interface Analysis*, 1988, v.11, pp.353-358
40. Buchler A., Berkowitz-Mattuck J.B. Gaseous Metaborates. I. Mass-spectrometric study of the vaporization of lithium and sodium metaborates // *The Journal of Chemical Physics*, 1963, v.39, pp.286-291
41. Cao X., Yin X., Fan X., Zhao K., Luo H., Cheng L., Zhang L. High-temperature flexural properties of SiBC modified C/SiC composites // *Ceramics International*, 2014, v.40, pp.6185-6190
42. Carina H., Jens B., Ken A., Thierry B., Jean-Claude B., Jonathan C., Patrick V., Bruno G., Richard H., Jens J., Anton K., Francesco P., Christian V., Wilhelmus V., Lars H. B₄C thin films for neutron detection // *Journal of Applied Physics*, 2012, v.111, pp.104908
43. Cai Q., et al. Raman signature and phonon dispersion of atomically thin boron nitride, *Nanoscale*, 2017, v.9, pp.3059-3067
44. Caruso A.N., Dowben P.A., Balkir S., Schemm N., Osberg K., Fairchild R.W., Flores O.B., Balaz S., Harken A.D., Robertson B.W., Brand J.I. The all boron carbide diode neutron detector: Comparison with theory // *Materials Science and Engineering: B*, 2006, v.135, pp.129-133
45. Cataldo F., Iglesias-Groth S., Hafez Y. Neutron bombardment of boron carbide B₁₂C₃: A FT-IR, calorimetric (DSC) and ESR study // *Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures*, 20017, v.25, pp.371-378
46. Cataldo F., Iglesias-Groth S. Neutron damage of hexagonal boron nitride // *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 2017, v.313, pp.261-271
47. Cassabois G., Valvin P., Gil B. Hexagonal boron nitride is an indirect bandgap semiconductor // *Nature Photonics*, 2016, v.10, pp.262-266

48. Cançado L.G., et al. General equation for the determination of the crystallite size L_a of nanographite by Raman spectroscopy // *Applied Physics Letters*, 2006, v.88, pp.163106
49. Cancado L.G., et al. Quantifying defects in graphene via Raman spectroscopy at different excitation energies, *Nano Letters*, 2011, v.11, pp.3190-3196
50. Cazalas E., Hogsed M.R., Vangala S., Snure M.R., McClory J.W. Gamma-ray radiation effects in graphene-based transistors with h-BN nanometer film substrates // *Applied Physics Letters*, 2019, v.115, pp.223504
51. Chen H.M., Zheng H.Y., Liu L.B., Jin Z.P. Thermodynamic assessment of the B–C–Si system // *Journal of Alloys and Compounds*, 2009, v.481, pp.182–189
52. Chen L., Goto T., Mukaida M., Niino M., Hirai T. Phase diagram and thermoelectric property of Si-B system // *Ceramics Journal of the Japan Society of Powder and Powder Metallurgy*, 1994, v.41, pp.1299-1303
53. Chakraborty S., Debnath D., Mallick A.R., Das P.K. Mechanical, tribological, and thermal properties of hot-pressed ZrB_2 - B_4C composite // *International Journal of Applied Ceramic Technology*, 2015, v.12, pp.568-576
54. Chakraborty S., Debnath D., Mallick A.R., Gupta R.K., Ranjan A., Das P.K., Ghosh D. Microscopic, mechanical and thermal properties of spark plasma sintered ZrB_2 based composite containing polycarbosilane derived SiC // *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 2015, v.52, pp. 176-182
55. Christopher L.T., et al. ^{10}B and ^{11}B NMR Study of Elemental Boron // *Journal of Physical Chemistry C*, 2015, v.119, pp.13807-13813
56. Cheplakov A.P., Golikov V.V., Golubyh S.M., Kaskanov G.Y., Kulagin E.N., Kukhtin V.V., Luschikov V.I., Shabalin E.P., León-Florián E., Leroy C. Large-scale samples irradiation facility at the IBR-2 reactor in Dubna // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 1998, v.411, pp.330-336

57. Chaudhari P., Singh A., Topkar A., Dusane R. Fabrication and characterization of silicon based thermal neutron detector with hot wire chemical vapor deposited boron carbide converter // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2015, v.779, pp.33-38
58. Clark H.K., Hoard J.L. The crystal structure of boron carbide // Journal of American Chemical Society, 1943, v.65, pp.2115-2119
59. Claeys C., Simoen E. Radiation Effects in Advanced Semiconductor Materials and Devices, Springer, Berlin, 2002, pp. 216-226
60. Cockeram B.V., Rapp R.A. Oxidation-resistant boron- and germanium-doped silicide coatings for refractory metals at high temperature // Materials Science and Engineering: A, 1995, v.192, pp.7
61. David E., Aselage T.L. A proposed boron-carbide-based solid-state neutron detector // Journal of Applied Physics, 2005, v.97, pp.013529
62. Demir E., Beril T.A., Buyuk B., Yilmaz O., Ovecoglu L. Comparison of W-VC-C composites against Co-60, Se-75 and Sb-125 for gamma radioisotope sources // AIP Conference Proceedings, 2018, v.1935, pp.160001
63. Demir E., Mirzayev M.N., Beril T.A., Gledenov Y.M., Turchenko V.A., Yılmaz O., Büyük B., Lütfi Ö.M. Investigations on surface morphologies, microstructure and thermal properties of tungsten-based composites // Modern Physics Letters B, 2019, v.33, pp.1950216
64. Demir E., Mirzayev M.N., Tugrul A.B., Abdurakhimov B.A. An experimental study on microstructure of tungsten alloys // Surface Review and Letters, 2020, v.27, pp.1950169
65. Demir E., Gledenov Y.M., Tuğrul A.B., Mirzayev M.N., Turchenko V.A., Yılmaz O., Büyük B., Sansarbayar E., Öveçoğlu M.L. Investigations on microstructure and thermal properties of tungsten-based composites // Romanian Reports in Physics, 2018, v.70, pp.541-545

66. Dean C.R., et al. Boron nitride substrates for high-quality graphene electronics // *Nature Nanotechnology*, 2010, v.5, pp.722-726
67. De-Lurgio P.M., Klann R.T., Fink C.L., McGregor D.S., Thiyagarajan P., Naday I. A neutron detector to monitor the intensity of transmitted neutrons for small-angle neutron scattering instruments // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2003, v.505, p.46-49
68. Doroshev V.D., Borodin V.A., Kamenev V.I., Mazur A.S., Tarasenko T.N., Tovstolytkin A.I., Trukhanov S.V. Self-doped lanthanum manganites as a phase-separated system: Transformation of magnetic, resonance, and transport properties with doping and hydrostatic compression // *Journal of Applied Physics*, 2008, v.104, pp.093909
69. Dong L., Ching W.Y. Electronic structures and optical properties of low- and high-pressure phases of crystalline B_2O_3 // *Physical Review B*, 1996, v.54, pp.13616-13622
70. Doan T.C., Majety S., Grenadier S., Li J., Lin J.Y., Jiang H.X. Hexagonal boron nitride thin film thermal neutron detectors with high energy resolution of the reaction products // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2015, v.783, pp.121-127
71. Domnich V., Reynaud S., Haber R.A., Chhowalla M. Boron carbide: structure, properties, and stability under stress // *Journal of American Chemical Society*, 2011, v.94, pp.3605-3628.
72. Doran D.G. Neutron displacement cross sections for stainless steel and tantalum based on a Lindhard model // *Nuclear Science and Engineering*, 1972, v.49, pp.130-144
73. Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Saito R., Jorio A. Raman spectroscopy of carbon nanotubes // *Physics Reports*, 2005, v.409, pp.47-99

74. Dragunov Y.G., Tretiyakov I.T., Lopatkin A.V., Romanova N.V., Lukasevich I.B., Ananyev V.D., Vinogradov A.V., Dolgikh A.V., Yedunov L.V., Pepelyshev Y.N., Rogov A.D., Shabalin E.P., Zaikin A.A., Golovnin I.S. Modernization of the IBR-2 pulsed research reactor // *Atomic Energy*, 2012, v.113, pp.29-38
75. Durandurdu M. Amorphous silicon hexaboride: a first-principles study // *Philosophical Magazine*, 2018, v.98, pp.2723-2733
76. Dubbs T., Kroeger W., Nissen T., Pulliam T., Roberts D. Development of radiation hard materials for microstrip detectors // *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 1999, v.46, pp.839-843
77. Duong H.N.M., Nguyen M.A.P., Kianinia M., Ohshima T., Abe H., Watanabe K., Taniguchi T., Edgar J.H., Aharonovich I., Toth M. Effects of high-energy electron irradiation on quantum emitters in hexagonal boron nitride // *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2018, v.10, pp.24886-24891
78. Ektarawong A., Simak S.I., Alling B. Structural models of increasing complexity for icosahedral boron carbide with compositions throughout the single-phase region from first principles // *Physical Review B*, (2018), v.97, pp.174104
79. Ekambaram S., Patil K.C., Maaza M. Synthesis of lamp phosphors: Facile combustion approach // *Journal of Alloys and Compounds*, 2005, v.393, pp. 81-92
80. El-Alaily N.A., Mohamed R.M. Effect of irradiation on some optical properties and density of lithium borate glass // *Materials Science and Engineering: B*, 2003, v.98, pp.193-203
81. Emin D., Aselage T.L. A proposed boron-carbide-based solid-state neutron detector // *Journal of Applied Physics*, 2005, v.97, pp.013529
82. Emin D., Howard I.A., Green T.A., Beckel C.L. Microscopic origin of the composition-dependent change of the thermal conductivity in boron carbides // *MRS Online Proceedings Library*, 1987, v.97, pp.83-88

83. Engler M., Ruisinger B. Hexagonal boron nitride (hBN) – applications from metallurgy to cosmetics // *Ceramic Forum International*, 2007, v.84, pp.49–53
84. Esrafil M.D., Rad F.A. Carbon-doped boron nitride nanosheets as highly sensitive materials for detection of toxic NO and NO₂ gases: A DFT study // *Vacuum*, 2019, v.166, pp.127-134
85. Evans B.D., Stapelbroek M. Optical properties of the F⁺ center in crystalline Al₂O₃ // *Physical Review B*, 1978, v.18, pp.7089–7098
86. Famiano M.A. et al. Neutron and proton transverse emission ratio measurements and the density dependence of the asymmetry term of the nuclear equation of state // *Physical Review Letters*, 2006, v.97, pp.052701
87. Fanchini G., McCauley J.W., Chhowalla M. Behavior of Disordered Boron Carbide under Stress // *Physical Review B*, 2006, v.97, pp.035502
88. Ferrari A.C. Raman spectroscopy of graphene and graphite: Disorder, electron–phonon coupling, doping and nonadiabatic effects // *Solid State Communications*, 2007, v.143, pp.47-57
89. Finlay R.W. et al. Neutron total cross-sections at intermediate-energies // *Physical Review C*, 1993, v.47, pp.237
90. Fitz C., Kolitsch A., Möller W. Growth of low-stress cubic boron nitride films by simultaneous medium-energy ion implantation // *Applied Physics Letters*, 2002, v.80, pp.55
91. 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, v.37, pp.293-298
92. Flynn J.H. Thermal analysis kinetics-problems, pitfalls and how to deal with them // *Journal of Thermal Analysis*, 1988, v.34, pp.367-375
93. Fleta C., Guardiola C., Esteban S., Jumilla C., Pellegrini G., Quirion D., Rodríguez J., Lousa A., Martínez-De-Olcoz L., Lozano M. Fabrication and

- nuclear reactor tests of ultra-thin 3D silicon neutron detectors with a boron carbide converter // *Journal of Instrumentation*, 2014, v.9, pp.04010
94. Fokin L.R. Reliability of data on the thermophysical properties of materials: Three examples // *High Temperature*, 2015, v.53, pp.206-213
95. Fritsch G., Lopez C.T., Rodriguez J.L. Generation and recombination of free radicals in organic materials studied by electron spin resonance // *Journal of Magnetic Resonance*, 1974, v.16, pp.48-55
96. Gandla S., Gollu S.R., Sharma R., Sarangi V., Gupta D. Dual role of boron in improving electrical performance and device stability of low temperature solution processed ZnO thin film transistors // *Applied Physics Letters*, 2015, v.107, pp.152102
97. Ghosh D. Influence of stress state and strain rate on structural amorphization in boron carbide // *Journal of Applied Physics*, 2012, v.111, pp.063523
98. Grabchikov S.S., Trukhanov A.V., Trukhanov S.V., Kazakevich I.S., Solobay A.A., Erofeenko V.T., Vasilenkov N.A., Volkova O.S., Shakin A. Effectiveness of the magnetostatic shielding by the cylindrical shells // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2016, v.398, pp.49-53
99. Greene F.T., Margrave J.L. The vapor pressure of boron oxide over the range 1946-2419 K // *The Journal of Physical Chemistry*, 1966, v.70, pp.2112-2115
100. Gosset D., Miro S., Doriot S., Moncoffre N. Amorphisation of boron carbide under slow heavy ion irradiation // *Jurnal of Nuclear Materials*, 2016, v.476, pp.198-204
101. Gosset D., Miro S., Doriot S., Victor G., Motte V. Evidence of amorphization of B₄C boron carbide under slow, heavy ion irradiation // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2015, v.365, pp.300-304
102. Golberg D., Bando Y., Tang C., Zhi C. Boron nitride nanotubes // *Advanced Materials*, 2007, v.19, pp.2413-2432

103. Guardiola C., Fleta C., Pellegrini G., García F., Quirion D., Rodríguez J., Lozano M. Ultra-thin 3D silicon sensors for neutron detection // *Journal of Instrumentation*, 2012, v.7, pp.03006
104. Güngör A., Akbay K.I, Özdemir T. EPDM rubber with hexagonal boron nitride: a thermal neutron shielding composite // *Radiation Physics and Chemistry*, 2019, v.165, pp.108391
105. Hashimov R.F., Mikailzade F.A., Trukhanov S.V., Lyadov N.M., Vakhitov I.R., Trukhanov A.V., Mirzayev M.N. Structure and thermal analysis of $Ba_{0.5}La_{0.5}MnO_3$ polycrystalline powder // *International Journal of Modern Physics B*, 2019, v.33, pp.1950244
106. Hattori Y., Taniguchi T., Watanabe K., Nagashio K. Layer-by-layer dielectric breakdown of hexagonal boron nitride // *ACS Nano*, 2015, v.9, pp.916-921
107. Hattori Y., Taniguchi T., Watanabe K., Nagashio K. Anisotropic dielectric breakdown strength of single crystal hexagonal boron nitride, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2016, v.8, pp.27877-27884
108. Haight R.C. Fast-neutron detectors for nuclear physics experiments // *Journal of Instrumentation*, 2012, v.7, pp. C05002
109. Han W., Ge C., Zhang R., Zhang X. Synthesis of boron nitride microrods with fish-scale-like structures for enhanced thermal conductivity of water // *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, v.132, pp.1284-1295
110. Haubner R., M. Wilhelm, Weissenbacher R., Lux B. Boron Nitrides — Properties, Synthesis and Applications // *High Performance Non-Oxide Ceramics II*, 2002, v.102, pp.1-45
111. Hermann A., Ashcroft N.W., Hoffmann R. Binary compounds of boron and beryllium: A rich structural arena with space for predictions // *Chemistry - A European Journal*, 2013, v.19, pp.4148-4197
112. Hong N., Mullins J., Foreman K., Adenwalla S. Boron carbide based solid state neutron detectors: the effects of bias and time constant on detection

- efficiency // *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2010, v.43, pp.11
113. Hou X., Yu Z., Li Y., Chou K.C. Preparation and properties of hexagonal boron nitride fibers used as high temperature membrane filter // *Materials Research Bulletin*, 2014, v.49, pp.39-43
114. Hoffman C.R. et al. Observation of a two-neutron cascade from a resonance in ^{24}O // *Physical Review C*, 2011, v.83, pp.031303
115. Hoop B., Barschall H.H. The scattering of neutrons by alpha particles // *Nuclear Physics*, 1966, v.83, pp.65
116. Hildenbrand D. L., Hall W.F., Potter N.D. Thermodynamics of vaporization of lithium oxide, boric oxide, and lithium metaborate // *The Journal of Chemical Physics*, 1963, v.39, pp.296-301
117. Huber C., et al. Boric Acid: A high potential candidate for thermochemical energy storage // *Energies*, 2019, v.12, pp.1086
118. Huber C., Jahromy S.S., Jordan C., Schreiner M., Harasek M., Werner A., Winter F. Boric acid: A high potential candidate for thermochemical energy storage // *Energies*, 2019, v.12, pp.1086
119. Hui F., Pan C., Shi Y., Ji Y., Gutierrez E.G., Lanza M. On the use of two dimensional hexagonal boron nitride as dielectric // *Microelectronic Engineering*, 2016, v.163, pp.119-133
120. Huseynov E. Neutron irradiation and frequency effects on the electrical conductivity of nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // *Physics Letters A*, 2016, v.380, pp.3086-3091
121. Huseynov E., Jazbec A., Snoj L. Temperature vs. impedance dependencies of neutron-irradiated nanocrystalline silicon carbide (3C-SiC) // *Applied Physics A*, 2019, v.125, pp.1-8
122. Huseynov E. Neutron irradiation effects on the temperature dependencies of electrical conductivity of silicon carbide (3C-SiC) nanoparticles // *Silicon*, 2018, v.10, pp.995-1001

123. Hushur A., Manghnani M.H., Werheit H., Dera P., Williams Q. High-pressure phase transition makes $B_{4.3}C$ boron carbide a wide-gap semiconductor // *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2016, v.28, pp.045403
124. Höglund C., Birch J., Andersen K., Bigault T., Buffet J.C., Correa J., Esch P., Guerard B., Wilton R.H., Jensen J., Khaplanov A., Piscitelli F., Vettier C., Vollenberg W., Hultman L. B_4C thin films for neutron detection // *Journal of Applied Physics*, 2012, v.111, pp.104908
125. Höhne G.W.H., Hemminger W.F., Flammersheim H.J. *Differential Scanning Calorimetry*, Springer, Germany, 2003. 330p.
126. Inui H., Mori H., Sakata T., Fujita H. Electron irradiation-induced crystalline-to-amorphous transition in quartz single crystals // *Journal of Non-Crystalline Solids*, 1990, v.116, pp.1-15
127. Ivanov Y.F., Khasanov O.L., Petyukevich M.S., Smirnov G.V., Polisadova V.V., Bikbaeva Z.G., Teresov A.D., Kalashnikov M.P., Tolkachov O.S. Structure and properties of the surface layer of B_4C ceramic treated with an intense electron beam // *Inorganic Materials: Applied Research*, 2018, v.9, pp.437-441
128. Jabarov S.H., Mammadov T.G., Mammadov A.I., Kichanov S.E., Aliyeva V.B., Lukin E.V. Structural phase transition in $TlGaSe_2$ under high pressure // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2015, v.9, pp.35-40
129. Jabarov S.G., Kozlenko D.P., Kichanov S.E., Belushkin A.V., Savenko B.N., Mextieva R.Z., Lathe Ch. High-pressure effect on the ferroelectric-paraelectric transition in $PbTiO_3$ // *Physics of the Solid State*, 2011, v.53, pp.2300-2304
130. Jabarov S.H., Aliyeva V.B., Mammadov T.G., Mammadov A.I., Kichanov S.E., Dubrovinsky L.S., Babayev S.S, Pashayeva E.G, Dang N.T. High pressure Raman study of layered semiconductor $TlGaSe_2$ // *Materials Science-Poland*, 2018, v.36, pp.203-208

131. Jalaly M., et al. A novel, simple and rapid route to the synthesis of boron carbonitride nanosheets: combustive gaseous unfolding // *Scientific Reports*, 2017, v.7, pp.3453
132. Jay A., Hardouin D.O., Sjakste J., Vast N. Theoretical phase diagram of boron carbide from ambient to high pressure and temperature // *Journal of Applied Physics*, 2019, v.125, pp.185902
133. Jerome R., Volodymyr B., Jean-Francois H., Roland G. Boron–silicon solid solution: synthesis and crystal structure of a carbon-doped boron-rich SiB_n ($n \sim 30$) compound // *Journal of Solid-State Chemistry*, 2004, v.177, pp.4167-4174
134. Jeschke G., Kroschel M., Jansen M. A magnetic resonance study on the structure of amorphous networks in the Si-B-N(-C) system // *Journal of Non-Crystalline Solids*, 1999, v.260, pp.216-227
135. Jiang X. F., Weng Q., Wang X.B., Li X., Zhang J., Golberg D., Bando Y. Recent progress on fabrications and applications of boron nitride nanomaterials: a review // *Journal of Materials Science and Technology*, 2015, v.31, pp.589-598.
136. Ji Y., Pan C., Zhang M., Long S., Lian X., Miao F., Hui F., Shi Y., Larcher L., Wu E., Lanza M. Boron nitride as two-dimensional dielectric: reliability and dielectric breakdown // *Applied Physics Letters*, 2016, v.108, pp.012905
137. Johnson O.T., Ogunmuyiwa E.N., Sigalas I. Synthesis and characterization of boron suboxide powder produced at ambient pressure condition // *Particulate Science and Technology*, 2017, v.35, pp.434-438
138. Jo I., Pettes M.T., Kim J., Watanabe K., Taniguchi T., Yao Z., Shi L. Thermal conductivity and phonon transport in suspended few-layer hexagonal boron nitride // *Nano Letters*, 2013, v.13, pp.550–554.
139. Jijun W., Wenhui M., Duzuo T., Binjie J., Bin Y., Dachun L., Yongnian D. Thermodynamic description of Si-B binary system // *Procedia Engineering*, 2012, v.31, pp.297-301

140. Jugan S.J., Abraham R. Ultrasonic investigation on $\text{CaO-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-Na}_2\text{O}$ and $\text{CaO-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3$ glass system // *Journal of Pure and Applied Ultrasonics*, 1977, v.19, pp.32-39
141. Karumidze G.S., Shengelia L.A. Isotopic effect of boron carbide thermal conductivity // *Diamond and Related Materials*, 1993, v.3. pp.14
142. Kalkabay G., Shlimas D.I., Kozlovskiy A.L., Zdorovets M.V., Tikhonov A., Shumskaya A.E., Kaniukov E.Yu. Peculiarities of template assisted electrodeposition one-dimensional nickel nanostructures from chloride electrolyte // *Advanced Physical Research*, 2019 v.1, pp.5-13
143. Kakazey G., Gonzalez-Rodriguez J.G., Vlasova M.V., Shanina B.D. Electron paramagnetic resonance in boron carbide // *Journal of Applied Physics*, 2002, v.91, pp.4438
144. Karpov A.V., Kovalev D.Y., Borovinskaya I.P. et al. Electrically Conducting Ceramics Based on Al-AlN-TiB_2 // *High Temperature*, 2018, v.56, pp.527-531
145. Khattak C.P., Joyce D.B., Schmid F. A simple process to remove boron from metallurgical grade silicon // *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 2002, v.74, pp.77-89
146. Khalifa F.A., El Batal H.A., Rajendran V. Behaviour of ultrasonic waves on chromium doped $\text{XPbO}(100_x)\text{B}_2\text{O}_3$ glasses // *Egyptian Journal of Chemistry*, 1998, v.41, pp.329-336
147. Khan H., et al., Gamma irradiation-induced phase transitions of boron nitride nanoparticles // *Materials Research Express*, 2019, v.6, pp.1150b2
148. Khanaki A., et al., Self-assembled Cubic Boron Nitride Nanodots // *Scientific Reports*, 2017, v.7, pp.4087
149. Kline D., Bray P.J., Kriz H.M. Structure of crystalline boron oxide // *The Journal of Chemical Physics*, 1968, v.48, pp.5277

150. Kostoglou N., Polychronopoulou K., Rebholz C. Thermal and chemical stability of hexagonal boron nitride (h-BN) nanoplatelets // *Vacuum*, 2015, v.112, pp.42-45
151. Kolupayeva Z.I., Fuks M.Y., Gladkikh L.I., Arinkin A.V., Malikhin S.V. Thermal expansion and characteristic temperature of dense modifications of boron nitride // *Journal of the Less Common Metals*, 1986, v.117, pp.259-263
152. Korotaev P., Kuksin A., Pokatashkin P., Yanilkin A. Quantum and classical molecular dynamics simulation of boron carbide behavior under pressure // *AIP Conference Proceedings*, 2017, v.1793, pp.070014
153. Kuhlmann U., Werheit H. Raman Effect on Boron Carbide // *Physica Status Solidi (B)*, 1993, v.175, pp.85
154. Kuhlmann U., Werheit H. Raman effect of boron carbide ($B_{4.3}C$ to $B_{10.37}C$) // *Journal of Alloys and Compounds*, 1994, v.205, pp.87-91
155. Kılıc A., Toptan F., Kerti I., Piskin S. Oxidation of boron carbide particles at low temperatures // *Materials Letters*, 2014, v.128, pp.224-226
156. Lazzari R., Vast V., Besson J.M., Baroni S., Corso D. Atomic structure and vibrational properties of icosahedral B_4C boron carbide // *Physical Review Letters*, 1999, v.83, pp.3230–3233
157. Laturia A., Van de Put M.L., Vandenberghe W.G. Dielectric properties of hexagonal boron nitride and transition metal dichalcogenides: from monolayer to bulk // *npj 2D Materials and Applications*, 2018, v.2, pp.6
158. Lavrenko V.A., Alexeev A.F. High-temperature oxidation of boron nitride // *Ceramics International*, 1986, v.12, pp.25-31
159. Lavelle C.M., Coplan M., Miller E.C., Thompson A.K., Kowler A.L., Robert E.V, Yue A.T., Koeth T., Al-Sheikhly M., Clark Ch.W. Demonstration of neutron detection utilizing open cell foam and noble gas scintillation // *Applied Physics Letters*, 2015, v.106, pp.094103
160. Lederer S., Akhmadaliev S., Forck P., Gütlich E., Lieberwirth A., Ensinger W. Thermal annealing behavior of α - Al_2O_3 scintillation screens //

- Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 2015, v.365, pp.548–552
161. Lee D., et al. High-energy proton irradiation damage on two dimensional hexagonal boron nitride // RSC Advances, 2019, v.9, pp.18326
 162. Lee G.H., Yu Y.J., Lee C., Dean C., Shepard K.L., Kim P., Hone J. Electron tunneling through atomically flat and ultrathin hexagonal boron nitride // Applied Physics Letters, 2011, v.99, pp.243114
 163. Li, Y.Q., Qiu T. Oxidation behaviour of boron carbide powder // Materials Science and Engineering A, 2007, v.444, pp.184-191
 164. Li L.H., Santos E.J.G., Xing T., Cappelluti E., Roldan R., Chen Y., Watanabe K., Taniguchi T. Dielectric screening in atomically thin boron nitride nanosheets // Nano Letters, 2015, v.15, pp.218-223
 165. Li L.H., Cervenka J., Watanabe K., Taniguchi T., Chen Y. Strong oxidation resistance of atomically thin boron nitride nanosheets // ACS Nano, 2014, v.8, pp.1457-1462
 166. Lin Y.R., Ho Ch.Yu., Chuang W.T., Ku Ch.S, Kai J.J. Swelling of ion-irradiated 3C–SiC characterized by synchrotron radiation based XRD and TEM // Journal of Nuclear Materials, 2014, v.455, 292-296
 167. Liu Y.S., Zhang L.T., Cheng L.F. Preparation and oxidation protection of CVD SiC/a-BC/SiC coatings for 3D C/SiC composites // Corrosion Science, 2009, v.51, pp.820-826
 168. Li Q., Liu M., Zhang Y., Liu Z. Hexagonal boron nitride-graphene heterostructures: Synthesis and interfacial properties // Nano-micro small, 2016, v.12, pp.32-50
 169. Litz L.M., Mercuri R.A. Oxidation of boron carbide by air, water, and air- water mixtures at elevated temperatures // Journal of The Electrochemical Society, 1963, v.110, pp.921-925

170. Liang D., Liu J., Li H., Zhou Y., Zhou J. Improving effect of boron carbide on the combustion and thermal oxidation characteristics of amorphous boron // *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2016, v.123, pp.1771-1782
171. Lipp A., Schwetz K.A., Hunold K. Hexagonal boron nitride: Fabrication, properties and applications // *Journal of the European Ceramic Society*, 1989, v.5, pp.3-9
172. Luo X., Yang J., Liu H., Wu X., Wang Y., Ma Y., Wei S.H., Gong X., Xiang H. Predicting two-dimensional boron-carbon compounds by the global optimization method // *Journal of American Chemical Society*, 2011, v.133, pp.16285-19290
173. Matsushita J., Komarnenib S. High temperature oxidation of silicon hexaboride ceramics // *Materials Research Bulletin*, 2001, v.36, pp.1083–1089
174. Mallick D., Kayal T., Ghosh J., Chakrabarti O., Biswas S., Maiti H. Development of multiphase B–Si–C ceramic composite by reaction sintering // *Ceramics International*, 2009, v.35, pp.1667-1669
175. Malherbe J.B., Berg V.D.N.G., Botha A.J., Friedland E., Hlatshwayo T.T., Kuhudzai R.J., Wendler E., Wesch W., Chakraborty P., Silveira E.F. SEM analysis of ion implanted SiC // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2013, v.315, pp.136-141
176. Maity A., Doan T.C., Li J., Lin J.Y., Jiang H.X. Realization of highly efficient hexagonal boron nitride neutron detectors // *Applied Physics Letters*, 2016, v.109, pp.072101
177. Maruyama T., et al. Effect of fast neutron irradiation on the properties of boron carbide pellet // *Journal of Nuclear Science and Technology*, 1997, v.34, pp.1006-1014
178. Maity A., Grenadier S.J., Li J., Lin J.Y., Jiang H.X. Hexagonal boron nitride neutron detectors with high detection efficiencies // *Journal of Applied Physics*, 2018, v.123, pp.044501

179. Mcgregor D.S., Gersch H.K., Sanders J.D., Klann R.T., Lindsay J.T. Thin-film-coated detectors for neutron detection // *Journal of the Korean Association for Radiation Protection*, 2001, v.26, pp.167-169
180. Mcgregor D.S., Klann R.T., Gersch H.K., Yang Y-H. Thin-film-coated bulk GaAs detectors for thermal and fast neutron measurements // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2001, v.466, pp.126-141
181. Mcgregor D.S., Hammig M.D., Gersch H.K., Yang Y-H., Klann R.T. Design considerations for thin film coated semiconductor thermal neutron detectors, basics regarding alpha particle emitting neutron reactive films // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2003, v.500, pp.272-308
182. Mcgregor D.S., Shultis J.K. Spectral identification of thin-film-coated and solid-form semiconductor neutron detectors // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 2004, v.517, pp.180-188
183. Meng J., Wang D., Cheng L., Gao M., Zhang X. Recent progress in synthesis, properties, and applications of hexagonal boron nitride-based heterostructures // *Nanotechnology*, 2019, v.30, pp.074003
184. Medwick P.A., Fischer H.E., Pohl R.O. Thermal conductivity and specific heat of boron carbides // *Journal of Alloys and Compounds*, 1994, v.203, pp.67-75
185. Mirzayev M.N., Jabarov S.H., Asgerov E.B., Mehdiyeva R.N., Thabethe T.T., Biira S., Tiep N.V. Crystal structure changes and weight kinetics of silicon-hexaboride under gamma irradiation dose // *Results in Physics*, 2018, v.10, pp.541-545
186. Mirzayev M.N., Mammadov Kh.F., Garibov R.G., Askerov E.B. Thermophysical properties of boron carbide irradiated by ionizing radiation // *High Temperature*, 2018, v.56, pp.374-377

187. Mirzayev M.N., Mehdiyeva R.N., Garibov R.G., Ismayilova N.A., Jabarov S.H. Influence of gamma irradiation on the surface morphology, XRD and thermophysical properties of silicide hexaboride // *Modern Physics Letters B*, 2018, v.14, pp.1850151
188. Mirzayev M.N., Mehdiyeva R.N., Mammadov Kh.F., Jabarov S.H., Asgerov E.B. Calculation of the thermal parameters of boron silicide by differential scanning calorimetry // *Physics of Particles and Nuclei Letters*, 2018, v.15, pp.662–666
189. Mirzayev M.N., Mammadov Kh.F., Mehdiyeva R.N., Garibov R.G., Skuratov B.A., Tjep N.V., Askerov E.B., Demir E., Tugrul A.B., Jabarov S.H. Study of atom dynamics of the (SS GRADE 321) + B_4C + Al_2O_3 compounds under heavy ion irradiation // *Journal of Radiation Researches*, 2018, v.2, pp.173-178
190. Mirzayev M.N., Mammadov Kh.F., Skuratov V.A., Demir E., Jabarov S.H., Ismayilova N.A., Biira S., Abdurakhimov B., Popov E. Oxidation kinetics and thermophysical properties of gamma irradiated silicon hexaboride // *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, v.801, pp.151-157
191. Mirzayev M.N., Ertugrul D., Mammadov Kh., Mehdiyeva R.N., Jabarov S., Beril Tugrul A., Saphina B., Nguyen T., Thabsile Th. Thermodynamics kinetics of boron carbide under gamma irradiation dose // *International Journal of Modern Physics B*, 2019, v.33, pp.1950073
192. Mirzayev M.N., Mehdiyeva R.N., Melikova S.Z., Jabarov S.H., Thabethe T.T., Biira S., Kurbanov M.A., Tjep N.V. Formation of color centers and concentration of defects in boron carbide irradiated at low gamma radiation doses // *Journal of the Korean Physical Society*, 2019, v.74, pp.363-367
193. Mirzayev M.N., Popov E., Demir E., Abdurakhimov B., Mirzayeva D.M., Tjep V.N., Georgiev G.I., Mutali A.K., Mamatova M.B., Thermophysical behavior of nano boron trioxide under high intense electron beam irradiation // *Advanced Physical Research*, 2019, v.1, pp.63-69

194. Mirzayev M.N.. Simultaneous measurements of heat flow rate and thermal properties of nano boron trioxide under neutron irradiation at the low and high temperature // *Vacuum*, 2020, v.173, pp.109162
195. Mirzayev M.N. Oxidation kinetics of boron carbide ceramic under high gamma irradiation dose in the high temperature // *Ceramics International*, 2020, v.46, pp.2816-2822
196. Mirzayev M.N., Demir E., Mammadov K.F. et al. Amorphisation of boron carbide under gamma irradiation // *Journal of Physics*, 2020, v.94, pp.110
197. Mirzayev M.N. Study thermodynamic assessment of the B-C and B-Si binary systems with swift heavy ions and high intense electron beam irradiation at the low temperature // *Modern Physics Letters B*, 2020, v.34, pp.2050395
198. Mirzayev M.N. High-flux neutron irradiation of boron trioxide analyzed with Raman and FTIR spectroscopy // *International Journal of Modern Physics B*, 2020, v.34, pp.2050160
199. Mirzayev M.N., Jabarov S.H., Asgerov E.B., Mehdiyeva R.N., Thabethe T.T., Biira S., Tiep N.V. X-ray diffraction and thermodynamics kinetics of SiB_6 under gamma irradiation dose // *Silicon*, 2019, v.11, pp.2499-2504
200. Mirzayev M.N., Popov E., Demir E., Abdurakhimov B.A., Mirzayeva D.M., Skuratov V.A., Mutali A.K., Tiep V.N., Biira S., Tashmetov M.Yu., Olejniczak K., Kristavchuk O. Thermophysical behavior of boron nitride and boron trioxide ceramics compounds with high energy electron fluence and swift heavy ion irradiated // *Journal of Alloys and Compounds*, 2020, v.834, pp.155119
201. Mirzayev M.N, Abdurakhimov B.A, Jabarov S.H., Tashmetov M.Yu., Demir E., Tiep N.V., Ismayilova N.A., Aliyev Y.I., Popov E., Mirzayeva D.M., Karaaslan S.I., Georgiev G.I. Effect of high intense electron beam irradiation on structural and Raman properties of boron carbide micro powder // *International Journal of Modern Physics B*, 2020, v.34, pp.2050008

202. Mirzayev M.N. Heat transfer of hexagonal boron nitride (h-BN) compound up to 1 MeV neutron energy: Kinetics of the release of wigner energy // *Radiation Physics and Chemistry*, 2021, v.180, pp.109244
203. Morgan B.N., Singh J.R., Mears J., Wolfee R.A. A new family of reaction bonded ceramics for armor applications // *Ceramic Transactions*, 2002, v.134, pp.527-539
204. Motte V., Gosset D., Sauvage T., Lecoq H., Moncoffre N. Helium apparent diffusion coefficient and trapping mechanisms in implanted B₄C boron carbide // *Journal of Nuclear Materials*, 2019, v.517, pp.165-174
205. Mortensen A., Christensenand D.H., Nielseo O.F., Pedersen E. Raman spectra of amorphous Al₂O₃ and Al₂O₃/MoO₃ obtained by visible and infrared excitation // *Journal of Raman Spectroscopy*, 1991, v.22, 47-49
206. Mori T., Nishimura T. Thermoelectric properties of homologous p- and n-type boron-rich borides // *Journal of Solid State Chemistry*, 2006, v.179, pp.2908-2915
207. Morosin B., Aselage T.L., Emin D. On the crystal structure of boron carbides // *AIP Conference Proceedings*, 1991, v.231 pp.193
208. Murakami T., Inui H. Friction and wear properties of α -AlB₁₂- and SiB₆-based ceramics in water // *Tribology International*, 2014, v.74, pp.38-45
209. Muravyev N.V., Pivkina A.N., Kiselev V.G. Comment on “Studies on thermodynamic properties of FOX-7 and its five closed-loop derivatives” // *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2017, v.62, pp.575-576
210. Nagabhushana K.R., Lakshminarasappa B.N., Singh F. Photoluminescence and Raman studies in swift heavy ion irradiated polycrystalline aluminum oxide // *Bulletin of Materials Science*, 2009, v.32, pp.515–519
211. Nowak G., Stoermer M., Becker H.W., Horstmann C., Kampmann R., Hoeche D., Haese-Seiller M., Moulin J.F., Pomm M., Randau C., Lorenz U., Wilton R.H., Mueller M., Schreyer A. Boron carbide coatings for neutron

- detection probed by x-rays, ions, and neutrons to determine thin film quality // Journal of Applied Physics, 2015, v.117, pp.034901
212. Oda K., Yoshio T. Oxidation kinetics of hexagonal boron nitride powder // Journal of Materials Science, 1993, v.28, pp.6562-6566
213. Otten C. J., et al. Crystalline boron nanowires // Journal of the American Chemical Society, 2002, v.124, pp.4564-4565
214. Pascale S., Scatena E., Fabbri F., Cataldo F. Morphological and structural properties of neutron-irradiated $B_{12}C_3$ boron carbide microcrystals // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, 2017, v.25, pp.585-588
215. Pakdel A., Zhi C., Bando Y., Golberg D. Low-dimensional boron nitride nanomaterials // Materials Today, 2012, v.15, pp.70116
216. Pan C., Zhang J., Kou K., Zhang Y., Wu G. Investigation of the through-plane thermal conductivity of polymer composites with in-plane oriented hexagonal boron nitride // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, v.120, pp.1-8
217. Perdikakis G. et al. LENDA: a Low Energy Neutron Detector Array for studies of (p, n) reactions with radioactive beams // IEEE Transactions on Nuclear Science, 2009, v.56, pp.1174-1178
218. Perry Ch.C., Mendez J.R., Milligan J. DNA condensation with a boron-containing cationic peptide for modeling boron neutron capture therapy // Radiation Physics and Chemistry, 2020, v.166, pp.108521
219. Perdue B.A., Ahmed M.W., Henshaw S.S., Seo P.N., Stave S., Weller H.R., Martel P.P., Teymurazyan A. Cross sections for the three-body photodisintegration of ^3He at $E_\gamma = 12.8, 13.5$ and 14.7 MeV // Physical Review C, 2011, v.83, pp.034003
220. Popescu C. Integral method to analyze the kinetics of heterogeneous reactions under non-isothermal conditions: A variant on the Ozawa-Flynn-Wall method // Thermochemica Acta, 1996, v.285, pp.309-323

221. Pratik K., Nammari A., Ashton T.S., Moore A.L. Saturated pool boiling heat transfer from vertically oriented silicon surfaces modified with foam-like hexagonal boron nitride nanomaterials // *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2016, v.95, pp.964-971
222. Quick C.R., Schawe J.E.K., Uggowitz P.J., Pogatscher S. Measurement of specific heat capacity via fast scanning calorimetry—Accuracy and loss corrections // *Thermochimica Acta*, 2019, v.677, pp.12-20
223. Qin L., Yu J., Li M., Liu F., Bai X. Catalyst-free growth of mono- and few-atomic-layer boron nitride sheets by chemical vapor deposition. *Nanotechnology*, 2011, v.22, pp.215602
224. Rakhshi M., Mohsennia M., Rasa H., Sameti M.R. First-principle study of ammonia molecules adsorption on boron nitride nanotubes in presence and absence of static electric field and ion field // *Vacuum*, 2018, v.155, pp.456-464
225. Ramachandran R., Jung D., Bernier N.A., Logan J.K., Waddington M.A., Spokoyny A.M. Sonochemical synthesis of small boron oxide nanoparticles // *Inorganic Chemistry*, 2018, v.57, pp.8037-8041
226. Reddy K.M., Liu P., Hirata A., Fujita T., Chen M.W. Atomic structure of amorphous shear bands in boron carbide // *Nature Communications*, 2013, v.4 pp.2483
227. Remnev G., Musil J., Tarbokov V., Pavlov S., Konusov F., Egorov I., Gadirov R., Kabyshev A., Javdošňák D., Zenkin S. Effect of intense electron and ion irradiation on optical absorption of boron carbide thin films // *Radiation Effects and Defects in Solids*, 2018, v.173, pp.1-8
228. Rhee C., Bray P.J. ^{11}B NMR in crystalline boron oxide, *The Journal of Chemical Physics*, 1972, v.56, pp.2476
229. Rizzo H.F. *Oxidation of Boron at Temperatures Between 400 and 1300°C*. Springer, Boston, 1960, 368p.

230. Roth M., Mojaev E., Khakhan O., Fleider A., Dulkan E., Schieber M. Composite boron nitride neutron detectors // *Journal of Crystal Growth*, 2014, v.401, pp.791
231. Robertson B.W., Adenwalla S., Harken A., Welsch P., Brand J.I., Dowben J.P.A., Claassen P. A class of boron-rich solid-state neutron detectors // *Applied Physics Letters*, 2002, v.80, pp.3644
232. Rutkowskia P., Dubiela A., Piekarczykb W., Magdalena Z., Duszaca J. Anisotropy in thermal properties of boron carbide–graphene plateletcomposites // *Journal of the European Ceramic Society*, 2015, v.36, pp.3051-3057
233. Sezer A., Brand J.I. Chemical vapor deposition of boron carbide // *Materials Science and Engineering B*, 2001, v.79, pp.191-202
234. Singh D., Singh K., Singh G., Manupriya, Mohan S., Arora M., Sharma G. Optical and structural properties of ZnO–PbO–B₂O₃ and ZnO–PbO–B₂O₃–SiO₂ glasses // *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2008, v.20, pp.075228
235. Singh D., Singh K., Bajwa B.S., Mudahar G.S., Singh D.P., Manupriya, Arora M., Dangwal V.K. Optical and structural properties of Li₂O- Al₂O₃ - B₂O₃ glasses before and after γ -irradiation effects // *Journal of Applied Physics*, 2008, v.104, pp.103515
236. Singh K., Singh H., Sharma G., Gerward L., Khanna A., Kumar R., Nathuram R., Sahota H.S. Gamma-ray shielding properties of CaO-SrO- B₂O₃ glasses // *Radiation Physics and Chemistry*, 2005, v.72, pp.225-228
237. Simon S.L. Temperature-modulated differential scanning calorimetry: theory and application // *Thermochimica Acta*, 2001, v.374, pp.55-71
238. Simeone D., et al. Study of boron carbide evolution under neutron irradiation by Raman spectroscopy // *Journal of Nuclear Materials*, 2000, v.277, pp.1-10
239. Sichel E.K., Miller R.E., Abrahams M.S., Buiocchi C.J. Heat capacity and thermal conductivity of hexagonal pyrolytic boron nitride // *Physical Review B*, 1976, v.13, pp.4607

240. Slack G.A., Oliver D.W., Horn F.H. Thermal conductivity of boron and some boron compounds // *Physical Review B*, 1971, v.4, pp.1714
241. Shi F.M., Yin X.W., Fan X.M. A new route to fabricate SiB₄ modified C/SiC composites // *Journal of the European Ceramic Society*, 2010, v.30, pp.1955-1962
242. Shang N.G., et al. Catalyst-free efficient growth, orientation and biosensing properties of multilayer graphene nanoflake films with sharp edge planes // *Advanced Functional Materials*, 2008, v.18, pp.3506-3514
243. Shen H.J. Thermal-conductivity and tensile-properties of BN, SiC and Ge nanotubes // *Computational Materials Science*, 2009, v.47, pp.220–224
244. Shen Z.X., Ge M., Chen M.W., Zhang W.G. Preparation of a novel BN/SiC composite porous structure // *Ceramics International*, 2012, v.38, pp.6053-6057
245. Sherr R. Collision cross sections for 25 MeV neutrons // *Physical Review*, 1945, v.68, pp.240
246. Stoto T., Housseau N., Zuppiroli L. Swelling and microcracking of boron carbide subjected to fast neutron irradiations // *Journal of Applied Physics*, 1990, v.68, pp.3198
247. Solodkyi I., Bezdorozhev O., Vterkovskiy M., Bogomol I., Bolbut V., Krüger M., Badica P., Loboda P. Addition of carbon fibers into B₄C infiltrated with molten silicon // *Ceramics International*, 2019, v.45, pp.168-174
248. Sologub O., Michiue Y., Mori T. Boron carbide, B_{13-x}C_{2-y} (x = 0.12, y = 0.01) // *Acta Crystallographica Section E Structure Reports Online*, 2012, v.68, pp.3414096
249. Soulen J.R., Sthapitanonda P., Margrave J.L. Vaporization of inorganic substances: B₂O₃, TeO₂ and Mg₃N₂ // *The Journal of Physical Chemistry*, 1955, v.59, pp.132-136
250. Stoller R.E., Toloczko M.B., Was G.S., Certain A.G., Dwaraknath S., Garner F.A. On the use of SRIM for computing radiation damage exposure // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam*

- Interactions with Materials and Atoms, 2013, v.310, pp.75-80
251. Steinbrück M. Oxidation of boron carbide at high temperatures // Journal of Nuclear Materials, 2005, v.336, pp.185-193
 252. Steinbrück M., Veshchunov M.S., Boldyrev A.V., Shestak V.E. Oxidation of B₄C by steam at high temperatures // Nuclear Engineering and Design, 2007, v.237, pp.161-181
 253. Stephani K.A., Boyd I.D. Molecular dynamics modeling of defect formation in many-layer hexagonal boron nitride // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2015, v.365, pp.235–239
 254. Suri K., Subramanian C., Murthy T.S.R.Ch. Development of boron-based materials for nuclear applications // Technology Development Article and Materials Group, 2010, v.313, pp.14-22
 255. Subramanian C., Suri A.K. Development of boron and other boron compounds of nuclear interest // Technology Development Article and Materials Group, 2005, v.313, pp.237-244
 256. Sudagar J., Lian J., Sha W. Electroless nickel, alloy, composite and nano coatings - A critical review // Journal of Alloys and Compounds, 2013, v.571, pp.183-204
 257. Subhash G., Awasthi A.P., Kunka C., Jannotti P., DeVries M. In search of amorphization-resistant boron carbide // Scripta Materialia, 2016, v.123, pp.158-162
 258. Suthar L., Jha V. K., Bhadala F., Roy M., Sahu S. Studies on structural, electrical, thermal and magnetic properties of YFeO₃ ceramic // Applied Physics A, 2017, v.123, pp.668
 259. Tashmetov M., Abdurakhimov B., Mirzayev M.N., Thang T.X. The effect of electron beam to nanocrystallites size, strain and structural parameters of the silicon carbide nanopowder // International Journal of Modern Physics B, 2019, v.33, pp.1950223

260. Taniguchi T., Watanabe K. Synthesis of high-purity boron nitride single crystals under high pressure by using Ba-BN solvent // *Journal of Crystal Growth*, 2007, v.303, pp.525-529
261. Tengku Kamarul Bahri T.N.H., Wagiran H., Hussin R., Hossain I., Kadni T. Thermoluminescence properties of CaO-B₂O₃ glass system doped with GeO₂ // *Radiation Physics and Chemistry*, 2014, v.102, pp.103-107
262. Tea K.K., Jaeyun M., Bryan V.S., Dongwon Ch., Calvin J.G., Jae-Young J., Gang W., Renkun Ch., Zhaowei L., Yu Q., Sungho J. Si boride-coated Si nanoparticles with improved thermal oxidation resistance // *Nano Energy*, 2014, v.9, pp.32-40
263. Tonguç O., Seda Y. Hexagonal boron nitride and polydimethylsiloxane: a ceramic rubber composite material for neutron shielding // *Radiation Physics and Chemistry*, 2018, v.152, pp.93-99
264. Topsakal M., Aktürk E., Ciraci S. First-principles study of two- and one-dimensional honeycomb structures of boron nitride // *Physical Review B*, 2009, v.79, pp.115442
265. Tong C.Q., Cheng L.F., Yin X.W., Zhang L.T., Xu Y.D. Oxidation behavior of 2D C/SiC composite modified by SiB₄ particles in inter-bundle pores // *Composites Science and Technology*, 2008, v.68, pp.602-607
266. Tsagareishvili G.V., Nakashidze T.G., Jobava J.Sh., Lomidze G.P., Khulelidze D.E., Tsagareishvili D.Sh., Tsagareishvili O.A. Thermal expansion of boron and boron carbide // *Journal of the Less Common Metals*, 1986, v.117, pp.159-161
267. Trukhanov S.V., Trukhanov A.V., Turchenko V.A., Kostishyn V.G., Panina L.V., Kazakevich I.S., Balagurov A.M. Structure and magnetic properties of BaFe_{11.9}In_{0.1}O₁₉ hexaferrite in a wide temperature range // *Journal of Alloys and Compounds*, 2016, v.689, pp.383-393

268. Trukhanov A.V., et al. Magnetic properties and Mössbauer study of gallium doped M-type barium hexaferrites // *Ceramics International*, 2017, v.43, pp.12822-12827
269. Turner G.L. Boron-11 nuclear magnetic resonance spectroscopic study of borate and borosilicate minerals and a borosilicate glass // *Journal of Magnetic Resonance*, 1986, v.67, pp.544-550
270. Ulrich S., Ehrhardt H., Schwan J., Samlenski R., Brenn R. Subplantation effect in magnetron sputtered superhard boron carbide thin films // *Diamond & Related Materials*, 1998, v.7, pp.835-838
271. Ullmann J., Baglin J.E.E., Kellock A.J. Effects of MeV ion irradiation of thin cubic boron nitride films // *Journal of Applied Physics*, 1998, v.83, pp.2980
272. Vervisch V., Issa F., Biondo S., Ottaviani L., Vervisch W., Szalkai D., Vermeeren L., Klix A., Hallen A., Kuznetsov A., Lazar M., Lyoussi A. Thermal neutron detection enhancement by ^{10}B implantation in silicon carbide sensor // *Materials Research Society Symposium Proceedings*, 2014, v.1693, pp.185-192
273. Vladislav D., Reynaud S, Richard A., Chhowalla M. Boron Carbide: structure, properties, and stability under stress // *Journal of American Ceramic Society*, 2011, v.94, pp.3605.
274. Vlasse M., Slack G.A., Garbaskas M., Kasper J.S., Viala J.C. The crystal structure of SiB_6 // *Journal of Solid State Chemistry*, 1986, v.63, pp.31-45.
275. Vogler T. J., Reinhart W.D., Chhabildas L.C. Dynamic behavior of boron carbide // *Journal of Applied Physics*, 2004, v.95, pp.4173
276. Wang J., Ma F., Sun M. Graphene, hexagonal boron nitride, and their heterostructures: properties and applications // *RSC Advances*, 2017, v.7, pp.16801-18822
277. Wang L., et al. From ultrathin nanosheets, triangular plates to nanocrystals with exposed (102) facets, a morphology and phase transformation of sp^2 hybrid BN nanomaterials // *RSC Advances*, 2014, v.4, pp.14233-14240

278. Wang Y.Q. Crystalline boron nanowires // *Applied Physics Letters*, 2003, v.82, pp.272
279. Watanabe K., Taniguchi T., Kanda H. Direct-bandgap properties and evidence for ultraviolet lasing of hexagonal boron nitride single crystal // *Nature Materials*, 2004, v.3, pp.404-409
280. Werheit H., et al. IR-Active phonons and structure elements of isotopeenriched boron carbide // *Journal of Solid State Chemistry*, 2000, v.154, pp.79-86
281. Weston L., Wickramaratne D., Mackoite M., Alkauskas A., . Van de Walle C.G. Native point defects and impurities in hexagonal boron nitride // *Physical Review B*, 2018, v.97, pp.214104
282. Wood C., Emin D., Gray P.E. Thermal conductivity behavior of boron carbides // *Physical Review B*, 1985, v.31, pp.6811
283. Wu J.J., Mu W.H., Yang B., Dai Y.N., Morita K. Boron removal from metallurgical grade silicon by oxidizing refining // *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2009, v.19, pp.463-467
284. Xiaoyu C., Xiaowei Y., Xiaokang M., Xiaomeng F., Laifei Ch., Litong Zh. Oxidation behavior of SiBC matrix modified C/SiC composites with different interphase thicknesses // *Ceramics International*, 2015, v.41, pp.1695-1700
285. Yanchao W., Jian L., Zhu L., Yanming M. Crystal structure prediction via particle-swarm optimization // *Physical Review B*, 2010, v.82, pp.094116
286. Yan X.Q., et al. Depressurization amorphization of single-crystal boron carbide // *Physical Review Letters*, 2009, v.102, pp.075505
287. Yang X., Lia H., Lia Y., Lv X., Zou G. Synthesis and optical properties of purified translucent, orthorhombic boron nitride films // *Journal of Crystal Growth*, 2010, v.312, pp.3434-3437
288. Yawale S.P., Pakade S.V., Adganokar C.S. New type of behavior in ultrasonic velocity and adiabatic compressibility of $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3$ glass // *Acoustica*, 1995, v.81, pp.184-188

289. Yeh C.L., Kuo K.K., Klimkiewicz M., Brown P.W. Environmental scanning electron microscopy studies of diffusion mechanism of boron particle combustion // *Scanning*, 1997, v.19, pp.114-118
290. Yoshida T., Yuasa S. Effect of water vapor on ignition and combustion of boron lumps in an oxygen stream // *Proceedings of the Combustion Institute*, 2000, v.28, pp.2735-2741
291. Yu J., et al. Vertically aligned boron nitride nanosheets: Chemical vapor synthesis, ultraviolet light emission and superhydrophobicity // *ACS Nano*, 2010, v.4, pp.414-422
292. Yuana Z., Xiong Mei., Yu D. A novel metallic silicon hexaboride, $Cmca-B_6Si$ // *Physics Letters A*, 2020, v.384, pp.126075
293. Zaitsev A.I., Kodentsov A.A. Thermodynamic properties and phase equilibria in the Si-B system // *Journal of Phase Equilibria*, 2001, v.22, pp.126-135
294. Ziegler J.F. The stopping and range of ions in solids // *Ion Implantation Science and Technology*, 1988, v.10. pp.122-156
295. Zobelli A., Ewels C.P., Gloter A., Seifert G. Vacancy migration in hexagonal boron nitride // *Physical Review B*, 2007, v.75, pp.094104
296. Zhuravlev E., Schick C. Fast scanning power compensated differential scanning nano-calorimeter: 1. The device // *Thermochimica Acta*, 2010, v.505, pp.1-13
297. Zhang, B., Lailei W., Zhihong L. Predicted structural evolution and detailed insight into configuration correlation, mechanical properties of silicon–boron binary compounds // *RSC Advances*, 2017, 26, pp.16109-16118
298. Zhestkov B.E., Vaganova M.L., Lebedeva Y.E. et al. Influence of nitrogen high-speed flow impact on the structure and chemical composition of high-temperature coating on SiC composite // *High Temperature*, 2018, v.56, pp.378-381
299. Zheng F., Zhou G., Hao S., Duana W. Structural characterizations and

- electronic properties of boron nitride nanotube crystalline bundles // The Journal of Chemical Physics, 2005, v.123, pp.124716
300. Zhuravlev E., Schick C. Fast scanning power compensated differential scanning nano-calorimeter: 2. Heat capacity analysis // *Thermochimica Acta*, 2010, v.505, pp.14-21
301. Zhu J., Huang J.F., Cao L.Y., Wu J.P. Influence of the content of B₄C on microstructure and oxidation resistance of carbon/carbon composites modified by a sol-gel/solvothermal process // *Key Engineering Materials*, 2012, v.512-515, pp.757-760
302. Zhang Y., Crespillo M.L., Xue H, et al., New ion beam materials laboratory for materials modification and irradiation effects research // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2014, v.338, pp.19-30
303. Zlokazov V.B., Chernyshev V.V. MRJA-a program for a full profile analysis of powder multiphase neutron-diffraction time-of-flight (direct and Fourier) spectra // *Journal of Applied Crystallography*, 1992, v.25, pp.447-451
304. Zinkle S.J., Snead L.L. Influence of irradiation spectrum and implanted ions on the amorphization of ceramics // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 1996, v.116, pp.92-101
305. Zsako J. Kinetic analysis of thermogravimetric data // *The Journal of Physical Chemistry*, 1980, v.19, pp.333-339
306. Zuo X., Zhang L., Liu Y., Cheng L., Xia Y. Oxidation behaviour of two-dimensional C/SiC modified with self-healing Si-B-C coating in static air // *Corrosion Science*, 2012, v.65, pp.87-93
307. Zubar T.I., Sharko S.A., Tishkevich D.I., Kovaleva N.N., Vinnik D.A., Gudkova S.A., Trukhanova E.L., Trofimov E.A., Chizhik S.A., Panina L.V., Trukhanov S.V., Trukhanov A.V. Anomalies in Ni-Fe nanogranular films growth // *Journal of Alloys and Compounds*, 2018, v.748, pp.970-978

308. Zuppiroli L., Lesueur D. Modelling the swelling and microcracking of boron carbide under neutron irradiation // *Philosophical Magazine A*, 1989, v.60, pp.539-551