

NANOKRİSTALLİK SİLİSIUM KARBİD (3C-SiC) HİSSƏCİKLƏRİNDƏ NEYTRON SELİNİN TƏSİRİ İLƏ DEFEKT HALLARININ YARANMASI

E.M. HÜSEYNOV

AMEA - nın Radiasiya Problemləri İnstitutu, AZ-1143, B.Vahabzadə 9, Bakı, Azərbaycan Milli Nüvə Tədqiqatları Mərkəzi, AZ-1073, İnşaatçılar pr., 4, Bakı, Azərbaycan
elchin.h@yahoo.com

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

Açar sözlər: nanokristallik 3C-SiC, neytron defektləri, nanomaterial

PACS: 61.46.+w, 28.20.-v, 25.85.Ec, 28.20.Gd, 61.80.Hg

1. GİRİŞ.

Mükəmməl fiziki və kimyəvi xassələrə malik olan silisium karbid geniş tətbiq sahəsinə malikdir [1-9]. Oksidləşmə və ionlaşdırıcı şüalanmaya qarşı yüksək müqavimətə malik olması silisium karbidin tətbiq potensialını artırır. Eyni zamanda, silisium karbid yüksək temperaturlarda davamlı material kimi geniş tətbiq olunur [10-15]. Müasir zamanda silisium karbid dünyanın ən sərt materialları (almaz və bor nitritdən sonra) sırasında qərarlaşıb. Bunun isə əsas səbəblərindən biri silisium karbidi təşkil edən Si və C atomları arasındakı məsafənin təqribən 1.89Å kimi çox kiçik və güclü olmasıdır. Sadalanan xüsusiyyətlər silisium karbidin kosmik və nüvə texnologiyalarında tətbiq imkanlarını artırır. Lakin ionlaşdırıcı mühitlərdə tətbiqi zamanı, digər materiallarda olduğu kimi, bu tip materiallarda da struktur defektləri yaranır [16-19]. Yaranmış defektlər silisium karbidin kosmik və nüvə texnologiyalarında yararlılıq müddətinə təsir edir. Belə ki, ionlaşdırıcı mühitdə istifadəsi zamanı materiallarda yaranan struktur defektləri onların istifadə imkanlarını və müddətini azaldır.

Nano ölçülərdə çox böyük xüsusi səth sahəsinə (Specific Surface Area - SSA) malik olan nanomateriallar fərqli fiziki xüsusiyyətli olurlar. Nano ölçülərdə, digər materiallarda olduğu kimi, silisium karbidin də özünəməxsus funksional və yeni fərqli fiziki xassələri mövcuddur [20-23]. Bu xüsusiyyətlər nəzərə alınaraq, nanokristallik 3C-SiC üzərində ionlaşdırıcı şüalanma effektləri təəffüzsizdən hərtərəfli araşdırılmaqdadır [24-30]. Nanomateriallarda xüsusi səth sahəsinin böyük olması, səthdə baş verən fiziki proseslərdə və xüsusən də defektmələgəlmə proseslərində kəskin fərqi yaranmasına səbəb ola bilər. Təqdim olunan işdə neytron selinin təsiri nəticəsində nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində mümkün nöqtəvi defektlərin yaranması araşdırılmışdır. Qeyd edək ki, neytron selinin təsiri ilə materiallarda defektmələgəlmə prosesləri olduqca mürəkkəbdır [31,32]. Belə ki, neytronlarla şüalanma nəticəsində yaranmış yeni defektlərin təbiətini tam olaraq bir yanaşma ilə izah etmək mümkün deyil. Digər tərəfdən, neytronlarla şüalanma zamanı yaranmış defektin təbiəti və forması ehtimalı prosesdir ki, bunun da nəticəsində dəqiq olaraq hansı növ neytron qarşılıqlı təsirinə sonradan hansı tip defektin yaranmasını demək müm-

kün deyil. Məhz bu səbəbdən, təqdim olunan işdə neytron seli ilə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaranan nöqtəvi defektlər və onların təbiəti yalnız müəyyən yanaşmalarla öyrənilmişdir.

2. NƏZƏRİ YANAŞMALAR.

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

$$E_1 = T_1 + T_2 + Q \quad (1)$$

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

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

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

$$T_m = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad (3)$$

Düşən neytronun enerjisindən asılı olaraq hədəf atoma ötürülən enerjinin müəyyən limit qiymətindən sonra qəfəs atomu öz yerindən çıxı bilər və bu hal ədəbiyyatlarda “əsas yerdəyişmiş atomlar” (primary knock-on atoms -

PKA) adlanır. PKA halının enerjisi hədəf materialın tipindən, neytronların səpilmə bucağından və enerjisindən asılı olaraq sıfırdan T_m -ə qədər ola bilər. Fərqli PKA enerjiləri müxtəlif tip defektlərin yaranmasına səbəb ola bilər. Ümumi yanaşmada PKA-nın yaranması müəyyən mənada Frenkel cütlərinin yaranması deməkdir. Real halda prosesdə bir neytron yox, neytron seli iştirak edir ki, bu halda da şüalanmaya perpendikulyar istiqamətdə keçən, 1sm^2 sahədə enerjisi E olan neytronların sayı neytron seli adlanır və aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$\phi = \int_0^\infty \phi(E) dE \quad (4)$$

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

$$\phi(E_a, E_b) = \int_{E_a}^{E_b} \phi(E) dE \quad (5)$$

burada, E_a və E_b neytronların verilmiş aralıqlarda enerjilərinin sərhəddir. Tədqiqat reaktorlarında neytronlarla şüalanma zamanı adətən neytronların enerjisi $\phi(E)$ geniş aralıqda olur ($0-20\text{MeV}$). Bu səbəbdən, təcrübələr aparılan neytronları adətən enerjilərinə əsasən üç qrupa bölürlər:

$$\phi(E) = \phi_t(E) + \phi_{ept}(E) + \phi_s(E) \quad (6)$$

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

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{k_1}{k_0} \hat{S}(Q, \omega) \quad (7)$$

burada, $\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega}$ təcrübələrdə uyğunlaşdırılmış ikiqat diferensial effektiv en kəsiyi, k_1 və k_0 uyğun olaraq düşən və səpilən neytronların dalğa vektorları, $\hbar Q = \hbar(k_0 - k_1)$ impuls və $\hbar\omega$ isə enerji ötürülməsini ifadə edir. Ümumi səpilmə funksiyası $\hat{S}$ individual səpilmə funksiyaları $S_{v,i}$ və $S_{v,\mu}$ – nin cəminə bərabərdir [16-19]:

$$\hat{S}(Q, \omega) = \sum_{v=1}^{v_0} \frac{\sigma_{i,v}}{4\pi} S_{v,i}(Q, \omega) + \sum_{v,\mu=1}^{v_0} b_v b_\mu S_{v,\mu}(Q, \omega) \quad (8)$$

burada, v_0 neytronların nümunədən səpilməsinin individual elementi, koherent səpilmə uzunluğu, $\sigma_{i,v}$ səpilmə zamanı v individual elementinin effektiv en kəsiyidir. Elastik səpilmə halında ümumi effektiv en kəsiyi individual və en kəsiklərinin konsentrasiyasının cəmi kimi ifadə edilə bilər [18-19]:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{el} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{el,i} + \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{el,c} \quad (9)$$

burada

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{el,i} = \sum_{v=1}^{v_0} c_v \frac{\sigma_{i,v}^0}{4\pi} = \sum_{v=1}^{v_0} c_v \frac{\sigma_{i,v}}{4\pi} e^{-2W_v} \quad (10)$$

və

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{el,c} = \frac{1}{N} \left| \sum_{n=1}^N b_n^0 e^{iQ \cdot r_n} \right|^2 = \frac{1}{N} \left| \sum_{n=1}^N b_n e^{-W_n} e^{iQ \cdot r_n} \right|^2 \quad (11)$$

Son bərabərlikdə ümumi atomlar sayının cəmi (N) kristal daxilində neytronların səpilməsi zamanı ortalama defekt strukturunu xarakterizə edə bilər [17-19]. Qeyd edək ki, bir çox hallarda ionlaşdırıcı şüalanmanın yaratdığı defektlər və ya sürüşmələr müəyyən zaman intervalında termik işləndikdə rekombinasiya (bərpa) oluna bilər. Bu halda, rekombinasiya olunma funksiyaları arasındakı qarşılıqlı əlaqəni aşağıdakı kimi ifadə edə bilərik:

$$f(t) = \left(\frac{\Delta l_i}{l_0} - \frac{\Delta l_t}{l_0} \right) \left(\frac{\Delta l_i}{l_0} - \frac{\Delta l_f}{l_0} \right) \quad (12)$$

burada, Δl_i şüalanma nəticəsində yaranan ümumi dəyişiklik, Δl_t t müddətində termik işlənmədə baş verən dəyişiklik, Δl_f uzun müddət termik işlənmədə mövcud dəyişiklik və l_0 şüalanmadan əvvəlki vəziyyəti xarakterizə edir. Beləliklə, $T=0$ halında $f(t)=0$ olur. Təcrübi nəticələrə əsasən $f(t)$ funksiyası aşağıdakı kimi xarakterizə oluna bilər [18,19]:

$$f(t) = K_1 \ln \left(1 + \frac{t}{t_0} \right) \quad (13)$$

burada, K_1 və t_0 material tipindən və termik işlənmə temperaturundan asılı olan sabit kəmiyyətlərdir. Materialda ionlaşdırıcı şüalanma nəticəsində yaranmış defektlərin rekombinasiya olunma dərəcələri (12) bərabərliyindən aşağıdakı kimi qiymətləndirilə bilər:

$$\frac{df(t)}{dt} = f(t) K_2 \exp \left\{ - \frac{\delta_0 - \beta_f f(t)}{RT} \right\} \quad (14)$$

burada, K_2 , δ_0 və β_f temperaturdan asılı olaraq eksperimentlərdən təyin oluna bilən sabitlərdir. Neytron selinin aşağı sıxlıqlarında Frenkel cütlərinin yaranması ehtimalı

limitli olur. Bu zaman defektlərin rekombinasiyası daha asan olur və bu hal Aspelinq tərəfindən ətraflı öyrənilmişdir [16-19]. Material daxilində ionlaşdırıcı şüalanma nəticəsində yaranmış Frenkel cütlərinin konsentrasiyası aşağıdakı bərabərliklə təyin oluna bilər [17-19]:

$$c_0 = \phi \sigma_a \bar{N} \quad (15)$$

burada, ϕ neytron seli, σ_a neytronların udulmasının effektiv en kəsiyi, $\bar{N}$ hər neytron zəbtində yaranan mümkün Frenkel cütlərinin sayıdır. Bu halda rekombinasiya funksiyası aşağıdakı kimi təyin oluna bilər [16-19]:

$$f_l(t) = \frac{c_0 - c(t)}{c_0} \quad (16)$$

burada, $c(t)$ müəyyən t müddətində termik işlənmədən sonra mövcud Frenkel cütlərinin konsentrasiyasıdır. Aydındır ki, $t=0$ halında $f_l(t)=0$ olar. Üçölçülü diffuziya modeli üçün rekombinasiya funksiyası aşağıdakı kimi ifadə olunur [16-19]:

$$f_l(t) = 4\pi r_v \int_{r_v}^{\infty} g_l(r) \exp\left\{-\frac{r_v - r}{\sqrt{4D_l t}}\right\} dr \quad (17)$$

burada, r_v rekombinasiya olunan boşluğun radiusu, r_v mövcud defektlər arasındakı məsafə, D_l defektlərin diffuziya koeffisiyenti və $g_l(r)$ boşluq ətrafındakı defektlərin paylanma funksiyasıdır.

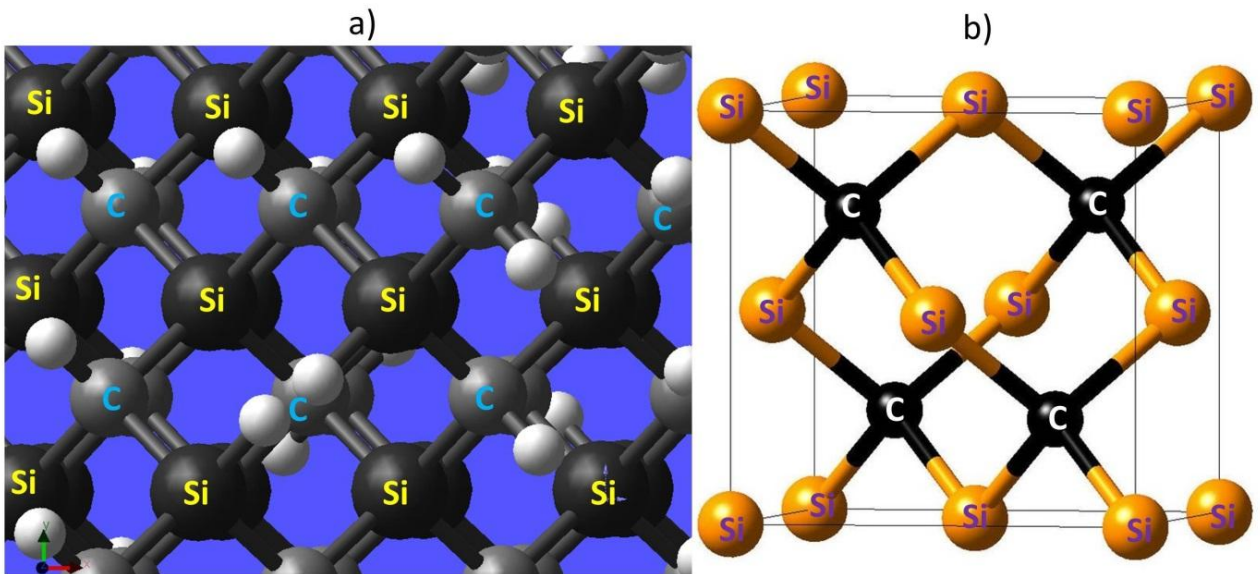
3. NƏTİCƏ VƏ MÜZAKİRƏLƏR.

Defektlərin yaranması üçün zəruri olan (n, γ) və (n, n') nüvə reaksiyaları NNDC (National Nuclear Data Center) bazasından və ENDF (Evaluated Nuclear Data

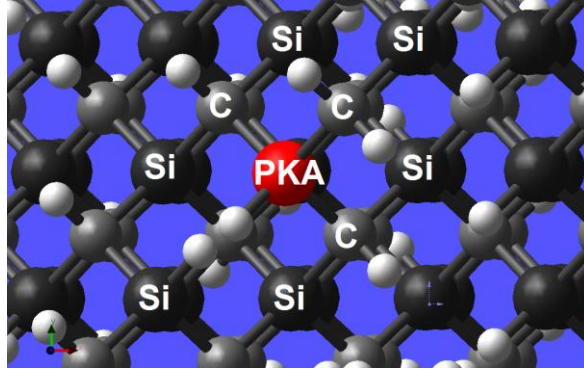
File) sistemlərindən istifadə olunaraq öyrənilmişdir. Neytron selinin nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaratdığı defektlərin təbiəti və növləri “Virtual NanoLab” və “Atomistix ToolKit” proqramlarında kompüter modelləşməsi ilə öyrənilmişdir.

Neytronlarla şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində daha çox ehtimalı olan qəfəs atomlarının mümkün yerdəyişməsi (Primary Knock-on Atom - PKA), yüksək enerji təpməsi nəticəsində kaskadların yaranması, Frenkel cütləri, Si və C boşluqlarının yaranması kimi defekt halları nəzərdən keçirilmişdir. İlk olaraq ümumi şəkildə nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fəza quruluşunu nəzərdən keçirək (şəkil 1). Məlumdur ki, 3C-SiC kristalları qəfəs parametrləri $a=b=c=4.3596\text{Å}$ olan kubik modifikasiyadadır. Nanokristallik 3C-SiC hissəcikləri Si və C atomlarının kovalent rabitələri ilə formalaşmışdır (şəkil 1a). 3C-SiC nanokristallarını təşkil edən hər bir silisium atomları qonşu dörd karbon atomları ilə, və əksinə, hər bir C atomları qonşu dörd Si atomları ilə tetraedrik formada kovalent rabitələrlə birləşmişdir (şəkil 1b).

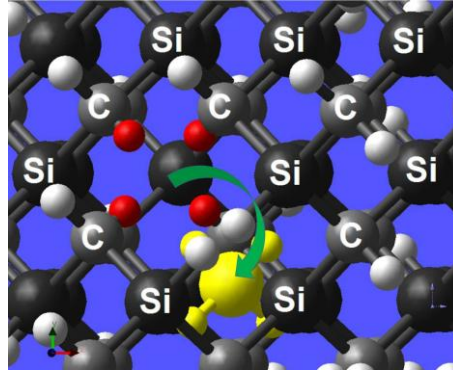
Neytron seli ilə şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində mümkün PKA yaranmasını nəzərdən keçirək (şəkil 2). PKA dedikdə, neytronlarla şüalanma zamanı neytronun birbaşa qarşılıqlı təsirdə olduğu ilk atom nəzərdə tutulur. Bu halda, düşən neytronların və hədəf atomun kristal qəfəsdə saxlanma enerjisindən asılı olaraq, PKA bir və ya bir neçə atomu qəfəsdən çıxara bilər. Müəyyən mənada PKA hallarının yaranması Frenkel cütlərinin yaranmasına ekvivalentdir. Belə ki, bir prosesdə qəfəsi tərk edən atomlardan ilki PKA adlanır, digərləri isə, ilkin atom da daxil olmaqla, Frenkel cütləri yarada bilər (şəkil 3). PKA hallarından bir neçə Frenkel cütünün yaranması üçün düşən neytronun enerjisi qəfəs atomunun enerjisinin tam misillərindən böyük olmalıdır. Başqa sözlə, əgər qəfəs atomlarının sərhəd enerjisi E olarsa, PKA – dan bir neçə Frenkel cütünün yaranması üçün neytronun minimal enerjisi $2E$, $3E$ və s. böyük olmalıdır.



Şəkil 1. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərinin fəza quruluşunun ümumi təsviri.

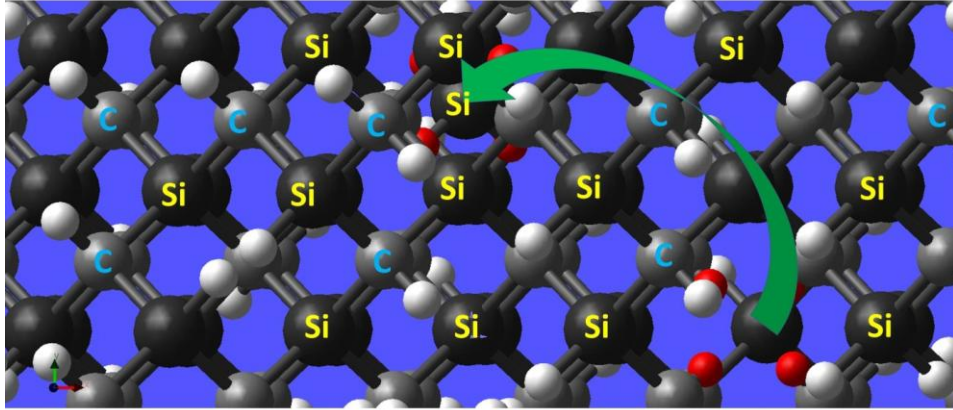


Şəkil 2. Neytron seli ilə şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində yaranan PKA halları (Si atomu təmsalında).

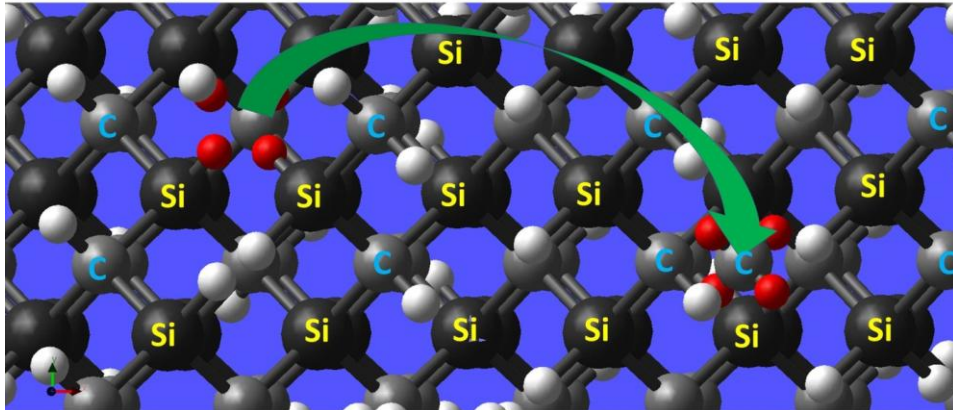


Şəkil 3. Neytron seli ilə şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində Frenkel cütlərinin yaranma modeli (Si atomu təmsalında)

Silicon vacancy



Carbon vacancy

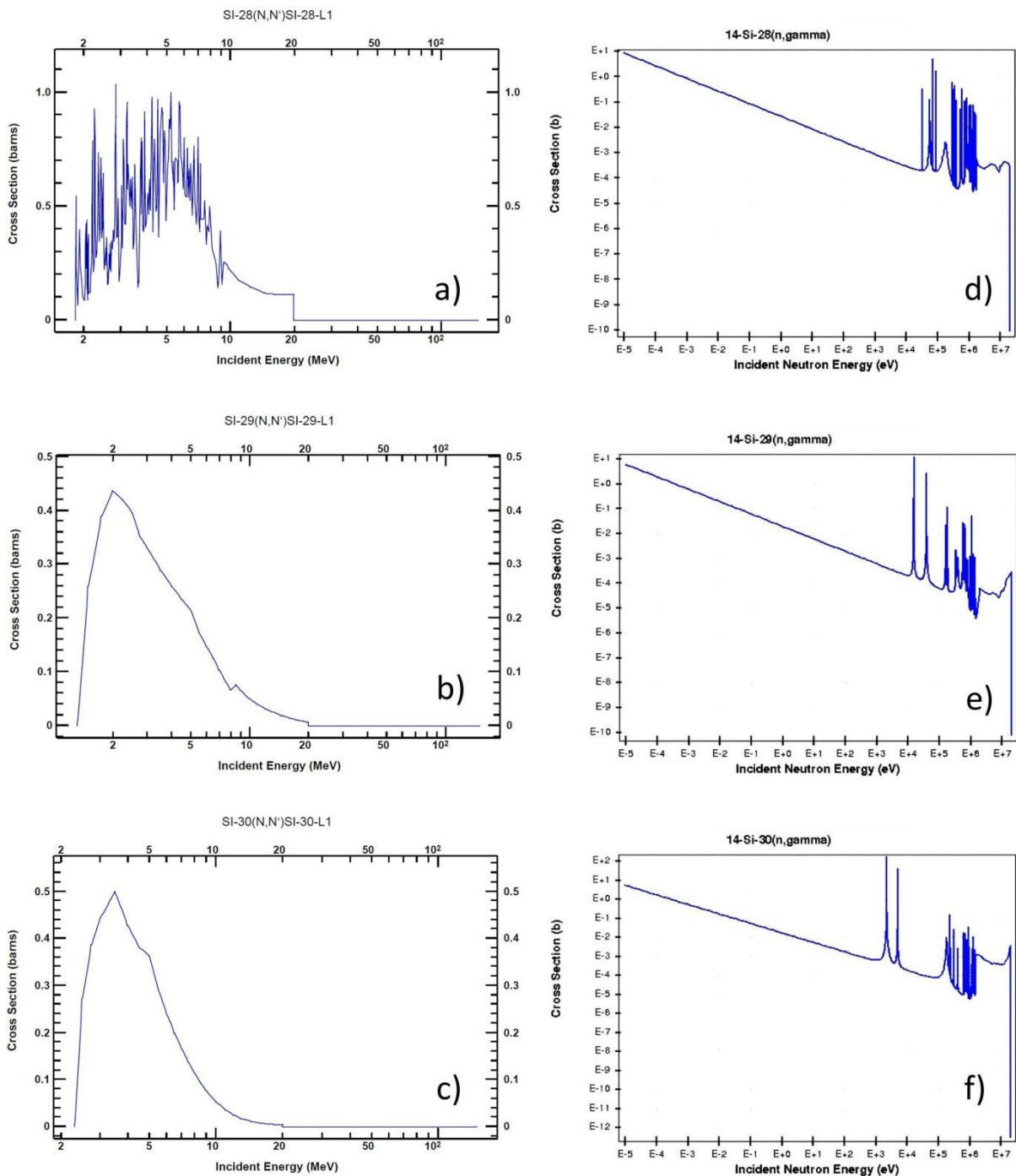


Şəkil 4. Neytron seli ilə şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində Si və C boşluqlarının yaranma modeli.

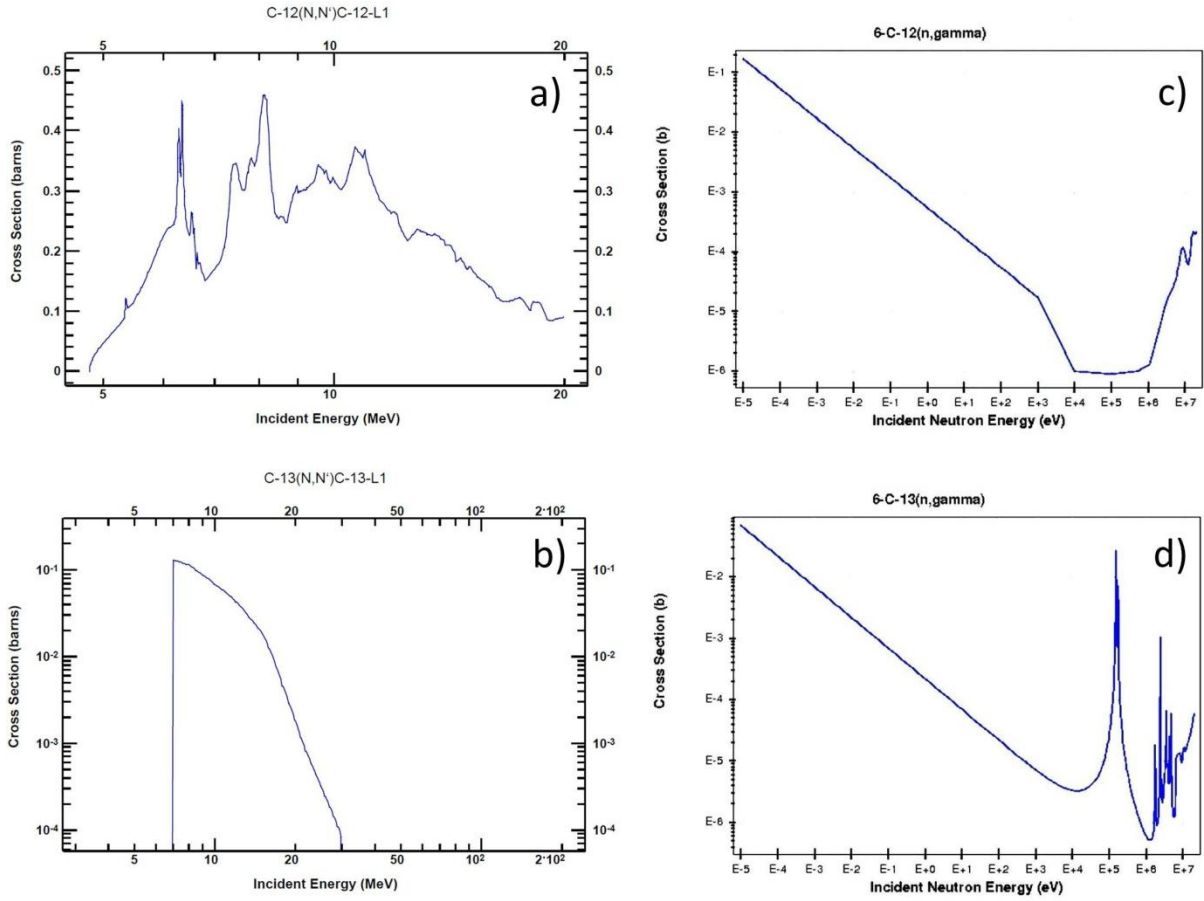
Yaranmış Frenkel cütləri prosesdə iştirak edən neytronların enerjisindən asılı olaraq, stabil və ya qeyri-stabil olmaqla, C və Si atomları vasitəsi ilə mümkün ola bilər. Nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində Si və C atomları vasitəsi ilə mümkün Frenkel cütlərinin yaranmasına ekvivalent olaraq boşluq halların (Si və ya C vakansiyaları) yaranması mümkündür (şəkil 4).

Neytron seli ilə şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində Si və C atomları vasitəsi ilə mümkün boşluqların yaranması yalnız o hallarda mümkün ola bilər ki, nüvə çevrilmələri olmadan düşən neytronun enerjisi kristal qəfəsdən uyğun izotopu çıxarmağa kifayət etsin. Belə ki, əgər prosesdə hər hansı (n,p) , (n,α) və s. kimi nüvə çevrilmələri baş verərsə, bu zaman uyğun boşluqların

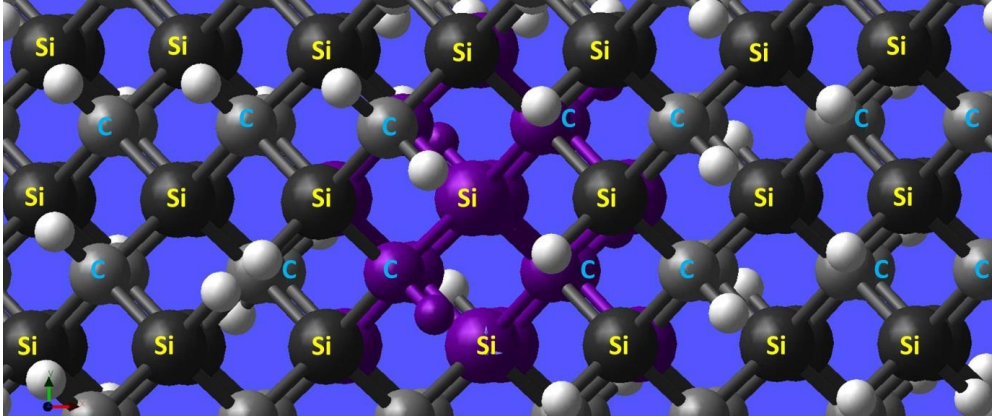
yaranma ehtimalı sıfıra qədər azalar. Ümumi yanışmada, adətən, neytronlarla şüalanma zamanı defektlərin yaranması üçün (n,γ) və ya (n,n') nüvə reaksiyalarından hər hansı birinin baş verməsi zəruridir. Bu tip nüvə reaksiyalarının baş vermə ehtimalı birbaşa hər bir nüvə üçün xarakterik olan effektiv en kəsiyi ilə xarakterizə olunur. Belə ki, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərini təşkil edən Si və C atomlarının fərqli stabil izotoplarında (təbii tərkib Si üçün 92.23% ^{28}Si , 4.67% ^{29}Si və 3.1% ^{30}Si , C üçün 98.93% ^{12}C və 1.07% ^{13}C) effektiv en kəsiyi fərqli olduğu üçün hər bir stabil izotop üçün (n,γ) və (n,n') nüvə reaksiyaları ayrılıqda öyrənilmişdir. İlk öncə Si izotopları üçün (n,γ) və (n,n') nüvə reaksiyalarını nəzərdən keçirək (şəkil 5).



Şəkil 5. Neytron selinin silisium fərqli stabil izotoplarında yaratdığı (n,n') və (n,γ) nüvə reaksiyalarının effektiv en kəsiyi spektrləri.



Şəkil 6. Neytron selinin karbonun fərqli stabil izotoplarında yaratdığı (n,n') və (n,γ) nüvə reaksiyalarının effektiv en kəsiyi spektrləri.



Şəkil 7. Neytron seli ilə şüalanma zamanı nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində kaskadların yaranma modeli

Spektrlərdən görüldüyü kimi, (n,n') nüvə reaksiyaları 2MeV-10MeV enerjili neytronlarda daha çox ehtimallıdır (şəkil 5 a,b,c). Enerjinin $E > 10\text{MeV}$ qiymətindən sonra prosesin effektiv en kəsiyi, demək olar ki, sıfıra qədər azalır. Belə olan halda isə, $E > 10\text{MeV}$ enerjilərdə silisium izotopları üçün (n,n') nüvə reaksiyaları, demək olar ki, baş vermir. Başqa sözlə, düşən neytronların enerjilərinin nisbətən böyük qiymətlərində nöqtəvi defektlərdən daha çox xətti, laylı və s. tip defektlər yarada, və ya digər nüvə reaksiyaları baş verə bilər. Digər tərəfdən, fərqli stabil Si izotoplarında (n,γ) nüvə reaksiyaları enerjinin təqribən 1MeV ətrafında rezonans halda olur (şəkil 5d,e,f). Ümumi yanaşmada buradan belə nəticəyə gəlmək olar ki, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində silisium izotopları vasi-

təsi ilə mümkün nöqtəvi defektlərin yaranma ehtimalı düşən neytronların 1MeV-10MeV enerji aralığında maksimum olur. Eyni zamanda, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində C izotopları ilə (n,γ) və (n,n') nüvə reaksiyalarının effektiv en kəsikləri neytronun enerjisinin funksiyası kimi öyrənilmişdir (şəkil 6).

(n,n') nüvə reaksiyaları C izotopları üçün enerjinin təqribən 7MeV-10MeV intervalında daha intensiv olur (şəkil 6 a,b). Digər tərəfdən, stabil C izotoplarında (n,γ) nüvə reaksiyaları enerjinin 0.1MeV-1MeV intervalında rezonans haldadır (şəkil 6 c,d). Ümumi yanaşmada demək olar ki, Si izotoplarında olduğu kimi, C izotoplarında da enerjinin maksimum 10MeV qiymətində effektiv en kəsiyi intensiv olur. Başqa sözlə, ümumi halda demək olar

ki, düşən neytronların enerjisinin 0.1MeV-10MeV intervalında C izotopları vasitəsilə nöqtəvi defektlərin yaranma ehtimalı maksimum olur. Neytronlarla şüalanma zamanı düşən neytronların enerjisinin $E < 1\text{MeV}$ qiymətlərində nöqtəvi defektlərin yaranması ilə yanaşı həm Si, həm də C izotopları vasitəsilə kasqad hallarının yaranması daha çox ehtimallıdır (Şəkil 7).

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

4. NƏTİCƏLƏR.

Aparılan analizlərdən məlum olmuşdur ki, nanokristallik 3C-SiC hissəciklərində neytron selinin təsiri ilə yaranan fərqli təbiətli defektlər düşən neytronların enerjisdən müəyyən qədər asılıdır. Düşən neytronun enerjisinin qiymətinə uyğun olaraq hansı tip defektin yaranma ehtimalının daha çox olması haqda öncədən fikir söyləmək mümkündür. Eyni zamanda, defektlərin yaranması üçün neytronların daha çox ehtimalı enerjiyə qiymətləndirilmişdir və məlum olmuşdur ki, nöqtəvi defektlər adətən (n,γ) və (n,n') nüvə reaksiyalarında daha çox ehtimallıdır. Analizlərdən məlum olmuşdur ki, Si izotopları üçün (n,n') nüvə reaksiyaları 2MeV-10MeV enerjili və (n,γ) nüvə reaksiyaları isə təqribən 1MeV enerjili neytronlarla daha çox ehtimallıdır. Digər tərəfdən, C izotopları üçün (n,γ) nüvə reaksiyalarının enerjisinin 0.1MeV-1MeV intervalında və (n,n') nüvə reaksiyalarının enerjisinin təqribən 7MeV-10MeV intervalında daha çox intensiv olması tapılmışdır.

- [1] Subhash Singh, Keerti Rathi, Kaushik Pal. Journal of Alloys and Compounds, 2018, 740, 436-445.
- [2] Priya Darshni Kaushik, Ivan G. Ivanov, Pin-Cheng Lin et al. 2017, Applied Surface Science 403, 707-716.
- [3] Chanukorn Tabtimsai, Vithaya Ruangpornvisuti, Sarawut Tontapha, Banchob Wannoo. Applied Surface Science 439, 494-505, 2018
- [4] Qian Xun, Boyang Xun, Zuxin Li, Peiliang Wang, Zhiduan Cai. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2017, 70, 1336-1342.
- [5] I.G. Ivanov, A. Stelmach, M. Kleverman, and E. Janzén. Phys. Rev. B 73, 2006, 045205.
- [6] Jiaming Zhang, Qiangmin Wei, Jie Lian, Weilin Jiang, William J. Weber and Rodney C. Ewing. Appl. Phys. Lett., 2008, 92, 193107.
- [7] J. Botsoa, V. Lysenko, A. Géloën, O. Marty, J. M. Bluet and G. Guillot. Appl. Phys. Lett., 2008, 92, 173902.
- [8] S.H. Rhim, Y. Qi, G. F. Sun, Y. Liu, M. Weinert, and L. Li. 2011, Phys. Rev. B 84, 125425.
- [9] James L. Mercer. Phys. Rev., 1996, B 54, 4650.
- [10] Yimeng Zhang, Tao Guo, Xiaoyan Tang et al. Journal of Alloys and Compounds, 2018, 731, 1267-1274.
- [11] Danuta Mikociak, Arkadiusz Rudawski, Stanislaw Blazewicz. Materials Science and Engineering; 2018, A 716, 220-227.
- [12] Gabriela Huminic, Angel Huminic, Claudiu Fleaca, Florian Dumitrache, Ion Morjan "Thermo-physical properties of water based SiC nanofluids for heat transfer applications" International Communications in Heat and Mass Transfer 84, 94–101, 2017.
- [13] Kai Wei, Kaiyu Wang, Xiangmeng Cheng et al. Applied Thermal Engineering, 2018, 131, 209-220.
- [14] Peipei Wang, Hejun Li, Jia Sun, Ruimei Yuan, Longxin Zhang, Yulei Zhang, Tao Li. Surface and Coatings Technology, 2018, 339, 124-131.
- [15] Hui Deng, Nian Liu, Katsuyoshi Endo, Kazuya Yamamura. Applied Surface Science. 2018, 434, 40-48.
- [16] Rui Tu, Qin Liu, Yingying Li, Wei Xiao. Computational Materials Science. 2018, 142, 427-436.
- [17] Guanglu Jia, Bing Li, Jufan Zhang. Computational Materials Science. 2018, 146, 26-35.
- [18] L. David, Price, Kurt Skold. "Neutron Scattering" Part B, Academic Press. Inc, London, United Kingdom, 1987, 608.
- [19] Jaroslav Koutsky, Jan Kocik "Radiation damage of structural materials" Elsevier Science Publishers, Prague, Czech Republic, 1994, 354.
- [20] M. Arab Juneghani, M. Farzam, H. Zohdirad. "Wear and corrosion resistance and electroplating characteristics of electrodeposited Cr-SiC nano-composite coatings" Transactions of Nonferrous Metals Society of China. 2013, 23/7, 1993-2001.
- [21] M.J. Shen, X.J. Wang, T. Ying, K. Wu, W.J. Song. Journal of Alloys and Compounds. 2016, 686, 831-840.
- [22] Kazuya Shimoda, Joon-Soo Park, Tatsuya Hinoki, Akira Kohyama. Applied Surface Science. 2007, 253/24, 9450-9456.
- [23] Kang-San Kim, Gwi-Sang Chung. Sensors and Actuators A: Physical, 2009, 155, 1, 125-130.
- [24] Elchin Huseynov. Applied Physics A, 2018, 124:19.
- [25] Elchin Huseynov. Silicon, 2018, 10/1, 99-105.
- [26] Elchin Huseynov, Anze Jazbec. Physica B: Condensed Matter, 2017, 517, 30-34.
- [27] Elchin M. Huseynov. NANO 12, 2017, No. 6, 1750068.
- [28] Elchin M. Huseynov. Physica B: Condensed Matter 510, 2017, 99-103.
- [29] Elchin Huseynov. 2017, Silicon 9/5, 753-759.
- [30] Elchin Huseynov. Physics Letters A 380/38, 2016, 3086-3091.

- [31] *M. Klimenkov, E. Materna-Morris, A. Moslang.* Journal of Nuclear Materials, 2011, 417, 124-126.
- [32] *Yangchun Chen, Yu-Hao Lic, Ning Gao et al.* Journal of Nuclear Materials 502, 2018, 141-153.

E.M. Huseynov

**DEFECT FORMATION IN THE NANOCRYSTALLINE SILICON CARBIDE
(3C-SiC) UNDER THE NEUTRON FLUX**

Various defect formation in the nanocrystalline 3C-SiC particles has been studied by computer modeling. Possibility defects and lattice structure of nanocrystalline 3C-SiC particles have been investigated. Simultaneously, for the formation of defects, more possibility energy of the neutron has been calculated. The probability of Si and C vacancies due to the neutron flux influence to the lattice atoms has been investigated. It has been found out that, point defect formation in the nanocrystalline 3C-SiC particles has more probability at the around 5MeV neutron energies.

Э.М. Гусейнов

**ОБРАЗОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КАРБИДЕ КРЕМНИЯ
(3C-SiC) ПОД ДЕЙСТВИЕМ НЕЙТРОННОГО ПОТОКА**

Путем компьютерного моделирования изучены различные варианты возможного образования дефектов и решетчатая структура в нанокристаллических 3C-SiC-частицах. Рассчитана наиболее приемлемая энергия нейтронов для образования дефектов. Исследована вероятность возникновения вакансий Si и C из-за влияния нейтронного потока на атомы решетки. Было обнаружено, что образование точечных дефектов в нанокристаллических 3C-SiC-частицах имеет большую вероятность при энергиях нейтронов около 5 МэВ.

Qəbul olunma tarixi: 16.03.2018