

## La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> PEROVSKİTƏBƏNZƏR MATERIALDA QAMMA KVANTLARIN QURULUŞA VƏ DEFEKT ƏMƏLƏ GƏLMƏSİNƏ TƏSİRİ

A.G. ASADOV<sup>a,b,c</sup>, R.Z. MEHDİYEVA<sup>a</sup>, E.R. HÜSEYNOVA<sup>a</sup>,  
A.İ. MƏMMƏDOV<sup>a</sup>, M.N. NASRABADİ<sup>f,b</sup>, A.A. SİDORİN<sup>b</sup>, M. HOSEİNİ<sup>g</sup>,  
E.D. MUSTAFAYEV<sup>d</sup>, A.S. ABİYEV<sup>b,e</sup>, S.F. SƏMƏDOV<sup>b,d,e</sup>

<sup>a</sup> Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutu, Bakı AZ-1073, Azərbaycan

<sup>b</sup> Beynəlxalq Hökumətlərarası Təşkilatın Birgə Nüvə Tədqiqatları İnstitutu, Dubna, 141980, Rusiya

<sup>c</sup> Xəzər Universiteti, AZ1096, Bakı, Azərbaycan

<sup>d</sup> Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi Radiasiya Problemləri İnstitutu, Bakı, AZ1143, Azərbaycan

<sup>e</sup> Western Kaspi Universiteti, AZ1001 Bakı, Azərbaycan

<sup>f</sup> Fizika Fakültəsi, İsfahan Universiteti, 81746-73441, İsfahan, İran

<sup>g</sup> Arak Universiteti, Fizika kafedrası, P.O. Qutu 38156, Arak, İran

<sup>e</sup> Azərbaycan Memarlıq və İnşaat Universiteti, Bakı, AZ1073, Azərbaycan

Bu işdə qamma kvantlarının La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> keramika birləşməsinin strukturuna və qüsurlar əmələgəlmə mexanizminə təsiri tədqiq edilmişdir. Struktur təhlili üçün rentgen şüalarının difraksiyası (XRD), Raman spektroskopiyası, Qamma şüalanması, Pozitron Annihilasiya Ömürlük Spektroskopiyası və simulyasiyalar aparılmışdır. Tədqiqatımızda, 0, 500 və 1000 kGy udma dozalarında qamma kvantları ilə şüalanmadan sonra La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> birləşməsinin pozitron annihilasiyasının həyat boyu tədqiqatları aparıldı və hər bir nümunənin τ<sub>1</sub> və τ<sub>2</sub> kimi təyin olunmuş iki fərqli ömür komponenti nümayiş etdirdiyi müşahidə edildi. Qamma kvantının təsirindən sonra bütün ömür boyu komponentlərin qiymətində artım müşahidə edilir. Qamma şüalanması pozitronun məhv edilməsi prosesinə təsir edən qüsurlar və struktur dəyişiklikləri yaradır. GAMMATRACK proqramı ilə qamma-radiasiya zərərinin nəzəri hesablanması da tədqiq edilmişdir.

**Açar sözlər:** La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub>, qamma kvant, simulyasiya, PALS, defekt

DOI:10.70784/azip.2.2025326

### Giriş

Radiasiya şəraitində materialların xassələrinin tədqiqi müxtəlif elmi fənlər üçün böyük əhəmiyyət kəsb edir. Bu fundamental anlayış müxtəlif mühəndislik tətbiqləri üçün uyğunlaşdırılmış innovativ materialların dizaynı və inkişafı üçün təməl kimi xidmət edir. Xüsusilə, fazaların sabitliyi və transformasiya prosesləri yüksək temperatur, yüksək təzyiq və müstəsna dərəcədə intensiv radiasiya sahələri kimi ekstremal şəraitin üstünlük təşkil etdiyi ən müasir nüvə enerji sistemlərində istifadə edilən yeni materialların inkişafı üçün həlledici amillərdir. Piroxlor strukturlu A<sub>2</sub>B<sub>2</sub>O<sub>7</sub> keramika birləşmələri, xüsusilə yüksək temperaturlu keramika ifrat keçiriciləri və nanokristal ferroelektrik keramika kontekstində mühüm tədqiqat sahəsidir [1]. Bu materiallar müxtəlif sahələrdə, o cümlədən dielektrik rezonator antenalarında [2], mikrodalğalı qoruyucu [3] və yüksək temperaturlu cihazlarda [4], struktur material kimi istifadə olunur. La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> piroxlor strukturuna aid deyil. Bu birləşmə ətraf şəraitdə P21 fəza qrupuna malik olan unikal laylı perovskitlər monoklinik quruluşa malikdir, nadir torpaq atomları 12 koordinasiyalıdırlar və TiO<sub>6</sub> oktaedrləri ilə əhatə olunmuşdurlar [5]. Materialların fiziki xüsusiyyətləri əyilmə/fırlanma, deformasiya və mərkəzdən-kənar hadisələri əhatə edən oksigen oktaedrindeki təhriflərlə mürəkkəb şəkildə bağlıdır [10]. Kation radius nisbəti ( $r_A/r_B$ ) artdıqca A<sub>2</sub>B<sub>2</sub>O<sub>7</sub> birləşmələri müxtəlif strukturlar, o cümlədən qüsurlu flüorit, kubik piroxlor və monoklinik perovskitəbənzər laylı quruluş nümayiş etdirir [11]. Nümunə olaraq, radiasiya kristallarda onların elektron və mexaniki xassələrini dəyişə bilən qüsurların əmələ gəlməsi ilə nəticələnə bilər. Bəzi hallarda, bu, hətta amorfizasiyaya

və kristal quruluşun itirildiyi yeni termodinamik xüsusiyyətlərin əmələ gəlməsinə səbəb ola bilər. Bu isə öz növbəsində materialların xassələrində əlavə dəyişikliklərlə nəticələnə bilər. 12, 13 Perovskit materialları yüksək enerjili fotonları, yüksək müqaviməti, aşağı istehsal dəyərini və qüsurlara qarşı üstün dözümlüliyünü udmağa imkan verən yüksək orta atom nömrəsi Z daxil olmaqla, eksklüziv üstünlükləri sayəsində qamma şüalarının aşkarlanması üçün yeni perspektivli sintillyator kimi meydana çıxdı. 14 Həmçinin, La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> kimi perovskit materialları, nisbətən böyük pyeoelektrik sabiti [x] kimi unikal xüsusiyyətlərinə görə qurğusunsuz pyeoelektrik keramika, sensorlar, aktuatorlar və çeviricilər üçün perspektivli nümunələrdir. Burada qeyd etmək lazımdır ki, perovskit materialları və radiasiya aşkarlanması üçün qurğulardakı irəliləyişlər perspektivli performans göstərsə də, onlar haqqında biliklərimizi artırmaqla həll edilməli olan real dünya tətbiqləri üçün hələ də kritik problemlər var. Belə qənaətə gəlirik ki, bu materialların orijinal fiziki xüsusiyyətləri hələ tam başa düşülməmişdir və bir çox əhəmiyyətli eksperimental müşahidələr bu günə qədər qənaətbəxş şəkildə izah edilməmişdir. Onu da qeyd etmək lazımdır ki, qamma radiasiyasının bu cür laylı perovskitlərə təsiri əvvəllər tədqiq edilməmişdir. Buna görə də, bu iş ilk dəfə olaraq qamma radiasiyasının La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub>-yə təsirinin tədqiqinə yönəldilmişdir.

### X-şüalarının difraksiyası (XRD) analizi

X-şüalarının difraksiyası (XRD) analizi XENOCSS, Qrenobl, Fransanın məhsulu olan Rusiyanın Dubna şəhərində FLNP JINR-də yerləşən SAXS/WAXS Xeuss 3.0 sistemində istifadə etməklə aparılmışdır. X-şüalarının difraksiya nümunələrinin

toplanması üçün Dectris Eiger 2R 1 M detektoru istifadə edilmişdir. Rietveld metodu Fullprof proqramı vasitəsilə XRD məlumatlarının təhlili aparılmışdır.

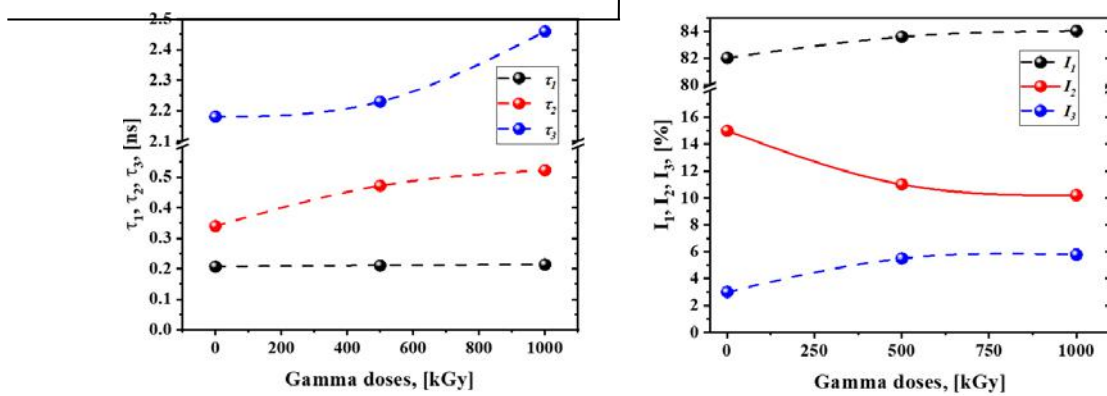
Raman He-Ne lazerindən yayılan 633 nm dalğa uzunluğu ilə Confotec® Duo spektrometrindən (SOL instruments GmbH, Augsburg, Almaniya), 1800 dərəcədən, 10 µm dəlik, diapazon 20 sm<sup>-1</sup> –1100 sm<sup>-1</sup> və x20 obyektivdən istifadə edilərək toplanmışdır. Raman spektrlərinin spektral ayırdetmə qabiliyyəti 2,5sm<sup>-1</sup>-3,2 sm<sup>-1</sup>-dir.

La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> laylı perovskit birləşməsi radiasiya mənbəyi kimi <sup>60</sup>Co izotopundan istifadə edən Gamma MRX-γ25M qurğusundan istifadə etməklə qamma-şüalanmaya məruz qalmışdır. Şüalanma prosesi ətraf mühitin temperaturunda aparılıb, nümunələr müvafiq olaraq 500 kGy və 1000 kGy iki fərqli doza qəbul edib. Nəzarət edilən doza sürəti (D) təcrübə boyu sabit 6,05 Gy/s dəyərində saxlanıldı.

Pozitronun yaşama müddətinin təyini üçün BaF<sub>2</sub> sintillyatorları ilə təchiz olunmuş sürətli pozitron yaşama müddətinin təyini spektrometrindən (Pozitron annihilation lifetime spectroscopy (PALS) istifadə edilmişdir.

Pozitron annihilation lifetime spectroscopy (PALS) [10] bərk cisimlərdə qamma şüalarının yaratdığı mikroskopik strukturların və radiasiyadan qaynaqlanan qüsurların öyrənilməsi üçün güclü və çox yönlü

vasitədir [11]. Tədqiqatımızda La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> birləşməsinin pozitron annihilasiyası yaşama müddəti tədqiqatları 0, 500 və 1000 kGy udma dozalarında qamma kvantları ilə şüalanmadan sonra aparılmışdır. Alınan yaşama müddəti komponentlərinin udma dozəsindən asılılığı şəkil 1-də göstərilmişdir. La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> birləşməsinin sxematik PALS nəticələri göstərir ki, bütün spektrlər üç komponentlə yaxşı uyğunlaşır. Birinci yaşama müddəti komponenti ( $\tau_1, I_1$ ) kiçik qüsurların və (və ya) dislokasiyaların göstəricisidir, ikinci komponent ( $\tau_2, I_2$ ) isə böyük boşluq qrupları (və ya boş qruplar) ilə əlaqələndirilir [12]. Yaşama müddəti komponenti ( $\tau_3, I_3$ ) orto-*P<sub>s</sub>* məhv edilməsi ilə əlaqədardır [13]. Göründüyü kimi, qamma kvantının təsiri altında bütün yaşama müddətinin qiymətlərində artım müşahidə olunur. Nəticə etibarilə, qısa yaşama müddəti  $\tau_1$  qiymətləri 0,207, 0,211, 0,211 ns, intensivliyi 82, 83,58, 84,02% təşkil edir. İkinci yaşama müddətinin qiymətləri  $\tau_2$  0,340, 0,472, 0,523 ns-dir və 2.18, 2.23, 2.46 ns qiymətləri ilə ən uzun yaşama müddəti  $\tau_3$  komponenti La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> birləşməsində orto-*P<sub>s</sub>* əmələ gəlməsi ilə əlaqələndirilir. Nəzərə alsaq ki,  $\tau_2$  və o-*P<sub>s</sub>* yaşama müddəti komponentləri ilk növbədə vakansiya klasterlərinin xassələrinə və nümunələrdəki sərbəst həcm ölçüsünə aid edilir, sonrakı müzakirələr ilk növbədə  $\tau_2, \tau_3$  və  $I_2, I_3$ -ün sönmə xassələrinə yönəldiləcək.



Şəkil 1. Müxtəlif udma dozalarında qamma kvantları ilə şüalanmış La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> birləşməsinin PALS nəticələri.

Eksperimental tədqiqatın nəticələri rəqəmsal hesablamalar əsasında mövcud defektlərin növlərinin müəyyən edilməsinə imkan yaradır. Ti-O əsaslı kompozitləri defekt növü ABINIT kodundan istifadə etməklə bir çox tədqiqatçılar tərəfindən analiz edilmişdir [14]. Tetraqonal BaTiO<sub>3</sub> ifrat qəfəs üçün  $V_{Ti}-V_O$  və  $V_{Ti}-2V_O$  vakansiyaları üçün 203 ps və 220 ps qiymətləri alınmışdır [Siemek et al. 15].

Campillo və başqaları müxtəlif elementlərdə həcm (yuxarı qiymət) və monovakansiya (aşağı qiymət) üçün pozitron ömrünün qiymətlərini hesablamış və  $V_{Ti}$  monovakantlığının 206 ps qiymətinə bərabər olduğunu almışdır [16], Keeble et al.  $V_{Ti}-V_O$  vakant yeri üçün PbTiO<sub>3</sub> birləşməsinin PALS hesablamalarını aparmış, nəticədə 211 ps qiymət almışdır [17]. Tədqiqatımızda 500 kGy dozalarında PALS nəticələrində  $\tau_1$  komponentinin çizi artımı, ehtimal ki, qamma şüalanma nəticəsində boş yerlərin və ya nöqtə defektlərinin yaranması ilə bağlı qısa müddətli defektlərin sıxlığının artırılmasına işarə edir. Bu, 1000 kGy udma dozasında

doyma vəziyyətinə gətirib çıxarır.  $\tau_1$  komponentinin qiymətləri şüalanmayan nümunədə  $V_{Ti}$  monovakansiyanın  $V_{Ti}-V_O$  və  $V_{Ti}-2V_O$  boşluqlarına qədər genişləndiyini göstərir.  $\tau_2$  qiymətlərində əhəmiyyətli artım müşahidə olunur ki, bu da daha mürəkkəb defektlərinin əmələ gəlməsi ilə mümkündür. Bu, udulmuş dozanın təsirləri ilə strukturda böyük vakansiya klasterlərinin əmələ gəlməsini göstərir və 0,340 ilə 0,523 ns arasında ~20-dən çox vakansiya olan böyük vakansiya klasterlərinin mövcudluğunu göstərir. Əks,  $\tau_2$ -yə uyğun gələn nisbi intensivliyin azaldılması bu komponentlə ifadə edilən defektlərin səthə doğru miqrasiyasını göstərir. Nəticə olaraq, kristallar arasında inersial boşluqlar genişlənir. Bu,  $\tau_3$  komponentinin 2,18-dən 2,46 ns-ə qədər dəyişməsi ilə o-*P<sub>s</sub>*-lərin əmələ gəlməsi ilə nəticələnir. Defektlərin mövcudluğunda pozitronun annihilasiyasının dinamikası *p-P<sub>s</sub>* və o-*P<sub>s</sub>* hərəkət intensivliklərinə öz təsirini göstərir. La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> peroksid birləşməsi üçün pozitronların [27] DFP tutma modelindən istifadə etməklə hesablanmış qamma udma dozası ilə

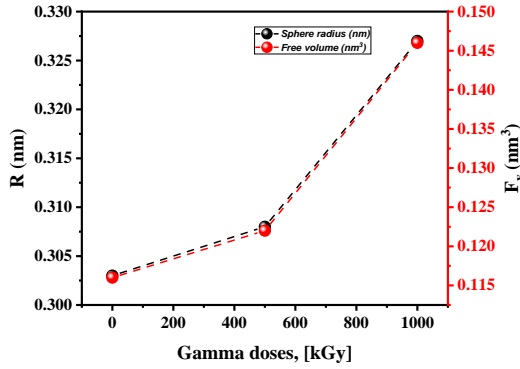
para-pozitronium və orto-pozitroniumun nisbi intensivliklərinin təkamülü cədvəl 1-də təqdim edilir. Nəticələr göstərir ki, udulmuş doza həm  $p$ - $Ps$ , həm də  $o$ - $Ps$ -in nisbi intensivliyinin artmasına səbəb olur. Bu onu göstərir ki, qamma şüalanması pozitronun annihilasiya prosesinə təsir edir və struktur dəyişiklikləri yaradır. Bu dəyişikliklərin kompleks təsiri pozitroniumun spin konfigurasiyalarında dəyişikliklərə səbəb olur ki, bu da öz növbəsində  $p$ - $P$  və  $o$ - $Ps$ -in nisbi intensiv artımına səbəb olur. Defektlərdə pozitronun tutulmaması ( $k_d$ ),  $\tau_{pick}$  udulma dozası ilə artır,  $\mu$  isə azalır. Nəticə etibarlı

ilə defektlərdə  $k_d$ -nin udulma dozası ilə artması onu göstərir ki, materialda defektlərin və ya pozitron tutma yerlərinin sayı da artır. Eyni zamanda defektlərin konsentrasiyası ( $k_d$ ) də artım nümayiş etdirir ( $k_d$  defektlərin konsentrasiyası ilə düz mütənəsb olur). Absorbsiya dozası  $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  peroksid birləşməsində pozitron tələləri kimi çıxış edən defektlərin əmələ gəlməsi və aktivləşməsi ilə nəticələnə bilər. Bu defektlərin konsentrasiyası artdıqca tutulan pozitronların sayı da artır və nəticədə pozitron tutma sürəti yüksəlir.

Cədvəl 1.

$\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  birləşməsi üçün Ps (DFP) pozitron yaşama müddəti spektroskopiyaya modelinin formalaşması

Gamma doses kGy	$K_d$ ( $\text{ns}^{-1}$ )	$\mu$	$\tau_{pick}$ (ns)	$I_{oPs}$ (%)	$I_{pPs}$ (%)	$R$ (nm) Spherical	$R$ (nm) cylindrical
0	0.74	9.4	1.54	4.99	1.66	0.303	0.231
500	1.14	8.6	1.8	8.3	2.77	0.308	0.235
1000	1.48	7.9	2	11	3.49	0.327	0.250



Şəkil 2. Hesablanmış sferik və silindrik məsamə radiuslarının gamma şüa dozalarından asılılığı.

Pozitronium atomu, nadir delokalizasiya halları istisna olmaqla, bərk cisimlərdə elektron sıxlığının aşağı olduğu bir oblast (a region) ilə məhdudlaşır. Bu, boşluq tipli bir defekt olan sərbəst həcm və ya alternativ olaraq amorf bərk maddədəki məsamə ola bilər. Tao-Eldrup [19, 20], radiusu  $R$  olan mükəmməl sferik boşluqda tutulmuş  $o$ - $Ps$  defektlərinin annihilasiyasını təsvir edən sadə model təklif etmişdir.

$\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  birləşməsinin məsamə ölçüləri Tao-Eldrup modelinə əsaslanaraq Psc\_12 kompüter kodundan [21] istifadə etməklə hesablanmışdır. Kod həm sferik, həm də silindrik məsamə radiuslarını hesablamaq üçün istifadə edilmişdir. Alınan nəticələr cədvəl 1 və şəkil 3-də təqdim edilmişdir. Məsamələrin sferik radius qiymətləri udma dozasından asılı olaraq müvafiq olaraq 0,303, 0,308 və 0,327 nanometrdir. Sərbəst həcm 0,116, 0,122 və 0,146  $\text{nm}^3$  qədər artdığı aşkar edilmiş-

dir. Beləliklə, ionlaşdırıcı şüalanmanın təsiri məsamələrin ölçülərinin dəyişməsi və materialın içərisindəki sərbəst həcm genişlənməsi nəticəsində baş verir.

### Simulyasiya

Qeyd etmək lazımdır ki, Monte Karlo (MC) metoduna əsaslanan hesablama kodlarında prosesi özündə cəmləşdirən ayrı-ayrı ehtimal hadisələri ardıcıl sürətdə simulyasiya edilir. Bu hadisələri tənzimləyən ehtimal paylamaları ümumi hadisələri təsvir etmək üçün statistik olaraq seçilir. Statistik seçmə prosesi təsadüfi ədədlərin seçilməsinə əsaslanır. MC metodu ilə hissəciklərin daşınması bir çox hissəciklərin hər birini yaşama boyu mənbədən sonuna qədər izləməkdən ibarətdir. Bu işdə standart kəşif məlumat bazalarına (kitabxanalarına) əsaslanan mürəkkəb və üçölçülü həndəsi neytron, qamma və elektron şüalanmalarını simulyasiya etmək üçün geniş imkanlara malik MCNPX kodu istifadə edilmişdir. MCNPX-nin müxtəlif nəticələri onu radiasiya şüalanması [x] daxil olmaqla, nüvə fizikasının müxtəlif sahələrində müxtəlif hesablamalarda tətbiq etməyi mümkün edir. Qeyd etmək lazımdır ki, qamma-şüaları üç növ qarşılıqlı təsir vasitəsilə yerdəyişmə yaradır, bunlar Kompton Səpilmə (CS), Fotoelektrik Effekt (PE) və Cüt İstehsal (PP). Qamma-maddə hissəcikləri qarşılıqlı təsirləri elektronlar (və PP üçün pozitronlar) istehsal edir, bu da materialdakı atomlarla toqquşma nəticəsində atom yerdəyişməsinə səbəb olur. Beləliklə, ümumi qamma-şüalanmanın nəticəsi olaraq DPA-nın kəşifləri üç qismən zədələnmiş kəşiflərin cəmidir:

$$\sigma_T(E_\gamma) = \sigma_{CS}(E_\gamma) + \sigma_{PE}(E_\gamma) + \sigma_{PP}(E_\gamma)$$

Nəzərə alsaq ki, fotoelektrik effekt üçün zədələnmə kəşiyi yüksək enerjili qamma şüaları üçün əhəmiyyətsiz dərəcədə kiçikdir, enerjisi 2 MeV-dən yüksək olan qamma şüaları ilə cüt istehsal üçün artıq zaman

orta hesabla 1,27 MeV enerjisi olan  $^{60}\text{Co}$  tərəfindən istehsal olunan qamma şüaları üçün artır. Kompton səpilməsi daha vacib olur. Sonra, bu işdə biz verilən CS üçün DPA kəşiyi üzərində dayandıq

$$\sigma_{CS}(E_\gamma) = \int_0^{E_{max}} \frac{d\sigma^{CS}(E_\gamma, E)}{dE} n(E) dE,$$

Burada,  $n(E)$  kinetik enerjisi  $E$  olan elektronun yaratdığı yerdəyişmiş atomların orta sayıdır. Bununla belə, vakansiyaların yaradılmasını müəyyən etmək üçün MCNPX kodu ilə simulyasiyalar aparılmışdır. Qamma şüalarının səbəb olduğu hər bir atom üçün yerdəyişməni (DPA) hesablamaq üçün SRIM kodundan istifadə edilmişdir. SRIM (Materiyada ionların dayanması və diapazonu) yüklü hissəciklər üçün Monte Karlo hərəkət kodlarından biridir və burada yüklənmiş ionların maddə ilə qarşılıqlı təsirini simulyasiya etməyə imkan verir. Bu kod Bethe-Bloch düsturu [x] əsasında dayandırma (tormozlama, əyləc) gücünün hesablanmasına imkan verir. SRIM PKA-nın növünü, enerjisini, ilkin mövqələrini və istiqamət kosinuslarını ehtiva edən giriş faylı tələb olunur. Bu giriş parametri MCNPX

təlimatı ilə material vasitəsilə qamma şüalarının daşınmasını modelləşdirməklə əldə edilmişdir. Bununla əlaqədar olaraq, PKA məlumatlarına daxil olmaq üçün GAMMATRACK adlı proqram da hazırlanmışdır. Bu proqram hər toqquşmadan əvvəl və sonra hadisə fotonlarını əldə etmək üçün yazılmışdır. Sonra, enerji və impulsun qorunmasına əsaslanaraq, Compton qarşılıqlı əlaqəsi üçün PKA-nın xüsusiyyətləri müəyyən edildi və SRIM kodu üçün giriş məlumat bazası yaradıldı. Monte Karlo nəticələrinə daha çox əmin olmaq üçün qamma radiasiya şüalanmasının nəzəri hesablanması da araşdırılmışdır. PKA-nın enerjiləri üçün GAMMATRACK proqramına əsaslanan simulyasiyaların nəticələri cədvəl 2-də verilmişdir:

Cədvəl 2.

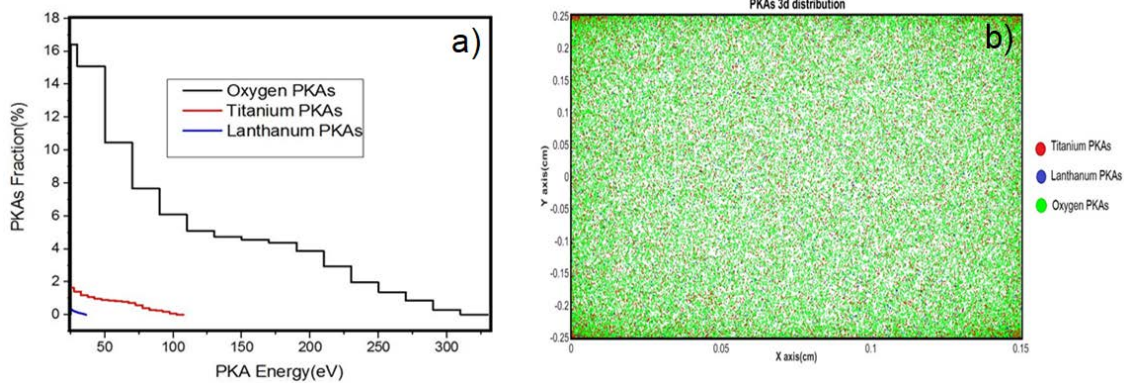
GAMMATRACK ilə PKA-nın minimum, maksimum və orta enerjisi haqqında əldə edilmiş məlumat

PKA Energy Type of PKA	PKA's fraction	Minimum energy (eV)	Maximum energy (eV)	Average energy (eV)
Titanium	12.28%	25.004	106.61	52.11
Lantanum	1.83%	25.003	36.31	28.72
Oxygen	85.87%	25.001	318.92	105.14

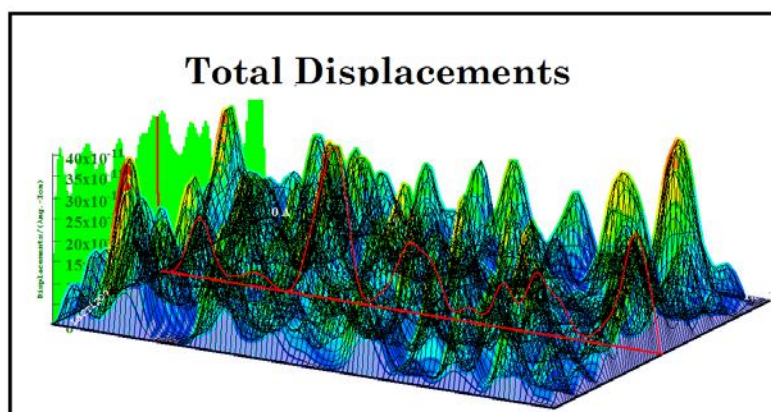
La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> nümunəsində Monte Karlo metodundan (MCNPX + SRIM kodu) əldə edilmiş vakansiyaların hesablanmış sayının 79970 vurulsun 0,0186 vakansiya/iona və ya müvafiq olaraq 1487 vakansiya bərabər olduğu görülür. Şəkil 3a, Compton səpilməsini nəzərə alaraq GAMMATRACK istifadə edərək əldə edilmiş lantan, titan və oksigenin PKA spektrlərini göstərir və göstərir ki, oksigen PKA-nın anion kimi nisbəti, aşağı həddi meyl enerjisinə görə titan və lantandan daha yüksəkdir. atomun qəfəsdəki ilkin mövqeyindən daimi olaraq hərəkət etməsi üçün tələb olunan minimum kinetik enerji.

Şəkil 3b, La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> hədəfində titan, lantan və oksigen PKA-ların hər bir növü üçün hədəf boyunca bərabər şəkildə səpələnmiş PKA-ların ikiölçülü (2D) paylanmasının homogenliyini göstərilir. Bununla belə, qeyd etmək lazımdır ki, hədəf boyunca atomları daha yaxşı göstərmək üçün  $x$  oxunun ekranı şişirdilmişdir.

Monte-Karlo ilə eyni zamanda gamma-şüalanma nəzəriyyəsi araşdırılmış, əldə edilmiş nəticələr cədvəl 3-də verilmişdir. Bundan əlavə, şəkil 5a və 5b-də həm Monte Karloya, həm də nəzəri hesablamalara aid şüalanmış La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> nümunəsində qamma zədələnmə hadisələri 2D təsvirlə göstərilmişdir.



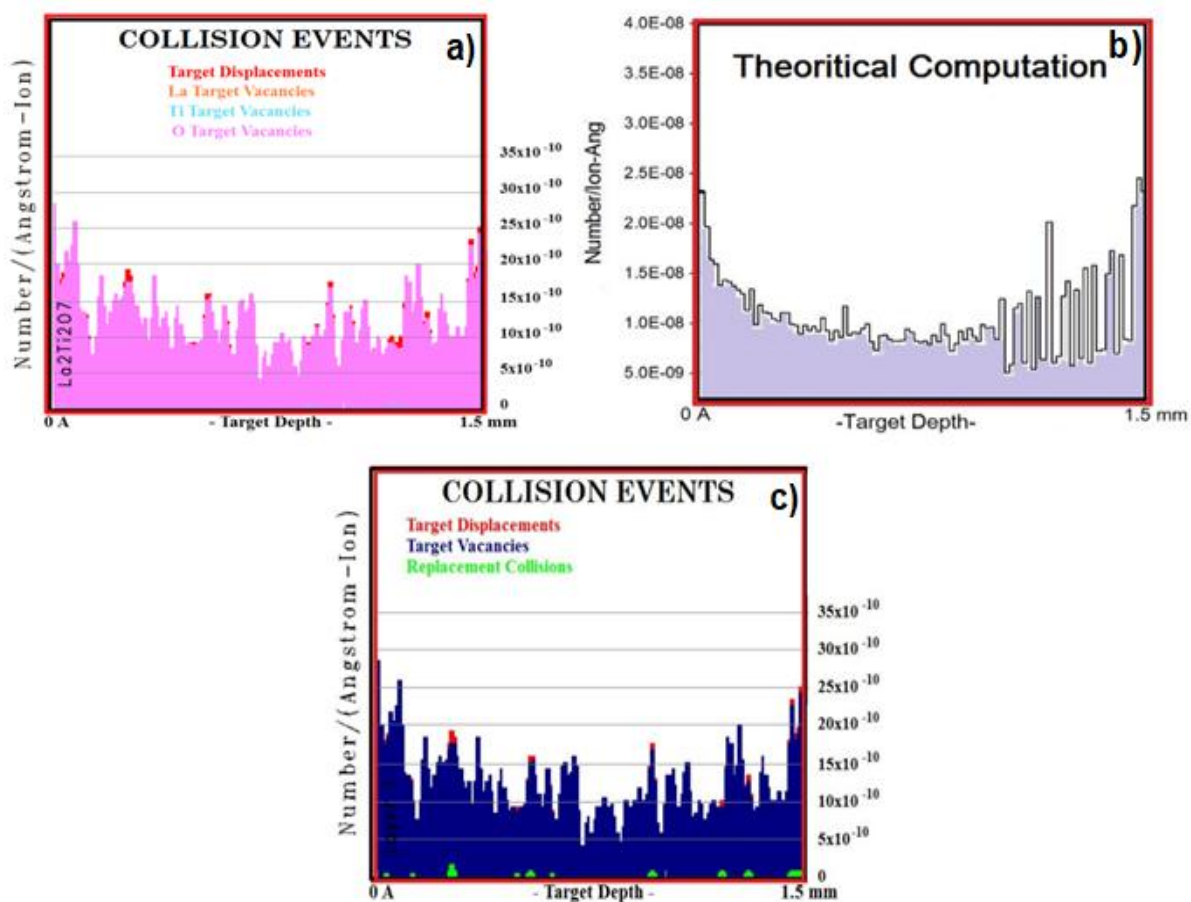
Şəkil 3. a) Hər bir PKA növü üçün La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> nümunəsindəki PKA-ların enerji spektri və b) GAMMATRACK kodu ilə <sup>60</sup>Co mənbəyi və 25eV həddi enerji ilə şüalanmış La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> nümunəsində PKA-nın 2D-paylanmaları.



Şəkil 4. La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> nümunəsində <sup>60</sup>Co mənbəyi üçün yerdəyişmələrin üçölçüli (3D) profile.

Cədvəl 2.  
DPA istehsal dərəcələrinin qiymətləndirilməsi üçün nəzəri hesablama və Monte Karlo nəticələri arasında müqayisə

Reference	Total DPA Rate (DPA/year)
Monte Carlo method (MCNPX+SRIM code)	$5.02 \times 10^{-8}$
Theoretical calculations	$5.002 \times 10^{-8}$



Şəkil 5. Zədələnmə hadisələrinin 2D nümayişi, a) GAMMATRACK (MCNPX+SRIM kodu), b) Nəzəri, c) Hədəf yerdəyişmələri boşluq və əvəzedicilərin toqquşmalarının cəminə bağlıdır.

SRIM toqquşma nəticələrindən əldə etmək olar ki, hədəf yerdəyişmələri boş yerlərə və əvəzedici toqquşmalara bərabərdir. Şəkil 5c-də əvəzetmə toqquşmaları göstərilmişdir. Onlar vakansiyaların sayını azaldırlar, lakin bu toqquşmalara görə hədəfdə ciddi dəyişiklik və ya zədə yoxdur. İkinci dərəcəli radiasiya şüalanması və kənar edilmiş atomlar tək boşluqlara görə yerdəyişmələr yaradır və əvəzedici toqquşmaların baş verən ümumi yerdəyişmələrdə heç bir rolu yoxdur, onda belə nəticəyə gələ bilər ki, hədəf yerdəyişmələr boş yerlərin sayına bərabərdir və nəticədə bütün hədəf zədə yerdəyişmələr boş yerlərə görünür.

### Nəticə

Müxtəlif qamma radiasiya dozaları (0, 500 və 1000 kGy) ilə şüalanan La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> üzərində aparılan pozitron annihilasiya yaşama müddəti spektroskopiyası (PALS) tədqiqatları ionlaşdırıcı şüalanmanın materialın mikrostrukturuna təsiri ilə bağlı əsas anlayışları təmin etmişdir. Bütün nümunələrdə  $\tau_1$  və  $\tau_2$  təyin edilmiş iki fərqli yaşama komponenti müəyyən edilmişdir ki, bu da müxtəlif növ defektlərin mövcudluğunu göstərir.

Tədqiqat göstərdi ki, qamma şüalanma dozası artıqca materialın səthinə doğru vakansiya qruplarının,

xüsusən  $\tau_2$  ilə əlaqəli olanların əmələ gəlməsinə və miqyasına səbəb olur.

Bundan əlavə, orto-pozitroniumun (orto-*Ps*) əmələ gəlməsi həm şüalanmış, həm də şüalanmamış nümunələrdə müşahidə edilmişdir ki, bu da qamma şüalanmanın boşluqları və ya məsamələrarası boşluqları tamamilə aradan qaldırmadığını, əksinə onların ölçülərini artırdığını göstərir.

Bunu həm sferik, həm də silindrik radiusların müşahidə olunan genişlənməsi sübut edir. Bu tapıntılar La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub>-də radiasiya nəticəsində yaranan defektlərin dinamikasının və struktur dəyişikliklərinin, xüsusən də qamma şüalanması altında boşluq klasterlərinin davranışı və məsamə məkanının modifikasiyaları ilə bağlı daha geniş başa düşülməsinə kömək edir.

Simulyasiya nəticələri göstərir ki, qamma şüalanması, ilk növbədə, Compton səpilməsi vasitəsilə, atom yerdəyişmələri yaradır, oksigen atomları isə aşağı həddi enerjiyə görə ən yüksək yerdəyişməni yaşayır.

GAMMATRACK proqramı oksigenin vakansiyalara ən çox töhfə verdiyini göstərir. PKA paylamalarının və yerdəyişmələrinin həm 2D, həm də 3D vizualizasiyası nümunə üzrə zədənin homogenliyini təsdiq edir.

- [1] X. Lin, H. Wang, H. Du, X. Xiong, B. Qu, Z. Guo, D. Chu. Growth of Lithium Lanthanum Titanate Nanosheets and Their Application in Lithium-Ion Batteries, ACS Appl Mater Interfaces 8, 2016, 486–1492. <https://doi.org/10.1021/ACSAMI.5B10877>.
- [2] M. Haydoura, R. Benzerga, C. Le Paven, L. Le Gendre, V. Laur, A. Chevalier, A. Sharaiha, F. Tessier, F. Cheviré. Perovskite (Sr<sub>2</sub>Ta<sub>2</sub>O<sub>7</sub>)<sub>100-x</sub>(La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub>)<sub>x</sub> ceramics: From dielectric characterization to dielectric resonator antenna applications, J Alloys Compd 872, 2021. <https://doi.org/10.1016/J.JALLCOM.2021.159728>.
- [3] E.İ. Şahin, S.B. Cantürk, M. Emek, S. Genç, M. Kartal. Ceramic Processing Research Production and microwave electromagnetic shielding effectiveness of polyaniline-La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub>:Er, Yb composites, Journal of Ceramic Processing Research 22, 2021, 208–213. <https://doi.org/10.36410/jcpr.2021.22.2.208>.
- [4] K.R. Kambale, A.R. Kulkarni, N. Venkataramani, A. Vairagade, S. Butee. Synthesis of high Curie temperature La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> piezoceramic by mechanochemical activation: a preliminary investigation, Ceramic Transactions 266, 2019, 59–66. <https://doi.org/10.1002/9781119631460.CH7>.
- [5] A.G. Asadov, D.P. Kozlenko, A. Mammadov, R. Mehdiyeva, S.E. Kichanov, E.V. Lukin, O.N. Lis, A.V. Rutkauskas, A structural phase transition in La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> at high pressure, Physica B Condens Matter 655, 2023, 414753. <https://doi.org/10.1016/J.PHYSB.2023.414753>.
- [6] F.T. Huang, B. Gao, J.W. Kim, X. Luo, Y. Wang, M.W. Chu, C.K. Chang, H.S. Sheu, S.W. Cheong. Topological defects at octahedral tilting plethora in bi-layered perovskites, Npj Quantum Materials 2016 1:1 1, 2016, 1–6. <https://doi.org/10.1038/npjquantmats.2016.17>.
- [7] S.R. Spurgeon, T.C. Kaspar, V. Shutthanandan, J. Gigax, L. Shao, M. Sassi, S.R. Spurgeon, T.C. Kaspar, M. Sassi, V. Shutthanandan, J. Gigax, L. Shao. Asymmetric Lattice Disorder Induced at Oxide Interfaces, Adv Mater Interfaces 7, 2020. 1901944. <https://doi.org/10.1002/ADMI.201901944>.
- [8] J. Dryzek, K. Siemek. Positron Annihilation Studies of Subsurface Zone Created during Friction in Pure Silver, Tribology Transactions 62, 2019, 658–666. <https://doi.org/10.1080/10402004.2019.1600769>.
- [9] J. Kansy. Microcomputer program for analysis of positron annihilation lifetime spectra, Nucl Instrum Methods Phys Res A 374, 1996, 235–244. [https://doi.org/10.1016/0168-9002\(96\)00075-7](https://doi.org/10.1016/0168-9002(96)00075-7).
- [10] M.J. Puska, R.M. Nieminen. Theory of positrons in solids and on solid surfaces, Rev Mod Phys 66, 1994, 841. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.66.841>.
- [11] M.N. Mirzayev, B.A. Abdurakhimov, E. Demir, A.A. Donkov, E. Popov, M.Y. Tashmetov, I.G. Genov, T.T. Thabethe, K. Siemek, K. Krezhov, F. Mamedov, D.M. Mirzayeva,

- M.V. Bulavin, V.A. Turchenko, T.X. Thang, T.Z. Abdurakhmonov, P. Horodek.* Investigation of the formation of defects under fast neutrons and gamma irradiation in 3C–SiC nano powder, *Physica B Condens Matter* 611, 2021, 412842. <https://doi.org/10.1016/J.PHYSB.2021.412842>.
- [12] *Y.Q. Chen, Y.C. Wu, Z. Wang, S.J. Wang.* Positron annihilation study on interaction between hydrogen and defects in AISI 304 stainless steel, *Radiation Physics and Chemistry* 76, 2007, 308–312. <https://doi.org/10.1016/J.RADPHYSICHEM.2006.03.057>.
- [13] *S. Chakrabarti, S. Chaudhuri, P.M.G. Nambissan.* Positron annihilation lifetime changes across the structural phase transition in nanocrystalline Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, *Phys Rev B Condens Matter Mater Phys* 71, 2005, 064105. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.71.064105>/FIGURES/9/MEDIUM.
- [14] *J.C. Dupin, D. Gonbeau, P. Vinatier, A. Levasseur,* Systematic XPS studies of metal oxides, hydroxides and peroxides, *Physical Chemistry Chemical Physics* 2 (2000) 1319–1324. <https://doi.org/10.1039/A908800H>.
- [15] *K. Siemek, A. Olejniczak, L.N. Korotkov, P. Konieczny, A. V. Belushkin.* Investigation of surface defects in BaTiO<sub>3</sub> nanopowders studied by XPS and positron annihilation lifetime spectroscopy, *Appl Surf Sci* 578, 2022, 151807. <https://doi.org/10.1016/J.APSUSC.2021.151807>.
- [16] *J.M. Campillo Robles, E. Ogando, F. Plazaola.* Positron lifetime calculation for the elements of the periodic table, *Journal of Physics: Condensed Matter* 19, 2007, 176222. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/17/176222>.
- [17] *D.J. Keeble, S. Singh, R.A. Mackie, M. Morozov, S. McGuire, D. Damjanovic.* Cation vacancies in ferroelectric PbTiO<sub>3</sub> and Pb(Zr,Ti)O<sub>3</sub>: A positron annihilation lifetime spectroscopy study, *Phys Rev B Condens Matter Mater Phys* 76, 2007, 144109. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.76.144109>/FIGURES/4/MEDIUM.
- [18] *J. Kansy, T. Suzuki.* Delayed formation and localisation of positronium in polymers at low temperatures, *Radiation Physics and Chemistry* 76, 2007, 759–765. <https://doi.org/10.1016/J.RADPHYSICHEM.2006.10.005>.
- [19] *S.J. Tao.* Positronium Annihilation in Molecular Substances, *J Chem Phys* 56, 1972, 5499–5510. <https://doi.org/10.1063/1.1677067>.
- [20] *M. Eldrup, D. Lightbody, J.N. Sherwood.* The temperature dependence of positron lifetimes in solid pivalic acid, *Chem Phys* 63, 1981, 51–58. [https://doi.org/10.1016/0301-0104\(81\)80307-2](https://doi.org/10.1016/0301-0104(81)80307-2).
- [21] *R. Zaleski.* Principles of positron porosimetry, *Nukleonika* 60, 2015, 795–800. <https://doi.org/10.1515/NUKA-2015-0143>.

**A.G. Asadov, R.Z. Mehdieva, E.R. Huseynova, A.I. Mammadov, M.N. Nasrabadi, A.A. Sidorin, M. Hoseini, E.D. Mustafayev, A.S. Abiyev, S.F. Samadov**

**STUDY OF THE EFFECT OF GAMMA QUANTA ON THE STRUCTURE AND DEFECT FORMATION MECHANISM OF La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> CERAMIC COMPOUND**

In this work, the effect of gamma quanta on the structure and defect formation mechanism of La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> ceramic compound have been investigated. X-ray diffraction (XRD), Raman spectroscopy, Gamma radiation, Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy and simulations were carried out for the structural analysis. In our research, positron annihilation lifetime studies of the La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> compound were performed following irradiation with gamma quanta at absorption doses of 0, 500 and 1000 kGy and it was observed that each sample exhibited two distinct lifetime components, designated as τ<sub>1</sub> and τ<sub>2</sub>. After the influence of the gamma quantum, an increase in the value of all lifetime components is observed. Gamma radiation induces defects and structural changes that affect the positron annihilation process. The theoretical calculation of gamma radiation damage has also been investigated with GAMMATRACK program.

*Qəbul olunma tarixi: 26.09.2025*