UDC: 541.15:541.183:539.104

NANO-SİLİSİUMDA EPİTERMAL NEYTRONLARIN TƏSİRİ ALTINDA BAŞ VERƏN PROSESLƏRİN FURYE İQ-SPEKTROSKOPİYA ÜSULU İLƏ TƏDQİQİ

A.A.Qəribli¹, S.Z.Məlikova², M.Ə.Ramazanov³, A.A.Qəribov¹

¹Milli Nüvə Tədqiqatları Mərkəzi, ²AMEA Radiasiya Problemləri İnstitutu, ³Bakı Dövlət Universiteti <u>qaribliaydan@gmail.com</u>

Xülasə: Furye İQ-spektroskopik udma üsulu ilə nano-silisiuma epitermal neytronların təsiri tədqiq olunub. Nano-silisiumda 4000-400sm⁻¹ tezliklər oblastında xarakterik İQ-udma zolaqları identifikasiya olunub. Epitermal neytronların təsiri altında Furye-İQ-spektrlərdə müşahidə olunmuş bu tərkib hissələrin şüalanma vaxtından asılı olaraq konsentrasiyalarının nisbi vahidlərdə dəyişmə kinetikaları tədqiq olunub.

Açar sözlər: Furye-İQ spektr, epitermal neytronlar, nano silisium

Furye İQ-spektroskopik udma üsulu ilə nano-silisiuma epitermal neytronların təsiri tədqiq olunub. Nano-silisiumda 4000-400sm⁻¹ tezliklər oblastında xarakterik İQ-udma zolaqları identifikasiya olunub. Müəyyən edilib ki, epitermal neytronlarla şüalanmış nano-silisium İQ-spektri aşağıdakı tərkib hissələrindən ibarətdir:

- Sintez və saxlama dövründə oksidləşmə proseslərinin nəticəsində yaranan oksid fazası (Si-O-Si, =SiO)
- Hidrid fazası (SiH_x)
- Səthə birləşmiş üzvi qarışıqlar
- Hidrat və hidroksil örtüyü

Epitermal neytronların təsiri altında İQ-spektrlərdə müşahidə olunmuş bu tərkib hissələrin şüalanma vaxtından asılı olaraq konsentrasiyalarının nisbi vahidlərdə dəyişmə kinetikaları tədqiq olunub.

Epitermal neytronlarla nano-silisium və onun tərkib hissələrini təşkil edən nüvələr arasında qarşılıqlı təsir prosesləri və nəticədə alınan radioaktiv izotop və elastik səpilmə nəticəsində sistemə verilən enerjilərin təsiri altında baş verən proseslərin mexanizmləri verilib. Müəyyən olunub ki, göstərilən hidrat örtüyü sürətli radiolitik parçalanmaya uğrayır və son nəticədə radiasiyaya davamlı izolə olunmuş hidroksil qrupu formalaşır.

Radiasion proseslər nəticəsində davamlı oksigenli struktur fraqmentlərin qatılığının artması da müşahidə edilib. Müşahidə olunmuş prosesləri kifayət qədər izah edən mexanizmlər verilib.

Giriş

Nano-material və onun əsasında alınmış kompozit materialların struktur və optik xassələrinin tədqiqində geniş tətbiq olunan tədqiqat metodlarından biri də İQ-spektroskopiya üsuludur. Nano-materiallar içərisində fundamental elmi, praktiki, model kimi istifadəsi nöqteyi nəzərdən daha çox əhəmiyyətli və aktual tədqiqat obyekti kimi nano-silisium böyük əhəmiyyət kəsb edir. Bu nöqteyi-nəzərdən nano-silisium özünün elektron və optik xassələrinə görə daha çox diqqət kəsb edir [1-4]. Nano-silisium özünün optik, elektrofiziki, fotolüminessent və digər xassələri ilə bərabər, yüksək radiasiyaya davamlılığına görə tətbiq sahələri günbəgün genişlənir.

Məsələn hələ 1990-cı ildə Li Kenxem 2 tərəfindən aşkar olunmuş və sonralar sübuta yetirilmiş nano-silisiumun hissəciklərində kvant ölçü məhdudiyyəti ilə əlaqəli olan qırmızıqəhvəyi fotolüminessensiya müşahidə olunması nano-silisiuma olan marağı daha da artırmışdı. Belə ki, sonrakı tədqiqatlar göstərdi ki, ölçüsü 10 nm-dən kiçik olan nano-silisiumda böyük ölçülərdə müşahidə olunmayan görünən oblastda parlaq lüminessensiya müşahidə edilməsi onun bərk maddə lazerləri əsasında yeni işıq mənbələri, optoelektronika cihazları və sair sahələrdə tətbiqini daha da artırır.

Digər tərəfdən də nano-silisiumun səthi səviyyələri yüksək kimyəvi aktivliyi ilə də xarakterizə olunur [5-6]. Nano-silisiumun bu xassəsindən istifadə edərək xüsusi sintez üsulları [7-8] və kompozit materialların alınması texnologiyaları işlənilibdir. Nano-silisium səthi doymamış rabitələr üzrə həm kompozit, həm də səthi müdafiə təbəqə komponentləri ilə qarşılıqlı təsirdə olur.

Odur ki, təqdim olunmuş işdə nano-silisium epitermal neytronların təsirini Furye-İQ spektroskopiya üsulu ilə tədqiq olunub. İşin əsas məqsədi sistemi təşkil edən komponentlərin tərkibi, strukturu, əlaqə xüsusiyyətləri və digər fiziki xassələrində epitermal neytronların təsiri altında baş verən prosesləri xarakterizə etməkdir.

Təcrübi hissə

Tədqiq olunmuş nano Si kubik quruluşa, >80m²/q xüsusi səth sahəsinə, 100 nm hissəcik ölçülərinə, 0,08 q/sm³ sıxlığa və 99% təmizliyə malikdir. Təqdim olunan işdə nümunələr Sloveniyanın Lyublyana şəhərində Jozef Stefan İnstitutunun "Reaktor Mərkəzində" TRİGA Mark II yüngül su (light water pool type reactor) tipli tədqiqat reaktorunda mərkəzi (kanal A1) kanalda $2x10^{13}$ n/sm²san sel sıxlığına malik neytron seli ilə tam güc rejimində (250kVt) 20 saata qədər kəsilməz rejimdə şüalandırılmışdır. Qeyd edək ki, bu kanalda tam güc rejimində mövcud neytron selinin parametrləri termal neytronlar üçün 5.107x10¹² n/sm²san (1±0.0008, E_n<625 eV), epitermal neytronlar üçün 6.502x10¹² n/sm²san (1±0.0008, E_n~625 eV ÷ 0.1 MeV), sürətli neytronlar üçün 7.585x10¹² n/sm²san (1±0.0007, E_n>0.1 MeV) və nəhayət bütün neytronlar üçün mərkəzi kanalda sel sıxlığı 1.920x10¹³ n/sm²san (1±0.0005) kimidir [24-26]. Beləliklə mərkəzi kanalda neytronların orta enerjisi təqribən epitermal neytronların enerjisinə (E_n~625 eV ÷ 0.1 MeV) uyğun gəlir.

İlkin halda və 20 saata qədər neytron şüalanmanın təsirinə məruz qalmış nümunələrin SEM analizləri "ZEİSS SİGMA VP FE-SEM" qurğusunda aparılıb.

Alınmış nəticələr və onların müzakirəsi

I.Nano-silisumun Furye IQ-spektroskopik tədqiqi

Nano-silisiumun Furye-İQ spektri şəkil 1-də verilib və ədəbiyyat nəticələrinə uyğundur [4,11,12]. Göründüyü kimi spektri əsasən iki hissəyə ayırmaq olar. Birinci oblast nanosilisiumun qəfəs rəqsləri oblast 400-2000 sm⁻¹-ə uyğundur. Burada daha intensiv udulma oblastı 1161 və 1105 sm⁻¹ oblastında müşahidə olunur. Bu spektr əsasən nano-silisiumda oksigen atomları ilə əlaqədardır. Müşahidə olunmuş 1161 və 1105 sm⁻¹ dublet siqnalı körpü Si–O–Si əlaqələrinin asimmetrik (ν_{as}) valent rəqslərinə müvafiqdir. [1-4]. Furye İQ spektrdə yeni hazırlanmış nano-silisiuma xas SiH_x – in deformasiya rəqslərinə uyğun $\nu = 600 \div 700$ sm⁻¹, monokristallik silisiuma uyğun çoxfononlu udulma oblastı $\nu=610$ sm⁻¹, qarışıq karbonun rəqslərinə uyğun $\nu=605$ sm⁻¹ və bor qarışığına uyğun $\nu=621$ sm⁻¹ müşahidə olunmayıb. Şəkil 1də verilmiş spektrdə aşağı tezliklər oblastında udulma v=479 sm⁻¹ δ Si əlaqələrində deformasiya rəqslərə uyğundur.

Bundan başqa nano-silisiumun Furye İQ spektrində zəif udulma zolağı 800 sm⁻¹ və intensiv geniş 1075 sm⁻¹ maksimumla xarakterizə olunan Si—O—Si əlaqələrində simmetrik və qeyri simmetrik valent rəqslərinə uyğun udulma zolaqları da müşahidə oluna bilir.

Göründüyü kimi, tədqiq olunmuş nano-silisiumda geniş oblastda qeyri-stexiometrik SiO_x (x=1÷2) oksid təbəqəsi mövcuddur. Müəyyən edilib ki, SiO_x – də x-kiçildikcə (11) v_{as} (SiOSi) udulma zolağının maksimumu kiçik dalğa ədədləri oblastına sürüşür. Məsələn x=2 olduqda v≈1080 sm⁻¹ olduğu halda x=1 olduqda isə v=980 sm⁻¹. Lakin bu zaman simmetrik rəqslərin tezliyi isə əksinə v_s (SiOSi) 800-dən 875 sm⁻¹- artır. Nano-silisiumda müşahidə olunan Furye İQ-spektrlərdə udulma oblastlarının maksimumunun SiO_x – də qeyri stexiometriyalılıq ilə əlaqədar yerdəyişməsi SiOx tetraedrlərində qeyri nizamlılıqla əlaqədardır.

Qeyd etmək lazımdır ki, nano-silisiumu uzunmüddət hava ilə təmasda saxladıqda səthi (1-2) nm qalınlığında oksid təbəqəsi ilə örtülür, bu isə İQ udulma oblastının v=1085 sm⁻¹ oblastına uyğundur. Beləliklə, Furye İQ spektroskopik tədqiqatlar göstərir ki, nano-silisiumda oksigen əsasən qəfəs düyünləri arasında yerləşir və əksər hallarda elektroneytral vəziyyətdə olur. Onun qəfəsdə qatılığı ədəbiyyat məlumatlarına görə $C_0 \approx 10^{15} \div 10^{18}$ sm⁻³ intervalında dəyişir. Qəfəsdə düyünlər arasında oksigen əsasən körpü vəziyyətində olur.

Göstərilən sxemlər üzrə nano-silisiumda müxtəlif növ oksigenli birləşmələr yaranır.

Nano-silisiumun Furye İQ spektrində hidrid fazasına müvafiq udulma oblastlarında da udulma zolaqları müşahidə olunur. Silisiumun struktur defektlərinin sp³ orbitalları ilə qarşılıqlı təsirindən və yaxud da qəfəs düyünləri aralarında yerləşmək nəticəsində optik müşahidə oluna bilən halda olur. Məlum olduğu kimi, tədqiq olunmuş nano-silisium nümunələrinin tərkibində 1%-ə qədər qarışıq saxlayır. Bu qarışıqlar nano-silisium quruluşunda Si atomlarını əvəz edərək müxtəlif növ akseptor və donor səviyyələr yaradır. Məhz hidrogen atomları bu növ mərkəzlər tərəfindən də tutula bilər. Ədəbiyyatda Si-H əlaqələrinin rəqsinə uyğun udulma zolaqlarına valent oblastında: 2210, 2191, 2178, 2123, 2048, 1994, 1950, 1946 sm⁻¹ və deformasiya oblastda isə 812 və 791 sm⁻¹ zolaqları aid olunub [11,12]. Kristallik və poralı silisiumda hidrid fazaya adətən SiH_x və Si-CH_x (x=1,2,3) qrupları da aid edilir və spektrdə valent və deformsion oblastlarda müşahidə olunur. Bizim tədqiq etdiyimiz nano-silisiumun Furye İQ spektrlərində valent rəqsləri oblastında 2257 sm⁻¹ udulma zolağı uyğun gəlir. Nano-silisiumda səthi defekt hallarında sərbəst əlaqələri ilə karbohidrogenlərlə də əlaqə yarada bilir və İQ spektrlərində 2850-2950 sm⁻¹ oblastında metil və metilen qruplarının simmetrik və qeyri simmetrik valent rəqslərinə uyğun 2856, 2927 və 295 8sm⁻¹ maksimumları müşahidə edilir.

Deformasion rəqslər oblastında δ_{as} (CH₃) və δ_s (CH₃) rəqslərinə uyğun olan 1460 və 1377 sm⁻¹ udulma zolaqları müşahidə olunub. Bundan başqa spektrdə metilen qrupunun qayçı rəqslərinə uyğun 1410 sm⁻¹, metilen qrupunun qayçı və sarkaç rəqslərinə uyğun 1230 və 1182 sm⁻¹ udulma zolaqları da müşahidə oluna bilir.

Nano-silisiumun Furye İQ spektrinin 3300-3903sm⁻¹ udulma oblastında səthi hidroksil qrupu və adsorbsiya olunmuş su ilə əlaqədar udma zolaqları müşahidə olunur.

Nano-silisiumun hidroksil qrupları haqqında məlumat hidrid və karbohidrogen fazalarına nisbətən çox azdır. Məsələn izolə olunmuş SiOH qrupunda v (OH) rəqslərinə uyğun dar (\sim 10

Journal of Radiation Researches, vol.5, No.2, 2018, Baku

sm⁻¹) 3736sm⁻¹ udma zolağı bir-birinə yaxın yerləşən və hidrogen əlaqəli SiOH qruplarının valent rəqsləri kiçik dalğa uzunluqlarında müşahidə olunur.

 δ (SiOH) deformasion rəqslərinə uyğun udma zolağı 800-900 sm⁻¹ oblastında müşahidə olunur. Oksidləşmiş səthdə tək v_{as}(SiOH)- uyğun

$$\nu_{as}(OH)$$
-3750 sm⁻¹
 $\nu_{s}(OH)$ -3650 sm⁻¹
 $\delta(HOH)$ -1600 sm⁻¹

müşahidə edilir. Bizi tədqiq etdiyimiz nano-silisiumun ilkin nümunəsinin Furye İQ spektrində hidroksil örtüyü xarakterizə edən 3340, 3842, 3903 sm⁻¹ udulma zolaqları müşahidə olunur.

II Epitermal neytronların nano-silisiuma təsirinin Furye İQ-spektroskopik tədqiqi.

Əvvəlki hissədə nano-silisiumun Furye İQ-spektrlərini şərh etdikdə biz göstərdik ki, ümumi spektri əsasən 3 hissəyə ayırmaq olar.

I nano-silisiumda sintez və saxlama dövrlərində oksidləşmə prosesləri nəticəsində yaranan (Si O Si), (SiO) karkaslarına aid udma zolaqları əsasən 479÷1400 sm⁻¹ udma zolağını əhatə edir.

II Hidrogenlə qarşılıqlı təsirdən yaranan (SiHx) fazasının müvafiq udma zolaqları ($\nu\text{-}2000\text{-}2400\text{sm}^{-1}\text{)}$

III nano-silisiumda mövcud olan hidrat və hidroksil örtüyü.

Bu oblast çox mürəkkəb olub molekulyar, dissosiotik adsorbsiya olunmuş su molekulları və müxtəlif növ hidroksil qruplarını əhatə edir. Bu oblast təqribən $v=3100\div3900$ sm⁻¹ dalğa ədədlərinə uyğundur.

Epitermal neytronlarla 1÷20 saat müddətində şüalanmış nano-silisiumun Furye İQ-spektrləri şəkil 1-də verilib.



Journal of Radiation Researches, vol.5, No.2, 2018, Baku



Şək. 1 İlkin və müxtəlif vaxtlarda epitermal neytronlarla şüalanmış nano-silisiumun Furye İQ spektrləri

Şüalanmamış və müxtəlif vaxtlarda epitermal neytronlarla şüalanmış nano-silisiumun Furye İQ spektrlərə 1. şüalanmamış nano-silisiumun İQ spektri, 2. 1 saat müddətində, 3. 5 saat müddətində, 4. 10 saat müddətində şüalanmış nano-silisiumun İQ spektrləri. 5-20 saat müddətində şüalanmış nano-silisiumun İQ spektri.

Epitermal şüalanmaya məruz qalmış ilkin nano-silisium nümunəsinin tərkibi Si-28 (92,2%), Si-29 (4,7%), Si-30 (3,1%) izotop tərkibli silisium, 1 %-ə qədər idarə olunmayan qarışıqlar, oksigen və hidrogen elementlərindən ibarətdir.

Epitermal neytronlarla şüalandırdıqda silisium ilə neytronlar qarşılıqlı təsirdə olur. [13,14]

Elastik səpilmə mexanizmi ilə qarşılıqlı təsir zamanı nano-silisium mühitinə verilən maksimal enerji [13] ifadəsi ilə təyin edilib.

$$E_{\text{max}} = 4A^* E_n \cdot \cos^2 \varphi / (1 + A^2) \tag{1}$$

Nano-silisium kütləsinin əsas hissəsini təşkil edən silisium nüvələri ilə hər elastik toqquşma zamanı verilən təpmə enerjisi (1) ifadəsi ilə epitermal neytronların $E_n \approx 625 \text{eV} \div 0,1 \text{MeV}$ intervalında təyin edilib və 0,05eV və 7,9eV-ə uyğun olaraq bərabərdir.

Bundan başqa silisium 28-29-30 iziotopları tərəfindən epitermal neytronlar radiosion tutma prosesinə uğrayaraq β radioaktiv ${}_{14}{}^{31}$ Si izotopunu yaradır. İlkin nano-silisiumda bu izotopların faizlə miqdarı əsasında vahid həcmdə nüvələrin sayı, mikroskopik en kəsiklərinin sorğu kitablarından qiymətləri [14] əsasında makroskopik en kəsikləri təyin edilib.

$$\Sigma_a = \boldsymbol{\sigma}_a \cdot \mathbf{n}; \qquad \Sigma_s = \boldsymbol{\sigma}_s \cdot \mathbf{n}$$
 (2)

Havada σ_a -radiasia tutmanın, σ_s -səpilmənin mikroskopik en kəsikləri, n-müvafiq izotopların vahid həcmdə miqdarlarıdır.

Toqquşmaların sayı isə

$$N = \phi \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \tag{3}$$

havada ϕ =neytron seli (neytron/sm³san) ifadəsi ilə təyin edilir.

Uyğun qaydada epitermal neytronlarla nano-silisium tərkib izotoplarının səpilmə sayları və yuxarıda təyin olunmuş hər səpilmə aktı zamanı mühitə verilən enerji ($E_{min}=0,05eV$; $E_{max}=7,9eV$) qiymətləri əsasında hər saniyədə 1sm³ həcmə verilən səpilmə enerjisi təyinedilə bilər.

$$\Sigma E_{max} = N_{sopil.}(E_{min} + E_{max}) = 1,44 \cdot 10^{11} \text{ eV/sm}^3 \text{san}$$

Nümunələrin $\tau=20$ saat şüalanma müddətində isə mühitə verilən təpmə enerjisi

$$\Sigma E_{\text{max}} \times \Delta t = 3,2 \cdot 10^{16} \text{ eV/sm}^3;$$

Digər tərəfdən də epitermal neytronların təsiri altında radiosion tutma prosesi nəticəsidə

$$Si-30 + n \rightarrow Si-31 \tag{4}$$

alınan 14³¹Si izotopu betta radioaktiv olub

$$^{14}{}^{31}\text{Si}$$
 $^{11/2=2,62 \text{ saat}}$ $^{31}{}^{15}\text{P} + \beta^{-} + \nu^{-}$ (5)

Enerjisi 1,266MeV olan β hissəcik və antineytrin buraxır.

Epitermal neytronlarla Si-30 nüvəsinin vahid zamanda toqquşma proseslərinin sayı (3) ifadəsi ilə sorğu materialları ($\sigma_a \approx 0,41$ barn, $\Sigma_a=2,09\cdot 10^{-5}$ 1/sm) əsasında təyin edilib və N_{si-30}=4,01·10¹⁸ neytron·atom/sm³·san-a bərabərdir.

Mühitin hər 1sm³ həcmində τ =20saat ərzində yaranan Si-31 izotopunun sayı

 $\Delta N = w \cdot \Delta t = 4,01 \cdot 10^{18} \text{ atom/sm}^3 \text{san} = 7,2 \cdot 10^4 \text{ san} = 2,84 \cdot 10^{13} \text{ atom/sm}^3 \text{ olacaqdır.}$

Hər betta-parçalanma zamanı ayrılan $E\beta$ enerjisi əsasında 20 saat ərzində mühittə yaranan betta hissəciklərin ümumi enerjisi

$$\Sigma E \beta = E \beta \cdot N \beta = 3,62 \cdot 10^{19} \text{ eV} \quad (IV)$$

Furye İQ-spektroskopik tədqiqatlar göstərir ki, tədqiq olunmuş nano-silisium nümunələrində learkos oksid, hidrid və hidrat örtüyü olduğu aşkar olundu. Hidrat örtüyündə molekulyar su, müxtəlif tip hidroksil qrupları mövcuddur.

Epitermal neytronların təsiri altında nano-silisiumda baş verən elastik səpilmə və radiosion tutma nəticəsində nano-silisium verilən şüa və təpmə enerjilərinin təsiri altında tərkibi

təşkil edən komponentlərdə müxtəlif fiziki və kimyəvi proseslər baş verir. Yuxarıda göstərilən proseslərlə yanaşı epitermal neytronların tərkib komponentlərə təsiri mexanizmi də müxtəlifdir.

Epitermal neytronların ilkin E enerjisinin mühitdə elastik səpilmə zamanı itirməsi, yəni toqquşduğu mühitə vermə qabiliyyəti enerjidən yox toqquşduğu nüvənin kütləsindən asılıdır. Neytronun nüvə toqquşması zamanı nisbi maksimal enerji itkisi (α)

$$\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1}\right)^2 (\mathbf{V})$$

ifadəsi ilə təyin edilir.

Göründüyü kimi, nano-silisiumda mövcud olan nüvələr üçün α -müxtəlif qiymətlər alır. Hidrogen nüvəsi üçün düşən neytronun enerji itkisi maksimaldır α =0

$$\frac{E-E'}{E} = 1 - \alpha; \qquad E' = \alpha E \quad (VI)$$

yəni düşən neytron hidrogen nüvəsi ilə elastik toqquşma nəticəsində enerjisinin hamısını hidrogen nüvəsinə verir.

Epitermal neytronların mühit ilə elastik qarşılıqlı təsir prosesində digər parametr nüvələr ilə qarşılıqlı təsirdə orta loqarifmik enerji itkisi parametri də istifadə olunur. [16]

$$\begin{split} l_{g} &= ln \frac{E}{E'} = 1 + \frac{(A-1)^{2}}{2A} ln \frac{A-1}{A+1} \quad (\text{VII}) \text{ v} \text{ yaxud da} \\ l_{g} &= 1 + \frac{\alpha}{1-\alpha} ln \, \alpha \quad (\text{VIII}) \end{split}$$

Göründüyü kimi, bu parametr də düşən neytronun enerjisindən asılı deyil və toqquşulan nüvənin kütləsindən asılıdır.

Bizim tədqiq etdiyimiz nano-silisiumun tərkib hissəsini təşkil edən nüvələr ilə neytronların toqquşma zamanı nisbi maksimal enerji itkisi, orta loqarifmik enerji itkisi və neytron 0,0253eV-a qədər, yəni termal enerjiyə qədər enerji itkisi üçün toqquşmaların sayı aşağıda verilib. [15,16]

Element	A-atom kütləsi	α	3	Termolizasiyaya qədər tələb olunan toqquşmaların sayı
Hidrogen	1	0	1,00	18
Su (H ₂ O)	18		0,920	20
Karbon	12	0,716	0,158	115

Göründüyü kimi epitermal neytronlar ən çox ehtimallı enerji itkisinə hidrogen və su molekulları ilə qarşılıqlı təsirdə baş verir. Hidrogen və su molekulları ilə hər toqquşma anında 34-5600 eV-a qədər enerji itirir. Digər tərəfdən də radiosion tutma nəticəsində yaranan Si-31 nüvəsinin betta şüaların təsiri altında ilkin növbədə adsorbsiya olunmuş su molekulları parçalanır.

H n H $\rightarrow \beta$ OH (6)

Əmələ gəlmiş H atomları struktur defektləri tərəfindən tutulur.

$$H + Si \equiv \rightarrow \equiv SiH; \tag{7}$$

Parçalanma məhsulları olan oksigenli fraqmentlər

$$OH + Si \equiv \rightarrow \equiv SiOH$$
 (8)

$$OH + OH \rightarrow H.O + O \tag{9}$$

$$O + Si \equiv \rightarrow SiO; \tag{10}$$

Nano-silisiuma epitermal neytronların təsiri altında baş verən səthi nüvə kimyəvi prosesləri keyfiyyətcə xarakterizə etmək məqsədi ilə hər komponentə uyğun udulma zonasının təqribi təyin olunmuş sahələrinin şüalanma vaxtından asılılığı qurulub. (şəkil 2)



Şək. 2. Nano-silisiuma epitermal neytronların təsiri altında tərkib hissəsini təşkil edən (Si O Si) oksid (2) SiH_x hidrid (1) və hidrat (3) fazalarına aid İQ udma oblastlarının sahələrinin şüalanma vaxtından asılılığı.

Göründüyü kimi (6) prosesi nəticəsində molekulyar suyun miqdarı bütün müşahidə dövründə azalır. (8) prosesi üzrə müxtəlif növ hidroksil qrupları əmələ gəlir. Hidroksil qruplarının əmələ gəlməsini şüalanma vaxtı $\tau \ge 10$ saat olan nümunələrin İQ spektrlərində v=3655, 3750sm⁻¹ udulma zolaqlarının intensivliklərinin nisbi artımında görünür.

Bu zaman həmçinin də (7) prosesi üzrə hidrid, (8)-(10) prosesləri ilə oksigenli fazanın miqdarının artması müşahidə olunur.

Lakin şüalanma vaxtının sonrakı anlarında struktur OH və hidrid qruplarının da hidrogen nüvəsinə verilən böyük təpmə və betta şüaların enerjisi hesabına da parçalanma prosesləri gedir və nəticədə $\tau \ge 10$ saat şüalanma vaxtından sonra hidrid faza tam yox olur. Oksigenli fazanın miqdarı isə $\tau \approx 1-10$ saat müddətində maksimumdan keçərək $\tau \ge 10$ saat müddətində epitermal neytronlarla şüalanma nəticəsində özünün stabil stasionar qiymətini alır. Bu isə göstərir ki, nanosilisiumun tərkibində oksigen müxtəlif formada, daha stabil \equiv Si-O-Si \equiv körpü və yaxud da səthi SiO, SiOH formalarında olur. Sonuncu 3 forma udulan və təpmə enerjiləri hesabına asanlıqla parçalanır və stabil SiO₂ məxsus \equiv Si–O–Si \equiv körpü halları qalır. Epitermal neytronlarla şüalanmış nano-silisiumda SEM (şəkil 3) üsulu ilə tədqiqində şüalanma nəticəsində τ =10-20 saat səthi oksigen qatılığının 17,5%dən 20,4%-ə qədər yəni 16,5% artması müşahidə olunur. İQ-spektroskopik tədqiqatlar nəticəsində (şəkil 2, əyri 2-nin başlanğıc və son nöqtələri (Səv.=700mm² və S_{son}≈840mm²) uyğun qiymətlərin fərqi də təqribən 16-20% tərtibindədir. Yəni iki aslı olmayan tədqiqat nəticəsində sübut olunub ki, epitermal neytronların təsiri altında gedən proseslər nəticəsində stabil oksigenli birləşmə yaranır.

Digər tərəfdən də epitermal neytronlarla şüalanmış nano-silisium nümunələrinin İQ spektri və şəkil 2, əyri 3 göstərir ki, tədqiq olunmuş neytron seli qiymətləri oblastında radiosion davamlı hidroksil qrupu formalaşır.

Beləkilə nano-silisiumun epitermal neytronlarla şüalanması proseslərinin Furye İQ spektroskopik tədqiqi əsasında aşağıdakı nəticələrə gəlmək olar.

- Nano-silisiumun sintezi və saxlama dövründə aşağıdakı tərkib fraqmentləri formalaşıb.
- oksigenli faza
- hidrid fazası
- hidrat fazası (molekulyar su və hidroksil qruplar)
- az miqdarda üzvi sorbsiya olunmuş üzvi qarışıqlar müşahidə olunur.
- enerjisi (625÷1x10⁵)eV olan epitermal neytronların təsiri altında bu fazaların konsentrasiyalarının dəyişmə kinetikasının keyfiyyət xüsusiyyətləri aşkar olunub.
- müəyyən olunub ki, epitermal neytronların təsiri altında hidrat təbəqəsinin sürətli parçalanması baş verir. Hidrat fazasında baş verən radiosion çevrilmə prosesləri nəticəsində hidrid və oksigenli fazaların yaranması baş verir. Hidrat fazasının parçalanması nəticəsində müxtəlif növ nisbətən radiosion davamlı hidroksil qrupları yaranır.
- hidrid fazası epitermal neytronlarla şüalanma vaxtından asılılığı 0-5 saat müddətində maksimumdan keçərək sonrakı şüalanma vaxtlarında müşahidə olunmaz olur.
- nano-silisiumda hidrat fazasının parçalanma məhsulları və ətraf mühit oksigeni ilə qarşılıqlı təsir nəticəsində $\tau = 0 10$ saat ərzində oksigenli fazanın miqdarı maksimumdan keçərək, sonda radiosion davamlı oksid təbəqəsi yaranır.

Tədqiq olunmuş vaxt intervalında (τ =20 saat) nano-silisiuma neytronların təsiri altında oksigenli fazanın miqdarının təqribən 16-20% artımı müşahidə olunur.

Ədəbiyyat

- 1. Л.Л.Кузнецова, А.И.Ефимова, Осминкина, Л.А.Голованц, В.Ю.Тимошенко, П.Р.Кашкаров. Иследование в слоях двухлучепреломления в слоях пористого кремния методом инфракрасной Фурье-спектроскопии / Ж.Физика Твердого Тела, 2002, Т.44, вып.5, с.780-784.
- 2. Canham I.T. // Appl.Phys. Leff, 1990, v. 57, p.1046-1048
- 3. Wolkin M.V., Jorne J. Fauchet P.M, Alan.C.Delerue G. // Phys.Rec.Leff, 1999, v.82, p.197-200.
- 4. Ищенко А.А., Фетисов Г.В.Асланов Л.А. Напокремний: свойства, получение, применние, методы исследование и контроля. М.Физматлит, 2011., с.648
- Dokyoung Kim, Jonathan M. Zuidema, Jinyoung Kang, Youlin Pan, Lianbin Wu, David Warther, Barry Arkles, and Michael J. Sailor, Facile surface modification of hydroxylated Silicon nanostructures using heterocyclic silanes. DOI: 10.1021/jacs.6b08614, J. Am. Chem. Soc. 2016, 138, 15106–15109

- 6. Chang Huan and Sun Shuqing. Silicon nanoparticles: Preparation, properties, and applications. Chin. Phys. B Vol. 23, No. 8 (2014) 088102
- 7. Асланов Л.А., Захаров В.Н., Захаров М.А., Яценко А.В. Способ получения стабилизирований кластеров кремния // Патент Рф N.2415079 опуб.27.03.2011
- 8. Асланов Л.А., Захаров В.Н., Савилов С.В. Способ получения напокристаллического кремния // Патент Рф N.2471709 опуб. 10.07.2013
- А.А.Гарибов, Н.Н. Гаджиева, С.З.Меликова. 00Иследование γ облученных боросиликатов методами ИК-спектроскопии и электропроводности // Журнал физика и химия обработки материалов., 2008, N3, с.19-23.
- Kamychny A.I., Zakharov Y.N., Zakharov M.A., Yatsunko A.V., Aslanov L.A., Magdossis Photoluminescent silicon nanocrystals stabilized by ionic Liquid // Journal of Nanoparticle Research 2011, v.13, p.1971-1978
- 11. Ефимова А.А., Зайцев В.Б, Болдырев Н.Ю, Кашкаров П.К. Инфракрасноя Фурьеспектрометрия: Учебное пособие М.: Физический факультй МГУ, 2008, 133с.
- 12. Кашкаров П.К., Тимошенко В.Ю. Оптика твердого тела и низкоразмерных структур. М.,: Пумс, 2008, 292с.
- 13. К.Н.Мухин Экспериментальная ядерная физика Москва, Атомиздат, 1974, с.309
- 14. Т.В.Голасивили, В.П.Чечев, А.А.Абов, В.М.Куприянов, А.П.Демидов Справочник нуклидов-2 Москва, ФГУП «ЦНИИ Атоминформ 2002, 345с.
- 15. Reuss.P. Neutron physics: EDP Sciences, 2008
- 16. Lamarch J.R. "Introduction to Nuclear Reactor Theory Addison-Wesley Pub.Co., Reading, MA,1975

STUDY OF PROCESSES UNDER THE INFLUENCE OF EPITHERMAL NEUTRONS IN NANOSILICON BY THE FOURIER-IR-SPECTROSCOPY METHOD

A.A. Garibli, S.Z. Melikova, M.A. Ramazanov, A.A. Garibov

Abstract: The effect of epithermal neutrons on nano-silicon fusion by IR spectroscopic absorption was investigated. Specific IR-absorption strips have been identified in nano-silicon in the 4000-400 sm⁻¹ frequency range. Under the influence of epithermal neutrons, the kinetics of change of their concentrations in relative units were investigated depending on the radiation time of these components observed in IR-spectra.

Keywords: IR-spectra, epithermal neutrons, nano-silicon

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЭПИТЕРМАЛЬНЫХ НЕЙТРОНОВ В НАНОКРЕМНИИ МЕТОДОМ ФУРЬЕ-ИК-СПЕКТРОСКОПИИ

А.А. Гарибли, С.З. Меликова, М.А. Рамазанов, А.А. Гарибов

Резюме: Исследовано влияние эпитермальных нейтронов на нано- кремния методом Фурье-ИКспектроскопии. Основные полосы ИК-поглощения были идентифицированы в нано-кремнии в диапазоне частот 4000-400 см⁻¹. Под влиянием эпитермальных нейтронов исследовалась кинетика изменения их концентраций в относительных единицах в зависимости от времени излучения этих компонентов, наблюдаемых в ИК-спектрах.

Ключевые слова: Фурье-ИК-спектры, эпитермальные нейтроны, нано-кремний