



AZƏRBAYCAN ELM FONDU

**Azərbaycan Elm Fondunun
2022-ci il üçün ƏSAS qrant müsabiqəsinin
(AEF-MCG-2022-1(42)) qalibi olmuş
layihənin yerinə yetirilməsi üzrə aralıq
(rüblük olaraq 7-ci mərhələ)**

ELMI-TEXNİKİ HESABAT

Layihənin adı: **Nano strukturlu ZrC, TiC və WC nazik təbəqələrin yüksək temperatur, radiasiya və koroziyaya dayanıqlı material kimi tətbiq imkanları**

Layihə rəhbərinin soyadı, adı və atasının adı: **Hüseynov Hüseyn Cəlil oğlu**

Layihənin nömrəsi: **AEF-MCG-2022-1(42)-12/03/1-M-03**

Müqavilənin imzalanma tarixi: **31 mart 2023-cü il**

Qrant layihəsinin yerinə yetirilmə müddəti: **24 ay**

Layihənin icra müddəti (başlama və bitmə tarixi): **01 may 2023-cü il - 01 may 2025-ci il**

Layihənin VII mərhələ üzrə (rüb) məbləği:

Hesabatda aşağıdakı məsələlər işıqlandırılmalıdır:

1	Layihənin həyata keçirilməsi üzrə cari rübdə yerinə yetirilmiş elmi işlər Aparılan bir çox tədqiqatlar göstərmişdir ki, titan karbid (TiC) yüksək aşınma və eroziyaya qarşı davamlı xüsusiyyətlərinə görə diffuziya maneəsi kimi effektiv şəkildə istifadə edilir və dekorativ tətbiqlər üçün də geniş istifadə olunur. Bu material yüksək sərtliyi, kimyəvi sabitliyi və estetik görünüşü ilə müxtəlif sənaye sahələrində, o cümlədən avtomobil, aerokosmik və elektronika sektorlarında tətbiq edilir. Son illərdə titan karbid və nitridin IV nəsil nüvə reaktorları üçün uyğunluğu xüsusi maraq doğurmuşdur. TiC əsasında hazırlanmış materiallar, nüvə radiasiyasının zərərli təsirlərini azaltmaq, atom elektrik stansiyalarında təhlükəsizlik tədbirlərini gücləndirmək və yanacaq elementlərinin istismar müddətini artırmaq məqsədilə nəzərdə tutulmuşdur. Bu materialın aşağı neytron udma en kəsiyi və yüksək istilik keçiriciliyi onun sürətli neytron sistemlərində istifadəsini daha da məqsəduyğun edir. Titan karbid və nitrid kristalları yüksək temperaturda istiyə qarşı dözümlü olub, aşağı neytron udma qabiliyyəti, müstəsna sərtlik və əla korroziyaya davamlılığı ilə fərqlənir. Bu xüsusiyyətlər TiC-in sürətli neytron reaktorları üçün perspektivli material olmasını təmin edir. Kristal quruluş baxımından titan və azot atomları kubik kristal qəfəsdə (CCP) düzülmüşdür. Titan atomları arasında məsafə 0,302 nm-dir və bu struktura görə titan nitrid üzə mərkəzləşmiş kub (FCC) kristal fazasına malikdir. Bu kristal quruluş natrium xlorid (NaCl) tipinə bənzəyir və yüksək stabilik nümayiş etdirir. Həm titan karbidin həm də titan nitridin kristal strukturu onun mexaniki və termal xassələrinə böyük təsir göstərir. Bu sabit və sıx struktura malik olması sayəsində material yüksək mexaniki gərginliklərə qarşı dayanıqlıdır və müxtəlif aqressiv mühitlərdə korroziyaya qarşı müqavimət göstərir.
---	---

TiC müxtəlif sənaye sahələrində geniş tətbiq sahəsinə malikdir. Onun yüksək sərtliyi və aşınmaya davamlılığı onu kəsici alətlərin, avtomobil və aerokosmik komponentlərin örtük materialı kimi istifadəsinə imkan yaradır. Bundan əlavə, TiN-in qızılı rəngə malik olması onu zərgərlik sənayesində və dekorativ örtüklərdə populyar materiala çevirir. Bundan başqa, TiC nazik təbəqələri elektronika sahəsində qoruyucu örtük kimi istifadə edilir. Yüksək keçiricilik və stabil fiziki xüsusiyyətləri sayəsində yarımkeçirici cihazlarda, mikroelektronika komponentlərində və optik filtrlərdə effektiv tətbiq olunur. TiC yüksək aşınma və korroziyaya davamlılığı, istilik və elektrik keçiriciliyi, eləcə də nüvə radiasiyasına qarşı müqaviməti onun müxtəlif texnoloji və sənaye sahələrində əvəzolunmaz material kimi çıxış etməsinə imkan yaradır. Onun IV nəsil nüvə reaktorlarında potensial istifadəsi, uzunmüddətli stabilliyi və yüksək temperatur şəraitində davamlılığı TiN-i gələcəkdə daha geniş sahələrdə tətbiq etmək üçün perspektivli materiallardan biri kimi müəyyənləşdirir. Gələcək tədqiqatlar titan nitridin struktur və mexaniki xüsusiyyətlərinin daha dərinlən araşdırılmasına və onun yeni tətbiq sahələrinin inkişaf etdirilməsinə yönəldilmişdir.

Təzyiqli su reaktoru (PWR) tipli kommersiya nüvə reaktorlarının uzunmüddətli istismarı zamanı soyuducu suyun həddindən artıq istiləşməsi qaçılmaz bir haldır. Bu proses nəticəsində, reaktorun yanacaq örtüyünün üst səthlərində arzuolunmaz çöküntü və digər təbəqələrinin əmələ gəlməsi müşahidə olunur. Bu çöküntülər istismar müddətini qısaldı, istilik ötürülməsini azaldı və avadanlığın effektivliyini aşağı sala bilər. Bu problemin qarşısını almaq üçün səthlərin korroziyaya və çirklənməyə qarşı qorunması məqsədilə müxtəlif örtük materiallarının tətbiqi mühüm aktualıq kəsb edir. Tədqiqatlar göstərmişdir ki, titan karbid və nitrid təbəqəsi yüksək korroziyaya davamlılığına görə effektiv qoruyucu örtük kimi istifadə edilə bilər. Təcrübə zamanı TiC qoruyucu örtüyünün təsiri 1 və 2 həftəlik dövrlər ərzində araşdırılmışdır. Nəticələr göstərmişdir ki, titan nitrid örtüyünün tətbiqindən sonra çirklənmənin sıxlığı əhəmiyyətli dərəcədə azalmışdır. İlk müşahidələr göstərir ki, TiC örtüyü tətbiq edildikdə təbəqənin orta qalınlığının azalması nəticəsində NiFe_2O_4 çöküntüsünün əmələ gəlmə intensivliyi azalmışdır. Növbəti dövrlərdə aparılan analizlər nəticəsində örtülməmiş boruda nikel və dəmir (Ni/Fe) nisbətinin 0,51 olduğu, TiC ilə örtülmüş boruda isə bu nisbət 3,10-a yüksəlmiş müəyyən edilmişdir. Bu nəticələr əsasında belə qənaətə gəlinmişdir ki, TiC örtüyü tətbiq edildikdə çirklənmənin sıxlığı 21 dəfə azalmışdır. Bu da onun nüvə reaktorlarında istifadəsinin səmərəliliyini təsdiqləyir. Beləliklə titan karbid və nitridin nüvə reaktorlarının yanacaq elementlərində qoruyucu örtük kimi tətbiqi çirklənmənin qarşısının alınmasında effektiv üsul kimi çıxış edir. Aparılmış tədqiqatlar göstərir ki, TiC-in tətbiqi ilə yanacaq örtüyünün istismar müddətini artırmaq, texniki xidmət xərclərini azaltmaq və reaktorun ümumi təhlükəsizliyini yüksəltmək mümkündür. Gələcək araşdırmalar titan karbid örtüyünün daha uzunmüddətli təsirlərini, müxtəlif temperatur və radiasiya şəraitində davranışını və digər müdafiə materialları ilə müqayisəsini əhatə etməlidir. TiC-in kompozit strukturlarla birləşdirilməsi və nanoölçülü örtüklərin tətbiqi də tədqiq edilməli olan mühüm sahələrdəndir.

Radiasiyanın keramika əsaslı materiallara təsirini öyrənmək məqsədilə müxtəlif titan nitrid əsaslı birləşmələr— TiZrCN , TiZrSiCN və TiZrNbCN —1450 kVt gücündə sürətli neytron şüalanmasına məruz qalmışdır. Tədqiqat nəticələri göstərmişdir ki, neytron şüalarının bu materialların örtük morfologiyasına hər hansı təsiri müşahidə edilməmişdir. Bu fakt göstərir ki, titan nitrid əsaslı keramik materiallar yüksək radiasiya mühitlərində struktur stabilliyini qoruyur. Əlavə olaraq, şüalanmadan sonra nümunələrdə hər hansı radioaktivlik aşkar edilməmişdir ki, bu da onların nüvə texnologiyalarında təhlükəsiz istifadəsini təsdiqləyir. Titan karbonitrid (TiCN) kristal fazasına müxtəlif elementlərin əlavə edilməsi yolu ilə korroziyaya davamlılığın dəyişməsi tədqiq edilmişdir. Tədqiqat nəticələri göstərmişdir ki, müxtəlif əlavələr materialın qoruyucu səmərəliliyinə fərqli təsirlər göstərir: Silisium (Si) əlavəsi: Təcrübələr göstərmişdir ki, Si əlavə edildikdə titan karbonitridin korroziyaya davamlılığı əhəmiyyətli dərəcədə artır və materialın qoruyucu səmərəliliyi 92%-ə çatır. Bu nəticə silisium atomlarının kristal toruna daxil olaraq səthdə qoruyucu təbəqənin formalaşmasına töhfə verdiyini göstərir. Niyobium (Nb) əlavəsi: Əksinə, niyobium əlavə edildikdə qoruyucu səmərəliliyin 1,39% azalması müşahidə edilmişdir. Bu, Nb atomlarının materialın strukturunda çatların və zəif sahələrin yaranmasına səbəb ola biləcəyini göstərir. Əvvəlki tədqiqatlar ionlaşdırıcı şüalanmanın TiC nanokristallarına təsirini müxtəlif dozalarda

öyrənmişdir. 200 keV-lik arqon ionları ilə şüalananan nümunələrin rentgen difraksiyası (XRD) analizi nəticəsində məlum olmuşdur ki, ionların təsiri altında titan karbid və nitrid kristallarında amorflaşma baş vermir. Bu, TiC kristal quruluşunun yüksək radiasiya müqavimətinə malik olduğunu sübut edir. Bununla yanaşı, şüalanmanın təsiri altında kristalit ölçülərində dəyişikliklər müşahidə edilmişdir. Maksimal şüalanma səviyyəsində kristallitlərin ölçüsünün 8 nm-ə qədər azaldığı müəyyən edilmişdir. Bu dəyişikliklər materialın mexaniki xüsusiyyətlərinə təsir edə bilər və gələcək tətbiqlərdə nəzərə alınmalıdır. Titan karbonitrid və onun əsaslı birləşmələrinin radiasiyaya və korroziyaya davamlılığı ilə bağlı aparılmış tədqiqatlar göstərir ki, bu materiallar nüvə texnologiyaları, aerokosmik sənaye və digər yüksək radiasiya şəraitlərində effektiv qoruyucu material kimi istifadə oluna bilər. Gələcək araşdırmalarda bu materialların müxtəlif radiasiya mənbələri altında uzunmüddətli sabilliyi və müxtəlif əlavələrlə xüsusiyyətlərinin daha dərinədən öyrənilməsi tövsiyə olunur. Bu tədqiqatların nəticələri göstərir ki, titan karbonitrid əsaslı birləşmələr yüksək mexaniki və istilik dayanıqlığı ilə yanaşı, radiasiyaya qarşı müqaviməti ilə də fərqlənir. Bu xüsusiyyətlər materialın sənaye və elmi-tədqiqat sahələrində istifadəsini genişləndirə bilər. Eyni zamanda, bu tip keçid materiallarının struktur xüsusiyyətləri yüksək təzyiq altında tədqiq edilmişdir. Tədqiqatlar nəticəsində məlum olmuşdur ki, yüksək təzyiq şəraitində materialların yüksək dözümlülüyü yalnız B1 fəza qrupu keçid materiallarında deyil, eyni zamanda titandan ibarət olan digər birləşmələrdə də müşahidə olunur. Bəzi tədqiqatçılar yüksək təzyiq (370 GPa) dəyərlərində B1 fəza qrupundan B2 fəza qrupuna keçidi müşahidə etmişlər. Bu keçidin səbəbi, yüksək təzyiq altında materialın struktural dəyişikliklərə məruz qalması ilə əlaqədardır. Lakin bu cür təzyiq dəyişiklikləri ideal CsCl strukturlarında təhriflərə səbəb olur, nəticədə materialın sabitliyi azalır və sabit struktur qorunub saxlanıla bilmir. Bu səbəbdən, yüksək təzyiq şəraitində materialın davranışının daha dəqiq öyrənilməsi mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Kub strukturlu titan birləşmələrinin neytron şüalanmasının termoheterogen kinetika müxtəlif tədqiqatlarda nəzərdən keçirilmişdir. Tədqiqat nəticələri göstərmişdir ki, şüalanmadan sonra bu materialların istilik tutumunun qiyməti $51,6 \text{ J/K} \times \text{mol}$ -a qədər yüksəlir. Bu artım, materialın termal xüsusiyyətlərində baş verən dəyişikliklərə işarə edir və bu cür dəyişikliklər, xüsusilə nüvə reaktorlarında yüksək radiasiya və temperatur şəraitində materialın davranışını izah etmək üçün vacibdir. Digər tədqiqatlarda isə DSC (Differential Scanning Calorimetry) metodu ilə aparılmış təcrübələr zamanı, metal birləşmələrində əmələ gələn hidroksid qruplarının temperaturun təsiri altında ($30\text{-}700^\circ\text{C}$ aralığında) tamamilə məhv olduğu müəyyən edilmişdir. Bu dəyişikliyin baş verməsi, materialın termal sabitliyinin və yüksək temperatur şəraitində davranışının yaxşı anlaşılmasına kömək edir. 616°C -də hidroksid qruplarının parçalanması, materialın yüksək temperaturda stabil qalmadığını və strukturunun dəyişdiyini göstərir. Nanosistemlərdə temperaturun təsiri altında müşahidə edilən istilik effektləri xüsusilə maraqlı olub, bu sahədə aparılan tədqiqatlar temperaturun materialların xüsusiyyətlərinə necə təsir etdiyini araşdırmağa imkan verir. Titan birləşmələrində temperaturun təsiri altında baş verən proseslərin tədqiqi də mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Bu tədqiqatlar, materialların radiasiyaya və temperatur dəyişikliklərinə qarşı müqavimətini qiymətləndirmək və gələcəkdə yüksək temperatur və radiasiya şəraitində istifadə ediləcək yeni materialların inkişafına yönəlmiş əhəmiyyətli nəticələr verə bilər. Titan karbonitrid və digər keçid materiallarının struktur xüsusiyyətlərinin yüksək təzyiq və temperatur şəraitində necə dəyişdiyini araşdırmaq, bu materialların nüvə enerjisi və digər yüksək radiasiya şəraiti olan sahələrdə istifadə potensialını artırmağa kömək edir. Gələcək araşdırmaların bu materialların daha yüksək radiasiya və temperatur şərtləri altında davranışlarını daha dəqiq öyrənməsi lazımdır ki, onlar daha effektiv və dayanıqlı materiallar kimi tətbiq edilə bilsinlər.

Titan birləşmələrinin püskürtülməsi nəticəsində əldə edilən kristallarda yüksək optik və elektrik xassələri müşahidə edilmişdir. Püskürtülən TiN_x kristallarının spektral ellipsometriya təhlili göstərir ki, bu materialda intraband və zolaqlararası udulma baş verir. Bu proses, TiN_x -nin stoxiometriyasındakı dəyişikliklərlə əlaqəlidir. Müəyyən edilmişdir ki, TiN_x kristalının stoxiometrik variasiyaları yalnız TiN-in zolaq strukturunu dəyişdirmir, həm də kristalloqrafik xassələrinə təsir edir, xüsusən Ti boşluqlarını tənzimləyir. Məsələn, x -in qiyməti artdıqca, Lorentz osilatorunun enerji mövqeyi xətti şəkildə qırmızıya doğru hərəkət edir. Bu dəyişiklik, TiN_x -nin zolaqlararası udulma xüsusiyyətləri ilə bağlı gözlənilən

təkamülləri izah edir. Tədqiqatlar nəticəsində TiNx nazik təbəqələrinin kütlə sıxlığı, zolaqdaxili udulma və elektron sıxlığı müəyyən edilmişdir. TiNx birləşməsinin sıxlığının çökmə şəraitinə görə dəyişməsi diqqətə cəlb edir; bu sıxlıq 4,4-5,7 q/sm³ arasında dəyişir və buna uyğun olaraq digər fiziki xassələrində də əhəmiyyətli dəyişikliklər baş verir. Bu, materialın fərqli tətbiqlər üçün uyğunluğunu artırır, məsələn, günəş seçici absorber (SSA) tətbiqləri üçün uyğundur, çünki TiN-in yüksək performansının onun işıq udma və optik xüsusiyyətləri ilə əlaqədardır. 400 °C temperatura qədər aparılmış tavlama təcrübələri, həm havada, həm də vakuum şəraitində, TiN-in oksidləşməsi nəticəsində TiNxOy fazasına keçişin baş verdiyini göstərmişdir. Bu dəyişiklik nəticəsində maddənin amorflaşmasının artması gözlənilsə də, əksinə, daha yaxşı təşkil olunmuş strukturlar müşahidə edilmişdir. Həmçinin, havada tavlanan TiN-in optik və udulma xüsusiyyətləri vakuumda tavlananadan daha yüksək olmuşdur, bu da materialın fərqli mühitlərdə davranışını izah edir. Bu nəticələr göstərir ki, tavlama şəraiti materialın xassələrinin dəyişməsində mühüm rol oynayır. Daha yüksək temperaturda (600 °C və 700 °C) aparılmış təcrübələrdə TiN-in xassələrində stexiometrik dəyişikliklərə və taxıl ölçüsündə əhəmiyyətli dəyişikliklərə baxmayaraq, müqavimətin təxminən 25% azaldığı müşahidə edilmişdir. Bu azalma nəticəsində 55 μΩ·sm müqavimət dəyəri əldə edilmişdir. Bu fenomen, temperaturun təsiri ilə strukturda qüsurların, boş yerlərin və interstisial atomların azalması ilə izah edilə bilər. Sadə sütunvari quruluşa malik TiN kristalları, 500 °C-dən sonra səthində Rutil-TiO₂ təbəqəsi əmələ gətirməyə başlayır. Bu dəyişiklik, azot (N₂) qazının buraxılması ilə birləşir və 700 °C-dən sonra daxili təbəqələrə doğru yönəlir. Sonrakı tədqiqatlar nəticəsində Arrhenius tipi əlaqə istifadə edərək, TiN-in xassələrindəki dəyişikliklərin aktivləşmə enerjisi və eksponensial amil kimi parametrlər müəyyən edilmişdir. Bu əlaqənin göstərdiyi nəticələrə əsasən, aktivləşmə enerjisi 110±10 kJ/mol və eksponensial amilin qiyməti 2,2×10⁻⁶ sm²/s olaraq müəyyən edilib. Bu məlumatlar, TiN birləşmələrinin yüksək temperatur şəraitindəki davranışını daha yaxşı anlamağa kömək edir və bu cür materialların uzun müddətli tətbiqlərdəki etibarlılığını proqnozlaşdırmağa imkan verir. Titan nitrid birləşmələrinin müxtəlif şərtlərdəki fizikokimyəvi xüsusiyyətlərinin tədqiqi, onların müxtəlif sənaye sahələrində, o cümlədən nüvə reaktoru, günəş enerjisi sistemləri və elektronika sahələrində istifadə imkanlarını genişləndirir. Püskürtülmə üsulu ilə alınan TiNx təbəqələrinin struktur xüsusiyyətlərinin və temperatur təsirinə bağlı dəyişikliklərinin dərindən öyrənilməsi, bu materialların optimallaşdırılmasına və daha geniş tətbiq sahələrinə uyğunlaşdırılmasına kömək edəcəkdir. TiN nanokristallarının şüalanma və difraksiya analizi müxtəlif dozalarda və şüalanma müddətinə məruz qaldıqdan sonra aparılmışdır. Alınan rentgen spektrləri, kristalların struktur xüsusiyyətlərini və şüalanma təsirlərini daha yaxşı başa düşmək məqsədilə müəyyən edilir. Maksimum 2θ = 43.0895° difraksiya bucağı, d = 2.122 Å planarası məsafəyə uyğundur. Bu, TiN kristalının (111) yönlü difraksiya zirvəsidir. Alınan spektrlər müvafiq olaraq (111), (200), (220), (311), (222), (400), (331) və (420) əks olunmalarına görə indeksləşdirilib. Fullprof proqram paketi istifadə edilərək difraksiya spektrlərinin daha dəqiq təhlili aparılmışdır. Rentgen şüası analizinin nəticələrinə görə, şüalanmamış kristallitlərin qəfəs sabiti və həcmi hesablanmışdır. Beləliklə, TiN kristalının a = b = c = 4.24438(9) Å və V = 76.461(9) Å³ olduğu müəyyən edilmişdir. Təcrübələrdən alınmış bu qiymətlər, verilmiş parametrlər əsasında aparılan digər hesablamalarla uyğundur.

Tədqiqatlar dörd müxtəlif şüalanma dozası və müddəti üçün aparılmışdır. Spektrlərin təhlili zamanı məlum olmuşdur ki, qamma şüalarının 35 gün ərzində 3500 kGy şüalanması nəticəsində kristal strukturunda faza keçidi müşahidə edilməmişdir. Şüalanmamış nümunələrin tədqiqi zamanı alınan rentgen şüalarının difraksiya spektrlərində müşahidə edilən maksimumlar, şüalanmamış nümunələrin spektrlərində də göstərilmişdir. Bununla belə, hər bir dozadan sonra nanokristallitlərin difraksiya spektrində kiçik fərqlər olmuşdur ki, bu da şüalanma zamanı bütün materialda uzun sütun qanunauyğunluğunun qismən pozulması ilə izah edilə bilər. Qamma-şüaların dağıdıcı təsiri nəticəsində bəzi kimyəvi element atomları ideal mövqelərindən sürüşərək kristal strukturunda dəyişikliklər yaradır. Ionlaşdırıcı şüalanma, kristallarda zəif bağların qırılmasına səbəb olur, nəticədə nümunənin səthində və daxilində qismən amorfizasiya baş verə bilər. Amorfizasiya baş verdikdə, rentgen şüalarının difraksiya spektrlərində əlavə fon görünməyə başlayır. Nümunələrdə baş verən amorfizasiya, fonun sahəsi və

pikl r n integrasiyasına  sas n m  yy n edilmi dir. Hesablamalar n tic sində h r bir dozada m vafiq olaraq 0.3%, 0.5%, 1.2% v  2.5% amorf  ma prosesi ba  verdiyi a kar edilmi dir. TiN nanokristallarının m xt lif   alanma dozasi v  m dd tin  m ruz qalması, materialın struktural x susiy tl rin  m  yy n t sirl r g st rmi dir. Bu d yi iklikl r,   alanmanın materialın struktur v  optik x susiy tl rin  nec  t sir etdiyini anlama a imkan verir. H m inin, amorfizasiya prosesinin v  kristalların i  strukturunun d yi m si, TiN nanomateriallarının t tbiq sah l rində daha d qiq proqnozlar verm y  k m k ed  bil r.

Qamma   ularının y ks z kvantlardan ibar t oldu u m lumdur. Bu   uların t siri il  materialın amorfizasiya prosesi t kc  s thd  deyil, b t n h cmin d  ba  verir. Y ni, qamma   ularının t siri n tic sində materialın strukturunda  mumi d yi iklikl r meydana g lir. Qamma   ularının z if kimy vi rabit l r n qırılması zamanı, kristal strukturunda b zi q f s parametrl rində c zi d yi iklikl r ba  verir. Bu, kristallarda kimy vi rabit l r n z ifl m si v  ya qırılması il   laq dar olaraq ba  ver n bir prosesdir. Z if rabit l r n qırılması n tic sində, kristal q f sinin  l   l rində v  strukturlarında m  yy n d yi iklikl r meydana g lir.   alanma dozasi v  m dd tindən asılı olaraq, TiN nanohiss cikl r nin q f s parametrl ri v  elementar q f sin h cmi d yi ir. A a ıda C dv l 1-d  m xt lif   alanma dozasi il    alanmı  TiN nanohiss cikl r nin q f s parametrl ri v  elementar q f sin h cmi    n  ld  edil n qiym tl r t qdim olunur.

C dv l 1:   alanmı  TiN nanohiss cikl r nin q f s parametrl ri v  elementar q f sin H cmi

F�za qrupu	��alanma dozasi	$a, \text{�}$	$b, \text{�}$	$c, \text{�}$	$V, \text{�}^3$
F m -3 m	�lkin	4.24438(9)	4.24438(9)	4.24438(9)	76.461(9)
F m -3 m	9 saat 50 kGy	4.24225(7)	4.24225(7)	4.24225(7)	76.347(2)
F m -3 m	35 saat 200 kGy	4.23964(9)	4.23964(9)	4.23964(9)	76.206(3)
F m -3 m	6,5 g�n 900 kGy	4.23923(8)	4.23923(8)	4.23923(8)	76.183(3)
F m -3 m	35 g�n 3500 kGy	4.23864(10)	4.23864(10)	4.23864(10)	76.152(3)

C dv ld n g r nd y  kimi,   alanma dozasi il  q f s parametrl rindəki d yi iklikl r c zidir, lakin bu d yi iklikl r, amorfizasiya v  struktural d yi iklikl r n materialın x susiy tl rin  nec  t sir etdiyini g st rir. C zi artım,   alanmanın kristal strukturu  z rindəki t sirini v  materialın kimy vi ba larının z ifl m sini g st rir. Qamma   ularının TiN nanohiss cikl r nin strukturu  z rindəki t siri, kristalın q f s parametrl rindəki d yi iklikl r v  amorfizasiya prosesl ri vasit sil   z n  g st rir. Bu c r d yi iklikl r, TiN materiallarının t tbiq sah l rində uzun m dd tli istifad  zamanı nec  davranaca ını anlama a k m k edir.   alanmanın TiN nanohiss cikl r nin kristal strukturu  z rindəki t sirini vizualla dırmaq    n spektral analizl r aparılmı dır. Bu analizl r,   alanma dozasının artması il  kristal strukturlarında  ox ki ik d yi iklikl r m  ahid  edilm sini g st rir.  sas n tic , difraksiya spektrl rindəki maksimumların yerd yi m sidir. Bel  ki,   alanma dozasi artdıqca, spektrl rd ki Braqq m vq l ri x oxu boyunca yerd yi ir.

  alanma dozasının artması il , elementar q f s h cminin v  q f s parametrl r nin ki ildiği m  ahid  edilir. Bu d yi iklikl r, materialın strukturundakı z d l nm l r n, x sus n d  q f s bo luqları v  atom d z l   nd ki pozulmaların n tic sidir.   alanma, kristalların amorf  ma prosesin  s b b olur v  n tic d  materialın makroskopik xass l ri d  d yi ir.   alanma dozasi artırdıqca TiN nanohiss cikl r nin kristal strukturu  z rindəki t sir daha da  h miyy tli olur. Difraksiya spektrl rindəki ki ik d yi iklikl r, q f s parametrl rindəki azalmalar v  elementar q f s h cminin d yi m si, TiN materiallarının   alanmaya qar ı m qavim tini v  uzunm dd tli istifad sini anlama a k m k edir. Bu t dqiqatlar, n v  texnologiyaları v  dig r y ks k enerjili   a m hitl rində istifad  olunan materialların davranı ını t hlil etmək    n vacibdir. Q f s parametrl r nin   alanma dozasından asılılı ından g r n r ki, kristal q f sin azalması 2 hiss y  b l n  bil r.  lkin dozalarda azalma k skin  kild  ba  verdi, lakin doza artdıqca h lletm  meydana g ldi v  daha yava  s r tl  azalma a ba ladı. Yuxarıdakı m lumatlar kristalitl r n  l   s n n d yi m si il  d  t sdiql nir. M lumdur ki, kristalitl r n  l   l ri haqqında  traflı m lumatı  errer d sturunun k m yi il  rentgen spektrl r nd n almaq olar :

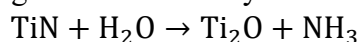
$$d = \frac{k\lambda}{\beta \cos \theta} \quad (1)$$

Burada k Şerrer sabitidir və $k = 0,9$ -a bərabərdir, λ - misə uyğundur Cu K α - rentgen dalğasının uzunluğu 0,15406 nm, β hər bir zirvənin radyanla FWHM qiyməti, θ difraksiya bucağıdır. Hesablamalar göstərdi ki, şüalanmadan əvvəl kristalitlərin orta ölçüsü $d \sim 20$ nm idi. Şüalanmanın təsiri ilə kristalitlərin ölçüsü azalıb və dozalara görə: ~ 2.69 , ~ 6.42 , ~ 6.96 , $\sim 7.58\%$. Cədvəl 2 şüalanmadan asılı olaraq TiN nanohissəciklərində kristalit ölçülərini göstərir.

Cədvəl 2. Müxtəlif dozalarda şüalananan TiN nanohissəciklərində kristalit ölçülərində dəyişikliklər.

Şüalanma dozaları	Hissəcik ölçüsü	Şüalanma vaxtı
İlkin	20,04604 nm	
50 kGy	19,50763 nm	9 saat
200 kGy	18,75956 nm	35 saat
900 kGy	18,65168 nm	156 saat
3500 kGy	18,52 765 nm	840 saat

Cədvəl 2-də verilmiş qiymətlərdən aydın olur ki, şüalanmadan asılı olaraq TiN nanohissəciklərinin kristalit ölçülərində azalma müşahidə olunur. Bunun bir neçə səbəbi var. Əsas səbəb qamma radiasiyasının materiallara dağıdıcı təsir göstərməsidir. Buna görə də şüalanma zamanı kristallarda həm amorflaşma prosesləri, həm də kristalit ölçülərinin azalması baş verir. Məlumdur ki, normal şəraitdə su molekulları materialların tərkibində asılmış vəziyyətdə olur. Bəzi hallarda su molekulları müxtəlif birləşmələrdə aşağıdakı kimi reaksiya verir:



Təqdim olunan reaksiya nəticəsində normal şəraitdə TiN nanokristalları arasında su ilə çox kiçik təbəqələr əmələ gəlib. Qamma radiasiyasının təsiri ilə bu təbəqələr parçalanır və nümunədən çıxır. Vaxt keçdikcə kristalit ölçüsünün azalması sürəti 35 saatlıq şüalanmadan sonra təbəqələr arasında əlavə reaksiya məhsullarının əhəmiyyətli hissəsinin yox olması və titan nitridi kristalitlərinin bu şüalanmaya qarşı sabit qalma qabiliyyəti ilə əlaqələndirilir.

Nanokristalların şüalanmasından əvvəl və sonra əldə edilmiş rentgen şüalarının difraksiya spektrlərinin təhlili nəticəsində materialın mikrostranması və yaranan dislokasiyaların sıxlığı hesablanmışdır. Məlum olduğu kimi, Wiliomson-Hall əsasında bu xassələri müəyyən etmək mümkündür :

$$\varepsilon = \frac{\beta}{4 \tan(\theta)} \quad (2)$$

Burada ε mikro gərginliyi, β radyanla verilən hər bir pik üçün fərdi FWHM dəyərini, θ isə difraksiya bucağıdır. Dislokasiyaların sıxlığını müəyyən etmək üçün kristalın vahid həcmi daxilində dislokasiya xətlərinin uzunluğunu hesablamaq lazımdır. Bu məqsədlə kristalit ölçülərinin Şerrer tənliyindən əldə edilən ölçülərdən nəzəri olaraq istifadə edilmişdir:

$$\delta = \frac{1}{d^2} \quad (3)$$

Burada d hər bir zirvəyə uyğun gələn kristalitlərin orta ölçüsünü ifadə edir. Mikrodeformasiya və dislokasiya sıxlığı üçün alınan qiymətlər Cədvəl 3-də göstərilmişdir.

Cədvəl 3. Qamma şüalanmasının müxtəlif dozalarında TiN nanokristallarında mikrodeformasiya və dislokasiya sıxlığının dəyişməsi.

Şüalanma dozası	Mikrostrain ($\mu\epsilon$) $\cdot 10^{-4}$	Dislokasiya sıxlığı $\delta \cdot 10^{-4}$
İlkin	31.7734	24.8853

50 kGy	32.8537	26.2779
200 kGy	34.1 3 61	28.4154
900 kGy	34.1 5 61	28.7451
3500 kGy	35.1308	29.1312

Cədvəl 3-də verilmiş qiymətlərdən görünür ki, qamma şüalarının təsiri kristallitlərin mikrosərtliliyinin artmasına səbəb olmuşdur. Bu kəmiyyətin artması şüalanmanın müddəti artdıqca yaranan dislokasiyaların orta sıxlığının artması ilə əlaqələndirilə bilər. Çünki bu dislokasiyalar kristallitlər boyunca lokallaşdırılmış gərginlik sahələri yaradır ki, bu da öz növbəsində mikrosərtliliyin artmasının əsas səbəbləridir.

Mikrodeformasiyanın dəyişməsinin müsbət olması onu deməyə əsas verir ki, şüalanma dozası artdıqca müvafiq kristal müstəviləri arasındakı məsafə eyni deyil. Şüalanmanın təsiri altında dislokasiya sıxlığının artması, yaranan dislokasiyalar nəticəsində strukturda qüsurların əmələ gəlməsinin göstəricisidir.

2 Layihənin həyata keçirilməsi üzrə planda nəzərdə tutulmuş işlərin yerinə yetirilmə dərəcəsi (cari rüb üçün, faizlə qiymətləndirməli)

95%

3 Hesabat dövründə alınmış **elmi nəticələr**, onların yenilik dərəcəsi

Tədqiqatlar nəticəsində, qamma radiasiyasının TiCN nanohissəciklərinə əhəmiyyətli dərəcədə təsir etmədiyi müəyyən edilmişdir. Qamma şüalanması nəticəsində, faza keçidləri və ya yeni fazaların yaranması müşahidə olunmamışdır. Bununla belə, şüalanma prosesinin kristal struktur və qəfəs parametrləri üzərində müəyyən təsir göstərdiyi göstərilmişdir. Dozanın artırılması ilə qəfəs parametrləri və kristallit ölçüləri arasında əks əlaqə müşahidə edilmişdir. Tədqiqatlar zamanı müəyyən edilmişdir ki, şüalanma dozasının artması, bu parametrlərin azalmasına səbəb olur. Ən yüksək 3500 kGy şüalanma dozası nəticəsində kristallit ölçüsündə təxminən ~0,54% və ~7,58% azalma müşahidə edilmişdir. Bu azalma, şüalanma zamanı nanohissəciklərin strukturunda dəyişikliklər baş verməsi ilə izah edilir. Kristallit ölçüsünün azalması, şüalanmanın təsiri ilə TiCN nanohissəcikləri ilə qarşılıqlı əlaqədə olan su molekullarının reaksiya məhsullarının dispersiyasına bağlıdır. Bu, şüalanma nəticəsində materialın strukturunun qismən təhrif olunduğunu və molekulyar səviyyədə dəyişikliklər baş verdiyini göstərir. 3500 kGy şüalanma dozası nəticəsində, qəfəsin bütün həcmi boyunca nizamlı strukturda struktur təhrifinin ümumi qiyməti ~2,51% olmuşdur. Bu dəyişiklik, qamma şüalarının materialın mikrostrukturunda qüsurlar yaratması və nəticədə mikro gərginliklərin və dislokasiyaların sıxlığının artmasına səbəb olması ilə əlaqədardır. Nəzəri hesablamalar göstərir ki, şüalanma nəticəsində yaranan gərginlik xətti olaraq baş verir və bu, şüalanma sonrası yaranan gərginliyin bütün həcmdə bərabər paylanması ilə izah edilir. Gərginliyin bərabər paylanması, materialın makroskopik xüsusiyyətlərini daha da dəyişdirir və bu dəyişikliklər şüalanmanın təsiri altında materialın möhkəmliyini və dayanma qabiliyyətini təsir edə bilər. Qamma şüalanmasının TiCN nanohissəciklərinə təsiri, faza dəyişikliklərinə səbəb olmur, lakin materialın mikrostrukturunda kiçik dəyişikliklər və təhriflər meydana çıxarır. Şüalanma dozasının artması, kristallit ölçülərinin kiçilməsi və qəfəs parametrlərindəki dəyişikliklərlə nəticələnir. Bu proseslər, materialın mikrostrukturundakı qüsurların artmasına və materialın məkanla bağlı xüsusiyyətlərinin dəyişməsinə səbəb olur. Bu tədqiqatlar, TiCN nanohissəciklərinin nüvə texnologiyaları və digər yüksək enerjili radiasiya mühitlərində istifadə potensialını daha yaxşı anlamağa kömək edir.

4 Layihənin yerinə yetirilməsi zamanı istifadə olunan üsul və yanaşmalar

Tədqiqatlar zamanı kubik titan karbonitrid nümunələri ilə bağlı hərtərəfli araşdırma aparılmışdır. Təcrübələrdə istifadə olunan nümunələr nanotoz şəklində olub, 5,24 q/sm³ həcmi sıxlıqlı, son dərəcə incə hissəcik ölçüləri (20 nanometrdən az), əhəmiyyətli xüsusi səth sahəsi (SSA, 75 m²/q-a qədər) daxil

	olmaqla, spesifik xüsusiyyətlərə malikdir. İstifadə olunan nümunələrin təmizlik dərəcəsi 99,2% kimi olmuşdur. Bu yüksək keyfiyyətli titan nitrid materialı ABŞ-ın Texas ştatında yerləşən nüfuzlu qurum olan US Research Nanomaterial, Inc.-dən alınmışdır. Hazırkı təcrübələrdə bütün nümunələr Elm və Təhsil Nazirliyinin Radiasiya Problemləri İnstitutunun "Radiasiya Mərkəzi"ndə 1,58063 Gy /s aktivliyə malik Co-60 mənbəyindən istifadə etməklə otaq temperaturunda şüalandırılmışdır. Nanokristal TiN hissəcikləri 50kGy, 200kGy, 900kGy və 3.5MGy kimi müxtəlif dozalarda şüalanmışdır. Kristal quruluşunun, faza tərkibinin, teksturasının və hissəcik ölçüsünün təhlilini əhatə edən titan nitrid nümunələrinin hərtərəfli xarakterizə edilməsi üçün rentgen şüalarının difraksiyasının (XRD) imkanlarından istifadə edilmişdir. EMPYREAN (PANalytical) difraktometrindən istifadə edərək, 1,5405 nm dalğa uzunluğuna malik Cu Ka radiasiyasından istifadə edilmişdir. XRD tədqiqatlarımız dəqiqədə 0,02 dərəcə artımla dəqiq ölçmələr əldə etməklə, 30-dan 120 dərəcəyə qədər uzanan $\theta/2\theta$ həndəsəsindən istifadə edərək geniş bucaq diapazonunu əhatə edilmişdir. Bundan əlavə, məlumatların əldə edilməsi zamanı baş vermə bucağı ardıcıl olaraq 3 dərəcə saxlanılıb. Materialın teksturası və kristalit ölçüləri haqqında daha dərinlən məlumat əldə etmək üçün biz XRD pik genişliklərini diqqətlə araşdırdıq. Təhlilimiz bu mühüm parametrlərin dəqiq müəyyən edilməsi üçün möhkəm texnika olan Rietveld analizini özündə birləşdirir.
5	Layihə üzrə elmi nəşrlər (məqalələr, monoqrafiyalar, icmallar, konfrans materialları, tezislər) (dərəcə olunmuş, çapa qəbul olunmuş və çapa göndərilmişləri ayrılıqda qeyd etməklə) <i>(surətlərini əlavə etməli!)</i> Afsun S. Abiyev, Elchin M. Huseynov, Rovshen F. Hashimov "Gamma radiation-induced alterations in nanocrystalline titanium nitride (TiN) particles: A structural perspective" Radiation Physics and Chemistry 218, 2024, 111638, https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2024.111638
6	İxtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər Yoxdur
7	Layihə üzrə əzamiyyətlər Nəzərdə tutulmayıb
8	Layihə üzrə elmi ekspedisiyalarda iştirak Nəzərdə tutulmayıb
9	Layihə üzrə digər tədbirlərdə iştirak Nəzərdə tutulmayıb
10	Layihə mövzusu üzrə elmi məruzələr (seminarlar, konfranslar, dəyirmi masalar və s. çıxışlar) Nəzərdə tutulmayıb
11	Layihə üzrə əldə olunmuş cihaz, avadanlıq və qurğular, mal və materiallar Nəzərdə tutulmayıb
12	Yerli həmkarlarla əlaqələr Nəzərdə tutulmayıb
13	Xarici həmkarlarla əlaqələr Nəzərdə tutulmayıb
14	Layihə mövzusu üzrə kadr hazırlığı Nəzərdə tutulmayıb
15	Sərgilərdə iştirak Nəzərdə tutulmayıb
16	Təcrübəartırmada iştirak və təcrübə mübadiləsi Nəzərdə tutulmayıb
17	Layihə mövzusu ilə bağlı elmi-kütləvi nəşrlər, kütləvi informasiya vasitələrində çıxışlar, yeni

yaradılmış internet səhifələri və s.

Nəzərdə tutulmayıb

Layihə rəhbərinin imzası _____ Hüseynov Hüseyn Cəlil oğlu

Tarix _____

QEYD: bütün hallarda uyğun olan bəndlər doldurulmalıdır.

