



UDK:53.044:53.047

Nuraddin ABDULLAYEV,  
O'zbekiston Milliy universiteti dotsenti v.b  
E-mail:nabdullayev9094@mail.ru

TAQU dotsenti S.S.Xudoyberdiyev taqrizi asosida

### FIZIKANING MEXANIKA BO'LIMIDAGI TEBRANISHLAR UCHUN XUSUSIY QIYMATLAR MASALASINI TIZIMLI TAHLIL ASOSIDA YECHISH

Anatatsiya

Tizimli tahlil mohiyati, tizimli tahlil nazariyasi, tamoyillari va uslublari asosida tizimli xarakterga ega bo'lgan murakkab qarorlarni yechish imkoniyatidir. Shundan kelib chiqib, tizimli tahlil maqsadi turli variantlardan, mavjud resurslardan samarali foydalangan holda natijaga erishish hisoblanadi. O'z o'rnida maqsadni shakllantirish strukturalashtirish va tahlil tizimli tahlilni asosiy va birlamchi vazifasi sifatida maqsadga erishishda uslub va metodidan holi ko'rish mumkin emas. Maqsadni aniqlash muammoni yechish yo'lidek sxematik ko'rinishda  $Z>F>S>P$ : Z-sub'yektiv maqsad, P-ob'yektiv maqsad, Maqsad (Z) noaniqligi va muqobilligi o'z o'rnida ko'p yo'llar mavjudligini olib keladi, bu esa natijalar ko'pligini olib keladi. Maqsadni aniqlash tizimli tahlil metodologiyasidan kelib chiqqan holda o'ta muhim jarayondir. Bu jarayonda bilim, tajriba, tahlil katta ahamiyatga ega.

Mamlakatimizda amalga oshirilayotgan keng ko'lamlı islohotlar doirasida tizimli fikr yurita oladigan, murakkab muammolarni hal eta oladigan yuksak madaniyatli shaxsni tarbiyalash tizimini yaratish zamonaviy ta'lim tizimining asosiy maqsadlaridan biri hisoblanadi. Shuning uchun ushbu maqolada fizikaga tizimli yondashish fizikaning mexanika bo'limini tizimli tahlil asosida o'qitishning mohiyati tushuntiriladi.

**Kalit so'zlar:** mexanika, tebranish, garmonik tebranish, metodika, tizim, tizimli tahlil, tizim nazariyasi, tizimli yondashuv.

### РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ДЛЯ КОЛЕБАНИЙ В РАЗДЕЛЕ МЕХАНИКИ ФИЗИКИ НА ОСНОВЕ СИСТЕМНОГО АНАЛИЗА

Аннотация

Суть системного анализа заключается в возможности решения сложных задач системного характера на основе теории, принципов и методов системного анализа. Исходя из этого, целью системного анализа является достижение результата посредством выбора из различных вариантов и эффективного использования имеющихся ресурсов. Формулировка цели, структурирование и анализ являются основными и первоочередными задачами системного анализа и неразрывно связаны с методами и подходами для достижения цели. Определение цели представляется как схема решения задачи:  $Z>F>S>P$ , где Z - субъективная цель, P - объективная цель. Неопределенность и альтернативность цели (Z) предполагает множество путей, что, в свою очередь, приводит к множеству результатов. Определение цели является чрезвычайно важным процессом в рамках методологии системного анализа. В этом процессе важную роль играют знания, опыт и анализ. Одной из основных целей современной системы образования является создание системы воспитания высококультурных личностей, способных мыслить системно и решать сложные задачи в рамках масштабных реформ, проводимых в нашей стране. В связи с этим в данной статье объясняется сущность системного подхода к обучению физике на основе системного анализа раздела механики.

**Ключевые слова:** механика, колебания, гармонические колебания, методика, система, системный анализ, теория систем, системный подход.

### SOLUTION OF THE EIGENVALUE PROBLEM FOR OSCILLATIONS IN THE SECTION OF MECHANICS OF PHYSICS BASED ON SYSTEM ANALYSIS

Annotation

The essence of system analysis is the ability to solve complex systemic problems based on the theory, principles and methods of system analysis. Based on this, the purpose of system analysis is to achieve a result by choosing from various options and effectively using available resources. Goal formulation, structuring and analysis are the main and primary tasks of system analysis and are inextricably linked with the methods and approaches to achieving the goal. Goal definition is presented as a problem solving scheme:  $Z>F>S>P$ , where Z is a subjective goal, P is an objective goal. The uncertainty and alternativeness of the goal (Z) suggests many paths, which, in turn, leads to many results. Goal definition is an extremely important process within the methodology of system analysis. Knowledge, experience and analysis play an important role in this process. One of the main goals of the modern education system is to create a system for educating highly cultured individuals who are able to think systematically and solve complex problems within the framework of large-scale reforms carried out in our country. In this regard, this article explains the essence of a systems approach to teaching physics based on systems analysis of the mechanics section.

**Key words:** mechanics, oscillations, harmonic oscillations, methodology, system, systems analysis, systems theory, systems approach.

**Kirish.** Tizimli tahlilning rivoji XX asr yarimida ilmiy-texnikaviy vazifalarning vujudga kelishi bilan paydo bo'ldi. Bunda asosiy o'rinni murakkab ob'yektlarni tashkil etish va amalga oshirish, bilish va amaliy tadbiq etish jarayonlar egallaydi. Bu o'z navbatida murakkab ob'yektlarning o'ziga xos xususiyatlarini alohida tadbqiq etish zaruratini talab qiladi. Mazkur vazifalar ijtimoiy amaliyotda tadbqiq etilishi zaruratini vujudga keltiradi. Yirik vazifalar yechimini topishda ko'p qirrali texnika bir-biri bilan bog'liq murakkab tizimga aylanib boradi. Zero, davrning o'zi insonlar oldiga yangi vazifalarni yechimlari bilan beradiki, uni anqlash, bilish, amal qilish, hal etish jamiyatda qaror topgan ta'lim-tarbiya tizimining mazmunida yotadi. Shuning uchun pedagogikada tizimli tahlilning metodologik asoslari tobora o'sib kelayotgan davr va ijtimoiy munosabatlar talablaridan kelib chiqib, o'z texnologiyasini muvoffiqlashtirilishini talab qiladi.

Tizim (yunoncha σύστημα – qismlardan iborat yaxlit birikma) – bir-biri bilan bog'langan va o'zaro ta'sirlashuvchi elementlarning yaxlit to'plamidir. Kundalik hayotimizda sistema so'zi turli xil boshqacha atamalar bilan ham ishlatiladi: nazariya (Platonning falsafiy sistemasi), sinflashtirish (Mendeleyev kimyoviy elementlar davriy sistemasi), amaliy faoliyatning tugallangan usuli (Stanislavskiy sistemasi (aktyorlik texnikasi usullari)), fikrlash faoliyatini tashkil etish usullari (sanoq sistemasi (sonlarning ketma-ketligi)), tabiiy ob'yektlar to'plami (Quyosh sistemasi), jamiyatning ayrim xususiyatlari (siyosiy sistema, iqtisodiy sistema va b.), qonuniyat va boshqalar.

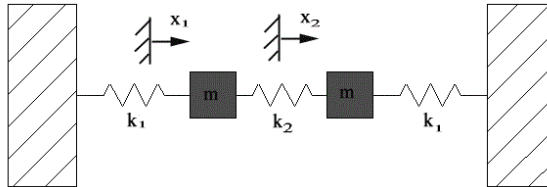
Bugungi kunda tizimli o'rganish deyarli hamma fan sohalarida mavjud, turli nomlar bilan ataladi: tizim nazariyasi, tizimli taxlil, sistemologiya, kibernetika, tizimli injeneriya, termodinamika, tizimli dinamika va boshqalar. Tizimli tahlil uslubiy tadqiqotlarning muhim ob'yekti va eng tez sur'atlar bilan rivojlanayotgan ilmiy yo'nalishlardan biri sanaladi. Har bir tizimli tahlil nazariy ta'limoti umumiy tamoyillarga bo'ysingan holda mahalliy muammolarning xususiyatidan kelib chiqib takomillashtiriladi. Bu esa maqolaning dolzarbligini belgilab berdi.

**Tadqiqot metodologiyasi.** Tadqiqotning maqsad: Ikkita massali tebranuvchan tizimni o'rganish. Ikkita massa va uchta prujina berilgan tebranuvchi tizim uchun harakat tenglamalarini keltirib chiqarish va MATLAB dasturida uni qo'llay olish ko'nikmalariga ega bo'lish.

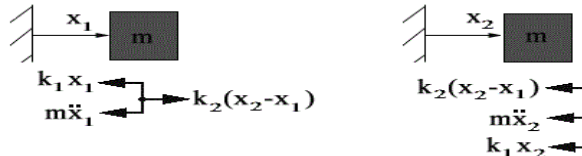
Masalaning qo'yilishi: Tinglovchi ikkita massali tebranuvchan tizimni o'rganish kerak. Buning uchun ikkita massa va uchta prujina bilan birlashtirilgan tebranuvchi fizik tizim uchun harakat tenglamalarini keltirib chiqarishi va MATLAB dasturi orqali natija olishi lozim.

**Ishni bajarish uchun ko'rsatma va namuna**

Ikkita massali tebranuvchan tizimni o'rganamiz. Ikkita massa va uchta prujina berilgan tebranuvchi tizimni qayraylik. Massalar faqat gorizontal yo'nalishda harakatlanadi (ular tepa va pastga harakat qilmaydilar).



Tenglamalarni tuzish. Bu tizim uchun biz erkin harakat sxemasini chizamiz.



Bundan kelib chiqib, harakat tenglamalarini yozamiz:

$$m\ddot{x}_1 + (k_1 + k_2)x_1 - k_2x_2 = 0$$

$$m\ddot{x}_2 + (k_2 + k_1)x_2 - k_2x_1 = 0$$

$$-\frac{k_1 + k_2}{m}x_1 + \frac{k_2}{m}x_2 = \ddot{x}_1$$

$$\frac{k_2}{m}x_1 - \frac{k_1 + k_2}{m}x_2 = \ddot{x}_2$$

Ularni matrisalar ko'rinishida yozib olamiz (yozuvni soddalashtirish uchun va  $\alpha$  va  $\beta$  deb belgilaymiz):

$$\begin{bmatrix} -\frac{k_1 + k_2}{m} & \frac{k_2}{m} \\ \frac{k_2}{m} & -\frac{k_1 + k_2}{m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -\beta & \alpha \\ \alpha & -\beta \end{bmatrix} \mathbf{x} = \ddot{\mathbf{x}}$$

Yechim ko'rinishini topamiz. Yechim ko'rinishini topishga o'tamiz. Bunda biz so'nish bo'lmaydi deb olib, faqat ossilyasyon yechimini izlaymiz.

$$\mathbf{x} = \mathbf{v}e^{j\omega t} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} e^{j\omega t}$$

$$\ddot{\mathbf{x}} = -\omega^2 \mathbf{v}e^{j\omega t} = -\omega^2 \mathbf{x}$$

$$\begin{bmatrix} -\beta & \alpha \\ \alpha & -\beta \end{bmatrix} \mathbf{x} = -\omega^2 \mathbf{x}$$

Shunday qilib, bu muammoning xususiy qiymatlarini topish bo'ladi.

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \quad \text{where } \lambda = -\omega^2$$

Xususiy qiymatlarni yechish.

$$|\mathbf{A} + \omega^2 \mathbf{I}| = 0 = \begin{vmatrix} \omega^2 - \beta & \alpha \\ \alpha & \omega^2 - \beta \end{vmatrix}$$

$$(\omega^2 - \beta)^2 - \alpha^2 = \omega^4 - 2\beta\omega^2 + (\beta^2 - \alpha^2) = 0$$

$$\text{so } \omega^2 = \frac{2\beta \pm \sqrt{4\beta^2 - 4(\beta^2 - \alpha^2)}}{2} = \beta \pm \alpha$$

Biz xususiy qiymatlari karakteristik tenglama tuzish orqali topamiz.

$$\omega_1^2 = \beta + \alpha = \frac{k_1 + 2k_2}{m} = 3$$

$$\omega_2^2 = \beta - \alpha = \frac{k_1}{m} = 1$$

Soddalashtirish maqsadida biz  $k_1=k_2=m=1$  holini ko'ramiz. Shunday qilib,

Endi biz xususiy vektorlarni ham topishimiz mumkin. Birinchi xususiy vektor uchun

$$(\mathbf{A} + \omega_1^2 \mathbf{I}) \mathbf{v}_1 = 0$$

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \mathbf{v}_1 = 0$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{1,1} \\ v_{1,2} \end{bmatrix} = 0$$

$$v_{1,1} = -v_{1,2}$$

yechimni topamiz.

Shunday qilib biz birinchi xususiy vektorni tanlaymiz. Bu vektorni ixtiyoriy o'zgarmas kattalikka ko'paytirishimiz mumkin.

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Ikkinchi xususiy vektor uchun

$$\begin{aligned} (\mathbf{A} + \omega_2^2 \mathbf{I}) \mathbf{v}_2 &= 0 \\ \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{v}_2 &= 0 \\ \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} v_{21} \\ v_{22} \end{bmatrix} &= 0 \\ v_{21} &= v_{22} \\ \mathbf{v}_2 &= \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

ni topamiz. Harakatlanuvchi tizim uchun umumiy yechim. Biz ikkita massali tizimning harakat tenglamasi uchun umumiy ko'rinishni aniqlaymiz.  $\mathbf{x}(t) = c_1 \mathbf{v}_1 e^{j\omega_1 t} + c_2 \mathbf{v}_1 e^{-j\omega_1 t} + c_3 \mathbf{v}_2 e^{j\omega_2 t} + c_4 \mathbf{v}_2 e^{-j\omega_2 t}$

E'tibor berish kerakki, har bir chastota ikki martadan ishlatiladi, sababi biz tanlagan yechim chastotaning kvadratiga bog'liq (musbat va manfiy yechimlar kelib chiqadi)

Differensial tenglamalarning yechimini topishga o'xshab, noma'lum koeffitsiyentlarni topish uchun boshlang'ich shartlarni aniqlaymiz.

Real yechimni topish uchun  $c_1$  va  $c_2$  yoki  $c_3$  va  $c_4$  lar bir biriga kompleks bog'langan bo'lishi zarur. Tenglamani boshqacha ko'rinishda yozamiz:

$$\mathbf{x}(t) = \gamma_1 \mathbf{v}_1 \cos(\omega_1 t) + \gamma_3 \mathbf{v}_1 \sin(\omega_1 t) + \gamma_2 \mathbf{v}_2 \cos(\omega_2 t) + \gamma_4 \mathbf{v}_2 \sin(\omega_2 t)$$

$$\mathbf{x}(0) = \gamma_1 \mathbf{v}_1 \cos(\omega_1 \cdot 0) + \gamma_3 \mathbf{v}_1 \sin(\omega_1 \cdot 0) + \gamma_2 \mathbf{v}_2 \cos(\omega_2 \cdot 0) + \gamma_4 \mathbf{v}_2 \sin(\omega_2 \cdot 0)$$

$$\mathbf{x}(0) = \gamma_1 \mathbf{v}_1 + \gamma_2 \mathbf{v}_2$$

Noma'lumlar topish uchun boshlang'ich shartlardan foydalanamiz.  $\mathbf{x}(0) = \omega_1 \gamma_3 \mathbf{v}_1 + \omega_2 \gamma_4 \mathbf{v}_2$

Ko'pchilik hollarda biz vaziyatning boshlang'ich shartlarida tezlikni nolga teng deb qabul qilamiz.

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \end{bmatrix}, \dot{\mathbf{x}}(0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}(0) = \omega_1 \gamma_3 \mathbf{v}_1 + \omega_2 \gamma_4 \mathbf{v}_2$$

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \omega_1 \gamma_3 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} + \omega_2 \gamma_4 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Boshlang'ich tezlikning shunday shartidan foydalanib, biz quyidagini yozamiz

Bu quyidagi tenglamalarga olib keladi.

$$0 = \omega_1 \gamma_3 + \omega_2 \gamma_4$$

$$0 = -\omega_1 \gamma_3 + \omega_2 \gamma_4$$

Bizga ma'lumki, chastota nolga teng bo'lmaydi va bu esa quyida bittagina yechimda shunday bo'ladi

$$\gamma_3 = \gamma_4 = 0$$

Shunday qilib, agar boshlang'ich tezlik nolga teng bo'lsa cosinus funksiyaning hadlari qoladi va sodda yechim topiladi

$$\mathbf{x}(t) = \gamma_1 \mathbf{v}_1 \cos(\omega_1 t) + \gamma_2 \mathbf{v}_2 \cos(\omega_2 t)$$

Noma'lum koeffitsiyentlarni topish

Boshlang'ich shartlardan foydalanib,  $\gamma_1$  va  $\gamma_2$  koeffitsiyentlarni topishimiz mumkin.

$$\mathbf{x}(0) = \gamma_1 \mathbf{v}_1 \cos(\omega_1 \cdot 0) + \gamma_2 \mathbf{v}_2 \cos(\omega_2 \cdot 0) = \gamma_1 \mathbf{v}_1 + \gamma_2 \mathbf{v}_2$$

Bu bir qancha usullarda yechishimiz mumkin bo'lgan 2x2 tenglamani beradi. Buning eng sodda usuli kompyuterda matrisalar sifatida

$$\mathbf{v} = [\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2] = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

qarab yechimini topishdir. Ustunlari masalaning xususiy vektorlaridan iborat bo'lgan 2x2 matrisani tuzamiz.

Boshlang'ich shartlar uchun tenglama

$$\mathbf{x}(0) = \mathbf{v} \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{bmatrix} = \gamma_1 \mathbf{v}_1 + \gamma_2 \mathbf{v}_2 \quad \mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{bmatrix} = \gamma_1 \mathbf{v}_1 + \gamma_2 \mathbf{v}_2$$

dan iborat bo'ladi.

Bunda  $\gamma_1$  va  $\gamma_2$  koeffitsiyentlarni  $\mathbf{x}(0)$  ga ko'paytirilgan teskari v kattalik deb osongina topishimiz mumkin.

$$\begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{bmatrix} = \mathbf{v}^{-1} \mathbf{x}(0)$$

Namuna. 2 massadan iborat tizimda tebranish

$k_1 = k_2 = m = 1$  bo'lgan holda ko'rib chiqaylik. Boshlang'ich shart quyidagicha  $\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$   
Faraz qilaylik, yechim quyidagicha

$$\mathbf{x}(t) = \gamma_1 \mathbf{v}_1 \cos(\omega_1 t) + \gamma_2 \mathbf{v}_2 \cos(\omega_2 t)$$

Bizga ma'lumki,

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \gamma_1 \mathbf{v}_1 \cos(\omega_1 \cdot 0) + \gamma_2 \mathbf{v}_2 \cos(\omega_2 \cdot 0) = \gamma_1 \mathbf{v}_1 + \gamma_2 \mathbf{v}_2$$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \gamma_1 \mathbf{v}_1 + \gamma_2 \mathbf{v}_2 = \gamma_1 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} + \gamma_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$1 = \gamma_1 + \gamma_2$$

$$0 = \gamma_1 - \gamma_2$$

Buni ikki noma'lumli ikkita tenglama ko'rinishida ifodalashimiz mumkin.

Bu holda koeffitsiyentlar quyidagiga teng bo'ladi

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \frac{1}{2}$$

Shunday qilib, harakat tenglamasi

$$\mathbf{x}(t) = \frac{1}{2} \mathbf{v}_1 \cos(\omega_1 t) + \frac{1}{2} \mathbf{v}_2 \cos(\omega_2 t)$$

yoki

$$x_1(t) = \frac{1}{2} \cos(\omega_1 t) + \frac{1}{2} \cos(\omega_2 t)$$

$$x_2(t) = -\frac{1}{2} \cos(\omega_1 t) + \frac{1}{2} \cos(\omega_2 t)$$

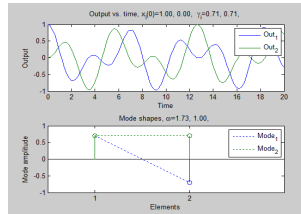
Ko'rinishda bo'ladi. Izoh: Boshlang'ich shartlarni bilgan holda bu yechimni matrisalar ko'rinishida ham topishimiz mumkin.

$$\mathbf{x}(0) = \gamma_1 \mathbf{v}_1 + \gamma_2 \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{bmatrix} = \mathbf{V} \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{bmatrix} = \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{x}(0)$$

$\gamma_1$  va  $\gamma_2$  koeffitsiyentlarni topish quyida MATLAB dasturida xisoblab quyidagi grafik chiziladi.

#### Natijalar tavsifi va tahlili



Yuqorida berilgan boshlang'ich shartlarda tizimning o'tish xarakteristikalarini o'zgarishi keltirilgan. Pastida tizim xususiy vektorining o'zgarishi berilgan. Vertikal o'qda amplituda, gorizontal o'qda esa xususiy qiymat keltirilgan.  $\gamma_1$  xususiy qiymati [0.7071; -0.7071] (bu havoranda berilgan), birinchi element 0.7071 qiymatga, ikkinchi element -0.7071 qiymatga ega.  $\gamma_2$  xususiy qiymati [0.7071; -0.7071] (bu yashil rangda berilgan). Punktir chiziqda bilan ko'rish yo'nalishi berilgan (ayrim elementlarning xususiy vektorlari bir birini to'sishi mumkin).

**Xulosa.** Tizimli tahlil muammoni hal qilish metodologiyasi sifatida muammoni hal qilish uchun zarur bo'lgan barcha zarur usullar, bilimlar va harakatlarni umumlashtiradigan ustun bo'lib xizmat qiladi. U jarayonni tadqiq qilish, statistik nazariya va shunga o'xshash boshqa sohalar o'rtasidagi munosabatlarni belgilaydi. Tizimli tahlil u yoki bu usulni qaysi bosqichda va qanday ishlatishni belgilaydi.

Qo'yilgan masala xulosasi: Muammoni hal qilish metodologiyasi sifatida tizimli tahlil muammoni hal qilish uchun zarur bo'lgan barcha zarur texnikalar, bilimlar va harakatlarni umumlashtirish uchun vosita bo'lib xizmat qiladi degan xulosaga kelishimiz mumkin. Bundan foydalanib, jarayon tahlili, statistik tahlil nazariyasi va boshqalar kabi sub'ektlar bilan munosabatlarni aniqlash mumkin. Tizimli tahlil usuli qachon va qanday shaklda qo'llanilishi kerakligini aniqlaydi.

#### ADABIYOTLAR

1. D.Imboden, S.Pfenninger Introduction to Systems Analysis: Mathematically Modeling Natural Systems, Springer: Heidelberg New York Dordrecht London, 2013
2. В.Н.Романов Системный анализ. Санкт-Петербург, СЗГЗТУ, 2006.
3. В.Н.Чернышов, А.В.Чернышов Теория систем и системный анализ: Учеб. пособие. Тамбов: ТГТУ, 2008
4. А.В.Антонов, Системный анализ, Учебник для ВУЗов, М.: Высшая школа, 2004
5. <http://www.swarthmore.edu/NatSci/echeeve1/Class/e12/E12Syll.html>
6. [https://en.wikipedia.org/wiki/Systems\\_analysis](https://en.wikipedia.org/wiki/Systems_analysis)
7. <http://www.businessdictionary.com/definition/systems-analysis-SA.html>
8. <https://ru.wikipedia.org/wik>



UDK:531.781.2

*Gulmurza ABDURAXMONOV,*  
*O'zMU Fizika fakulteti professori*  
*E-mail: gulmirzo@mail.ru,*  
*Muhriddin TURSUNOV,*  
*O'zMU Fizika fakulteti tayanch doktoranti*  
*Avazbek DEXQONOV,*  
*O'zMU Fizika fakulteti tayanch doktoranti*

*Fizika-matematika fanlari doktori, professor B.Umirzakov taqrizi asosida*

## POSSIBILITIES OF MAKING A STRAIN GAUGE FROM SILICATE GLASS DOPED WITH RUTHENIUM DIOXIDE

Annotation

In this paper, the effects of resistor paste components and baking temperature on the temperature coefficient of resistance (TCR) of a thick-film resistor were systematically investigated. Thick film resistors prepared from RuO<sub>2</sub> concentrations (from 10 wt% to 30 wt%) baked at different temperatures on an Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> substrate were investigated. The relationship between resistor resistance, TCR and scale factor (GF) was studied. The results show that TCR also increases with increasing RuO<sub>2</sub> concentration and baking temperature. Near the minimum (T<sub>min</sub>) of the resistance-temperature curve, the temperature has the least effect on the resistance value, and a thick-film resistor can be considered insensitive to temperature in a certain range. The ratio of TCR to GF and T<sub>min</sub> depends on the film resistance of thick film resistors. By varying the concentration of the conductive phase and the baking temperature, the film resistance of thick-film resistors can be controlled, and low-temperature strain gauges can be achieved for different ambient temperatures.

**Key words:** Thick film resistor, temperature coefficient of resistance (TCR); gauge factor (GF), doped silicate glass, RuO<sub>2</sub> metal oxide.

## ВОЗМОЖНОСТИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ТЕНЗОДАТЧИКА ИЗ СИЛИКАТНОГО СТЕКЛА, ЛЕГИРОВАННОГО ДИОКСИДОМ РУТЕНИЯ

Аннотация

В этой статье было систематически исследовано влияние компонентов резисторной пасты и температуры обжига на температурный коэффициент сопротивления (TCR) толстопленочного резистора. Исследованы толстопленочные резисторы, изготовленные из концентраций RuO<sub>2</sub> (от 10% до 30% по массе), прокаленных при различных температурах на подложке из Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Исследована взаимосвязь между сопротивлением резистора, TCR и масштабным коэффициентом (GF). Результаты показывают, что TCR также увеличивается с увеличением концентрации RuO<sub>2</sub> и температуры обжига. Вблизи минимума (T<sub>min</sub>) кривой сопротивление-температура температура оказывает наименьшее влияние на значение сопротивления, и толстопленочный резистор можно считать нечувствительным к температуре в определенном диапазоне. Отношение TCR к GF и T<sub>min</sub> зависит от сопротивления слоя толстопленочных резисторов. Изменяя концентрацию проводящей фазы и температуру обжига, можно контролировать пленочное сопротивление толстопленочных резисторов и получать низкотемпературные тензорезисторы для различных температур окружающей среды.

**Ключевые слова:** толстопленочный резистор, температурный коэффициент сопротивления (TCR); калибровочный коэффициент (GF), легированное силикатное стекло, оксид металла RuO<sub>2</sub>.

## RUTENIY DIOKSIDI BILAN LEGIRLANGAN SILIKAT SHISHADAN TENZODATCHIK YASASH IMKONIYATLARI

Аннотация

Ushbu maqolada rezistorli pasta komponentlari va pishirish haroratining qalin qatlamli rezistorning qarshilik harorat koeffitsientiga (TCR) ta'siri tizimli ravishda o'rganildi. Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> tagligida turli xil temperaturalarda pishirilgan RuO<sub>2</sub> konsentratsiyasidan (10 wt% dan 30wt% gacha) tayyorlangan qalin qatlamli rezistorlar tekshirildi. Rezistorlar qarshiligi, TCR va o'lovch omili (GF) o'rtasidagi munosabatlar o'rganildi. Natijalar shuni ko'rsatadiki, RuO<sub>2</sub> konsentratsiyasi va pishirish harorati ortishi bilan TCR ham ortadi. Qarshilik-harorat egri chizig'ining minimal (T<sub>min</sub>) yaqinida harorat qarshilik qiymatiga eng kam ta'sir qiladi va qalin qatlamli rezistor ma'lum bir diapazonda haroratga sezgir emas deb hisoblash mumkin. TCR ning GF va T<sub>min</sub>ga nisbati qalin qatlamli rezistorlarning qatlam qarshiligiga bog'liq. Supero'tkazuvchilar fazaning konsentratsiyasini va pishirish haroratini o'zgartirish orqali qalin qatlamli rezistorlarning qatlam qarshiligini nazorat qilish mumkin, so'ngra turli xil muhit haroratlari uchun past haroratlarni sezmaydigan tenzodatchiklarga erishish mumkin.

**Kalit so'zlar:** Qalin qatlamli rezistor, qarshilikning harorat koeffitsienti (TCR); o'lovch omili (GF), legirlangan silikat shisha, RuO<sub>2</sub> metal oksidi.

**Kirish.** So'nggi yillarda barqarorligi, deformatsiya sezuvchanligi va bir qator afzalliklari tufayli qurilish muhandisligi sohasiga qalin qatlamli rezistorlar deformatsiya datchiklari sifatida kirib kelmoqda [1,2]. Ideal tenzodatchik katta o'lovch omiliga ega bo'lishi va boshqa omillar datchikga ta'sir qilmasligi kerak. Biroq, aslida datchikga xalaqit beradigan boshqa omillar mavjud, masalan, elektromagnit maydonlar, harorat, namlik va boshqalar. Elektromagnit maydonlar va namlik muammosini tashqi muhitdan himoya qilish orqali hal qilish mumkin [3]. Tenzodatchiklarning sezgirlikni oshirish uchun umumiy usullar, haroratni qoplash texnologiyalaridan foydalanish [4] va haroratga sezgir bo'lmagan datchiklar rezistorlarini yaratish kerak [5]. Haroratni qoplash o'rni, haroratning sensorlarga ta'sirini kamaytirishning yana bir usuli – haroratga nisbatan kamroq sezgir bo'lgan materiallardan foydalanish. Shu nuqtai nazardan, tolali Bragg panjara datchiklari bo'yicha ko'plab tadqiqotlar mavjud. Oldingi tadqiqotlar, asosan, panjara tuzilishini o'zgartirdi yoki juda past kengayish koeffitsientiga ega bo'lgan tagliklardan foydalangan holda haroratga sezgir bo'lmagan panjara oldi [6,7]. Haroratni qoplash texnologiyalari bilan taqqoslaganda, haroratga sezgir bo'lmagan datchiklar datchiklarning murakkabligini yoki olish texnologiyasini soddalashtirishi va datchikning sezgirlikni oshirishi mumkin. Qalin qatlamli rezistorlarning haroratga sezgir bo'lishi, rezistor qatlamining qalinligiga [8], rezistor pastalari tarkibiga [9], yoqish sharoitlariga [10,11], va taglik materiallariga qarab o'zgarishi mumkin[12].

Ushbu maqolada biz pasta tarkibiy qismlarini va haroratga nisbatan sezgir bo'lmagan qalin qatlamli rezistorlarni olish uchun pishirish sharoitlarini o'zgartirish orqali TCRni boshqarishimiz mumkin. Bunday qalin qatlamli rezistorlar to'g'ridan-to'g'ri ma'lum bir harorat oralig'ida qo'shimcha komponentlar va sxemalarsiz qo'llanilishi mumkin. Qalin qatlamli rezistorning qarshilik-temperatura egri chizig'i TCR ning qiymati 0 ga yaqin bo'lsa deyarli parabolik ko'rinishda bo'ladi [13]. Qarshilik-harorat egri chizig'ining eng past nuqtasida (T<sub>min</sub> haroratda) qalin qatlamli rezistor haroratga sezgir emas deb hisoblanadi.

Ushbu ish qalin qatlamli rezistorlarning qarshilik-temperatura xususiyatlarini tizimli o'rganishni talab qiladi. Haroratning qalin qatlamli rezistorning qarshilik qiymatiga ta'siri ikki jihatni o'z ichiga oladi: harorat o'zgarishi natijasida yuzaga keladigan qalin qatlamli rezistor qarshiligining o'zgarishi; qarshilik qatlami va taglik o'rtasidagi issiqlik kengayish koeffitsienti farqi natijasida yuzaga kelgan termal deformatsiya. Qarshilikning o'zgarishi asosiy o'tkazuvchanlik mexanizmlarini o'z ichiga oladi, jumladan, tunnel modeli [13], sakrab o'tish nazariyasi [14], tor o'tkazuvchanlik diapazonlari va omik kontaktlar [15]. Biroq, aniq bir nazariya aniqlanmagan, ammo 96% li  $Al_2O_3$  taglikga  $RuO_2$  asosida tayyorlangan qalin qatlamli rezistorlarning haroratga bog'liqligi sakrab o'tish nazariyasiga mos kelishi haqida keng tarqalgan eksperimental dalillar mavjud [16]. Qarshilik va harorat o'rtasidagi munosabat quyidagi tenglama bilan ifodalanishi mumkin:

$$R = R_0 \sqrt{T} \exp(T_0/T)^{1/4} \quad (1)$$

bu yerda  $T_0$  quyidagicha aniqlanadi:

$$T_0 = \frac{16\alpha^3}{kN_0} \quad (2)$$

Bu erda  $k$  - Bolsman doimiysi,  $N_0$  - o'tkazuvchan zarrachalarning hajm va energiya birligidagi zichligi,  $\alpha$  - zarracha hajmi va shisha xususiyatlariga bog'liq parametr. Qarshilik-harorat qiymatlari (1) ifoda bilan hisoblash orqali qarshilik harorati egri chizig'ining eng past nuqtasidagi haroratni aniqlash mumkin, bu datchiklarning haroratga sezgir bo'lmagan diapazonini olishga yordam beradi.

**Material va metodlar.** Ushbu tadqiqot O'zbekiston Milliy universiteti Fizika fakulteti Nanokompzitsion materiallar ilmiy laboratoriyasida professor o'qituvchi, tayanch doktorantlar va ilmiy xodimlar tomonidan amalga oshirildi. Tadqiqot obekti sifatida konsentratsiyasi 10-30%  $RuO_2$  metal oksidi va qo'rg'oshin borosilikat shisha kukunlari aralashmasidan tayyorlangan rezistor olindi. Bunda  $RuO_2$  metal oksidiga qo'rg'oshin borosilikat shisha kukunlari aralashtirilib vaqtinchalik shakl hosil qiluvchi va namuna pishirish jarayonida uchib chiqib ketadigan aralashma aralashtirilib gel ko'rinishidagi pasta hosil qilindi. Hosil bo'lgan pasta trafaret yordamida keramik taglikka o'tqazildi. Tayyor bo'lgan rezistorli pastalar pechda quritilib 10 daqiqa davomida turli haroratlarda ( $750^\circ C$ ,  $850^\circ C$  va  $950^\circ C$ ) pishirildi. Natijada hosil bo'lgan qalin qatlamli rezistor normalashtirilgan qarshilik koeffitsiyentining haroratga bog'liqligi, TCR ning  $RuO_2$  konsentratsiyasiga bog'liqligi o'rganildi va eksperimental natijalarni sakrab o'tish-perkolatsiya modeliga moslashtirildi.

#### Tajriba.

**Namuna tayyorlash.** Ushbu maqolada laboratoriyada ishlab chiqarilgan  $RuO_2$  rezistorli pastasi ishlatildi. Pastalarning asosiy tarkibiy qismlari konsentratsiyasi 10-30%  $RuO_2$  zarralari va qo'rg'oshin borosilikat shisha kukunlaridan tayyorlangan. Organik vosita ushbu ikki kukun aralashmasiga qo'shildi va oxirgi rezistorli pastalar yaxshilab aralashtirildi. Keyin rezistorli pastalar 10 daqiqa davomida turli haroratlarda ( $750^\circ C$ ,  $850^\circ C$  va  $950^\circ C$ ) pishirildi. Har bir holat uchun uchta qalin qatlamli rezistor namunasi mavjud.

**Xususiyatlarni o'lchash.** Batafsil harorat xarakteristikasi ma'lumotlarini olish uchun qalin qatlamli rezistorning qarshilik qiymatlari  $10^\circ C$ ,  $25^\circ C$  va  $125^\circ C$  haroratlarda o'lchandi. TCR ning qiymatlari (3) tenglama bilan hisoblandi. [10].

$$TCR = \frac{R_{125} - R_{25}}{(125 - 25)R_{25}} \times 10^6 \text{ (ppm}/^\circ C) \quad (3)$$

Bu erda  $R_{25}$  -  $25^\circ C$  dagi qarshilik,  $R_{125}$  -  $125^\circ C$  da qarshilik.

Turli qarshilik qiymatlari bilan TFR ning qarshilik-temperatura xususiyatlarini taqqoslashni osonlashtirish uchun qarshilik qiymatlari quyidagicha normalashtirildi:

$$R_N = \frac{R(T) - R_{25}}{R_{25}} \quad (4)$$

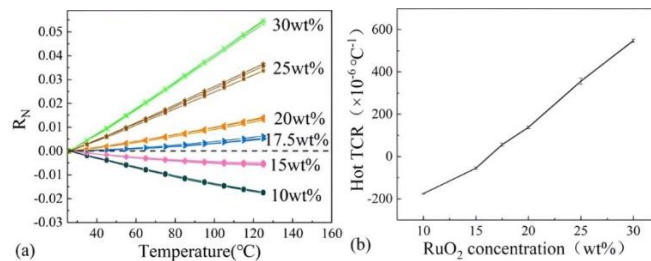
Bu erda  $R_N$  - normalashtirilgan qarshilik koeffitsiyenti,  $R(T)$  -  $T$  haroratda o'lchangan qarshilik.

O'lchov omilini o'lchash uch nuqtali egilish testi orqali amalga oshirildi [17]. Uch nuqtali egilish yuki bilan qalin qatlamli rezistorlarning nisbiy qarshilik o'zgarishi ( $\Delta R$ ) o'lchandi va qalin qatlamli rezistorning deformatsiyasi ( $\epsilon$ ) uch nuqtali egilish uchun nazariy formula bo'yicha hisoblab chiqildi. Shunday qilib, qalin qatlamli rezistorlarning GF (5) formula yordamida aniqlanadi.

$$GF = \frac{\Delta R/R}{\epsilon} \quad (5)$$

Bu erda  $R$  - rezistorning qarshiligi,  $\Delta R$  - deformatsiya natijasida yuzaga keladigan qarshilik o'zgarishi va  $\epsilon$  - deformatsiya.

**Natijalar.** Ushbu qismda  $RuO_2$  metal oksidining 10-30% konsentratsiyasiga ega qalin qatlamli rezistorlarning qarshilik-temperatura xususiyatlari muhokama qilindi. Namuna  $850^\circ C$  da 10 daqiqa davomida ushlab turildi. Tayyor bo'lgan qalin qatlamli rezistorning normalashtirilgan qarshilik koeffitsiyentining past haroratlarda ( $0^\circ C$  dan  $160^\circ C$  gacha) o'zgarishi va TCR ning  $RuO_2$  konsentratsiyasiga bog'liqligi o'rganildi (1-rasm).



1-rasm.(a) Normalashtirilgan qarshilik koeffitsiyentining haroratga nisbatan; (b) TCR ning  $RuO_2$  konsentratsiyasiga nisbatan bog'liqligi

1a-rasmida ko'rsatilganidek, qalin qatlamli rezistorlarning normalashtirilgan qarshilik koeffitsiyenti past haroratlarda ( $0^\circ C$  dan  $160^\circ C$  gacha) haroratning oshishi bilan asosan to'g'ri chiziqlar bo'ylab o'zgaradi. Turli xil  $RuO_2$  konsentratsiyasiga ega qalin qatlamli rezistorlarning haroratga sezgirliigi ham har xil bo'ladi.  $RuO_2$  konsentratsiyasi past bo'lganda (10,15%), qalin qatlamli rezistorlar salbiy qarshilik-temperatura xususiyatlarini ko'rsatadi, normalashtirilgan qarshilik koeffitsiyenti harorat oshishi bilan kamayishini ko'rishimiz mumkin. Boshqa tomondan, yuqori  $RuO_2$  konsentratsiyasiga ega bo'lgan qalin qatlamli rezistorlarning qarshilik-harorat ko'rsatkichlari ijobiylikni ko'rishimiz mumkin. Supero'tkazuvchi fazaning konsentratsiyasi oshgani sayin, qarshilik va harorat o'rtasidagi salbiy munosabat musbatga aylanadi. 1b-rasmida qalin qatlamli rezistorlarning TCRlari  $RuO_2$  konsentratsiyasining funksiyasi sifatida chizilgan. Qalin qatlamli rezistorlarning TCRlari -200 dan 600 ppm/ $^\circ C$  gacha bo'lgan soxada  $RuO_2$  konsentratsiyasining ortishi bilan ortadi. Bu vaqtda harorat o'zgarishi bilan qalin qatlamli rezistorlarning qarshilik qiymati o'zgarishsiz qoladi.

Demak namuna 10 daqiqa davomida  $850^\circ C$  da pishirilsa, 15%  $RuO_2$  bo'lgan qalin qatlamli rezistorlar haroratga eng kam sezgir rezistor bo'ladi. Rezistor pastalarining  $RuO_2$  konsentratsiyasini o'zgartirish orqali haroratga sezgirlikni keng diapazonda o'zgartirish mumkin, ammo TCR ni 0 ga yaqin qilish qiyin.

**Xulosa.** Har xil  $RuO_2$  konsentratsiyasidan tayyorlangan qalin qatlamli rezistorlar  $Al_2O_3$  tagligida har xil pishirish haroratlarda pishirildi. Qalin qatlamli rezistorning harorat xarakteristikalari, o'lchov omili va qatlam qarshiligi o'rganildi. Ushbu tadqiqotning asosiy natijalari quyidagicha umumlashtiriladi:

- TCR ning qiymati  $RuO_2$  konsentratsiyasini va pishirish haroratini o'zgartirish orqali boshqarilishi mumkin. TCRning qiymati  $RuO_2$  konsentratsiyasi va pishirish haroratining oshishi bilan ortadi. Xuddi shu taglik va bir xil rezistorlar seriyasini ko'rib chiqayotganda, TCR oxir-oqibat qalin qatlamli rezistorlarning qatlam qarshiligiga bog'liq ekanligi aniqlandi

- Turli qatlam qarshiligiga ega qalin qatlamli rezistorlarni tanlash orqali qarshilik harorati egri chizig'ining eng past nuqtasini ( $T_{min}$ ) sozlash mumkin. Shunday qilib, turli xil muhit haroratlari uchun past haroratlarni sezmaydigan tenzodatchiklarga erishish mumkin.

## ADABIYOTLAR

1. S.A.A. Jabir, N.K. Gupta, Condition monitoring of the strength and stability of civil structures using thick film ceramic sensors, *Measurement*.46 (7) (2013) 2223-2231.
2. X. Guan, M. Wen, H. Li, J. Ou, Strain sensor made by thick-film resistors on substrates of glass ceramic, in: 11th IWSHM2017: Real-Time Material State Awareness and Data-Driven Safety Assurance, Vol. 2, DEStech Publications, Stanford, CA, United states, 2017, pp. 1961-1968.
3. Z. Zhou, J. Ou, Techniques of temperature compensation for FBG strain sensors used in long-term structural monitoring, in: *Fundamental Problems of Optoelectronics and Microelectronics II*, Vol. 5851, SPIE, 2005, pp.
4. V. Sundararaman, V.T. Rathod, D.R. Mahapatra, Temperature compensation in CNT-composite distributed strain sensors, in: *SPIE Smart Structures and Materials Nondestructive Evaluation and Health Monitoring*, Vol. 9436, SPIE, 2015, pp. 7.
5. X. Dong, X. Yang, C.-L. Zhao, L. Ding, P. Shum, N.Q. Ngo, A novel temperature-insensitive fiber Bragg grating sensor for displacement measurement, *Smart Materials and Structures*.14 (2) (2005) N7-N10.
6. M. Song, B. Lee, S.B. Lee, S.S. Choi, Interferometric temperature-insensitive strain measurement with different-diameter fiber Bragg gratings, *Opt. Lett.*22 (11) (1997) 790-792.
7. V. Bhatia, D.K. Campbell, D. Sherr, T. D'Alberto, N. Zabaronick, G.A.T. Eyck, K.A. Murphy, R.O. Claus, Temperature-insensitive and strain-insensitive long-period grating sensors for smart structures, *Optical Engineering*.36 (7) (1997) 1872-1876, 1875
8. Y.L. Zheng, J. Atkinson, R. Sion, Z.G. Zhang, A study of some production parameter effects on the resistancetemperature characteristics of thick film strain gauges, *J Phys D Appl Phys*.35 (11) (2002) 1282-1289.
9. M. Hrovat, A. Bencan, D. Belavic, J. Holc, G. Drazic, The influence of firing temperature on the electrical and microstructural characteristics of thick-film resistors for strain gauge applications, *Sensor Actuat a-Phys*.103
10. K. Adachi, H. Kuno, Effect of glass composition on the electrical properties of thick-film resistors, *Journal of the American Ceramic Society*.83 (10) (2000) 2441-2448.
11. L. Joon, R. Vest, Firing Studies With a Model Thick Film Resistor System, *IEEE Transactions on Components, Hybrids, and Manufacturing Technology*.6 (4) (1983) 430-435.
12. H. Tian, H.-t. Liu, H.-f. Cheng, Microstructural and electrical properties of thick film resistors on oxide/oxide ceramic-matrix composites, *Ceramics International*.41 (2) (2015) 3214-3219.
13. G.E. Pike, C.H. Seager, Electrical properties and conduction mechanisms of Ru-based thick-film (cermet) resistors, *Journal of Applied Physics*.48 (12) (1977) 5152-5169.
14. N.F. Mott, Conduction in glasses containing transition metal ions, *Journal of Non-Crystalline Solids*.1 (1) (1968) 1-17.
15. R.M. Scarisbrick, Electrically conducting mixtures, *Journal of Physics D: Applied Physics*.6 (17) (1973) 2098.
16. A. Cattaneo, M. Cocito, F. Forlani, M. Prudenziati, Influence of the Metal Migration From Screen-and-Fired Terminations on the Electrical Characteristics of Thick-Film Resistors, *ElectroComponent Science and Technology*.4 (3-4) (1977) 205-211.
17. J. Shah, Strain Sensivity of Thick-Film Resistors, *IEEE Transactions on Components, Hybrids, and Manufacturing Technology*.3 (4) (1980) 554-564.



Avazbek DEXQONOV,  
O'zMU Fizika fakulteti tayanch doktoranti  
E-mail: dexqonovavazbek1993@gmail.com  
Gulmurza ABDURAXMONOV,  
O'zMU Fizika fakulteti professori

Fizika-matematika fanlari doktori, professor B.Umirzakov taqrizi asosida

PHYSICAL PARAMETERS OF SILICATE GLASS DIFFUSED WITH RuO<sub>2</sub>  
Anotation

This article discusses the diffusion processes, diffusion zones, percolation theory, activation energies, and their analysis based on the results of diffusing metal oxides, primarily RuO<sub>2</sub>, into lead silicate glass under various conditions. The doping of silicate glass significantly alters all its physical parameters. The obtained results can lead to important innovations in the development of thick-film resistors, various strain sensors, and cost-effective thermoelectric materials. The physics of this process has been extensively explored in this study.

**Key words:** diffusion zone, lead-silicate glass, ruthenium dioxide, specific resistance, percolation theory, nanocrystals, structural transitions, infinite cluster.

ФИЗИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ СИЛИКАТНОГО СТЕКЛА, ДИФФУЗИРОВАННОГО С RuO<sub>2</sub>  
Аннотация

В данной статье рассматриваются процессы диффузии, диффузионные зоны, теория перколяции, энергии активации и их анализ на основе результатов диффузии оксидов металлов, главным образом RuO<sub>2</sub>, в свинцово-силикатное стекло при различных условиях. Легирование силикатного стекла приводит к значительным изменениям всех его физических параметров. Полученные результаты могут открыть новые перспективы в разработке толстопленочных резисторов, различных тензодатчиков и доступных термоэлектрических материалов. Физика этого процесса детально исследована в рамках данной работы.

**Ключевые слова:** зона диффузии, свинцово-силикатное стекло, диоксид рутения, удельное сопротивление, термоЭДС, теория перколяции, нанокристаллы, структурные переходы, бесконечный кластер.

RuO<sub>2</sub> BILAN DIFFUZIYALANGAN SILIKAT SHISHANING FIZIK PARAMETRLARI  
Annotatsiya

Ushbu maqolada qo'rg'oshin silikat shishaga metal oksidlari asosan RuO<sub>2</sub> bilan turli sharoitlarda diffuziyalash natijalari asosida uning diffuziya jarayonlari, diffuziya zonalarini, sizib o'tish nazariyasi, aktivatsiya energiyalari hamda uning tahlillari haqida so'z boradi. Silikat shisha legirlash natijasida uning barcha fizik parametrlari tubdan o'zgaradi. Olingan natijalar orqali qalin qatlamli rezistorlar, turli tenzo datchiklar, arzon termoelektrik materiallar olishda muhim yangi natijalar olish mumkin. Bu jarayon fizikasi keng miqyosda ochib berishga harakat qilingan.

**Kalit so'zlar:** diffuziya zonasi, qo'rg'oshin-silikat shisha, ruteniy dioksidi, solishtirma qarshilik, termoEYuK, sizib o'tish nazariyasi, nanokristallar, struktura o'tishlari, cheksiz klaster.

**Kirish.** Legirlashgan shishaning elektr o'tkazuvchanligini ta'minlashda legirovchi metall atomlarining to'g'ridan-to'g'ri ishtirok etishiga qarshi asosiy dalil sifatida bu metallarni qo'rg'oshin-silikat shishasida past eruvchanlikka ega ekanligi ko'rsatiladi. Misol sifatida, [1] ishida EXAFS usuli va rentgen diffraksiyasi yordamida o'tkazilgan tadqiqotlarni batafsil ko'rib chiqamiz. Ushbu tadqiqotlarda dastlab RuO<sub>2</sub> qisman shishada erishi, ammo keyinchalik sovetlash jarayonida klasterlar shaklida cho'kib qolishi aniqlangan. Ushbu klasterlarning o'lchami 20-30 Å deb baholangan va RuO<sub>2</sub> kukuni yuzasining mayda zarraligi kamaygan sari ularning o'lchami oshgan. Kuzatilgan elektr xususiyatlari (masalan, donadorlararo elektronlarning o'tishi orqali o'tkazuvchanlikni ta'minlovchi cheksiz klasterlar hosil bo'lishi) ushbu klasterlarning hosil bo'lishi bilan izohlanadi. Bunda Adachi [2] ishi asosida RuO<sub>2</sub> va shisha o'zaro ta'sirining asosiy mexanizmi diffuziya emas, balki erish jarayoni ekani ta'kidlanadi.

Biroq, yanada chuqurroq tahlil shuni ko'rsatadiki, 20-30 Å o'lchamdagi tuzilmalar erigan ruteniy atomlaridan hosil bo'lib sovetlash jarayonida cho'kib qolgan klasterlar emas, balki legirlashda ishlatilgan dastlabki RuO<sub>2</sub> zarrachalarining o'zida mavjud (yoki yuzaga kelgan) bo'lishi ehtimoli katta. Bunga ikki sabab bor:

1. Rentgen diffraksiyasi ushbu o'lchamdagi kogerent tarqalish sohalarini aniqlashi mumkin, ammo bu sohalarning qanday atomlardan iborat ekanligini aniqlay olmaydi.

2. EXAFS usuli esa bunday sohalarning mavjudligini aniqlashi va qaysi atomlar atrofida hosil bo'layotganini aniqlashi mumkin. Xususan, Meneghini va boshqalarning [1] keltirilgan ishida EXAFS spektrlari aynan ruteniy atomlariga nisbatan olingan. Ammo shishada ruteniyning past eruvchanligi ikki xil rol o'ynagan:

Natijada, EXAFS spektrlarida asosan dastlabki holatini saqlab qolgan RuO<sub>2</sub> aks etadi. Klasterlar esa ushbu spektrlarda (taxminan 1% yoki undan kamroq amplitudada, ruteniyning shishadagi eruvchanligidan kelib chiqib) sezilarli o'zgarishlarga olib kelishi mumkin. Afsuski, bunday o'zgarishlarni usulning mavjud aniqligi bilan izohlashning imkoni yo'q. Ushbu holatda yuqorida ta'kidlangan klasterlarni RuO<sub>2</sub> kukun zarrachalarining polikristalli tuzilishi natijasi sifatida ko'rish mumkin [3].

Faraz qilaylik [4], [5], shisha elektr o'tkazuvchanligi legirlash jarayonida ligatura atomlarining shishaga diffuziyasi tufayli oshadi. Ligaturaning har bir zarrachasi atrofida diffuziya zonasi hosil bo'ladi, va cheksiz klaster endi ligatura zarrachalaridan emas, balki diffuziya zonalaridan iborat bo'ladi. Elektron mikroskopik tadqiqotlar shuni ko'rsatadiki, maydalash jarayonida ligatura zarrachalari radiusi - r ga yaqin sferik shaklni qabul qiladi. Shishaning o'zi izotrop muhitdir. Shuning uchun diffuziya jarayoni ham izotrop bo'ladi va diffuziya zonasi sferik bo'ladi (1 va 2-rasmlar). Ushbu zonasining hajmi

$$V_d = \frac{4\pi}{3}(l_d + r)^3 \quad (1)$$

eng oddiy holatda, T<sub>r</sub> haroratda, vaqt davomida τ, ligatura atomlari masofaga diffuziya qiladi



$$l_d = \sqrt{D\tau} = \sqrt{D_0\tau} \exp\left(-\frac{E_a}{2kT_f}\right) \quad (2)$$

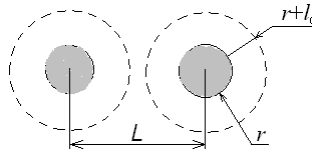
$E_a$  – diffuziya jarayonining aktivatsiya energiyasi,  $D_0 = D(T_f \rightarrow \infty)$ ,  $k$  – Bolsman doimiysi. Chunki  $C = V_d / V_0$  va  $C_c = V_c / V_0$ , oqish nazariyasining [6-9] asosiy tenglamasini elektr o'tkazuvchanlik uchun quyidagicha yozish mumkin:

$$\sigma(V) = V_0^{-t} \sigma_0 (V - V_c)^t \quad (3)$$

bu yerda ( $V_c$ ) – diffuziya zonasining kritik hajmi, ( $V_p$ ) – ligaturaning har bir zarrachasiga to'g'ri keladigan namunaviy hajm. (1) va (2) ni (3) ga qo'yib, oddiy algebraik o'zgartirishlardan so'ng quyidagiga ega bo'lamiz:

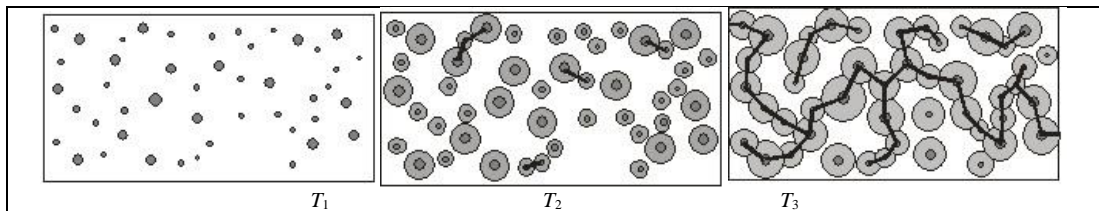
$$\ln \left\{ l_{d0} / \left( \sqrt[3]{\frac{3V_0}{4\pi} ((\rho / \rho_0)^{-1/t} + \frac{V_c}{V_0}) - r} \right) \right\} = \frac{E_a}{2kT} \quad (4)$$

Bu yerda  $l_{d0} = \sqrt{D_0\tau}$ ,  $\rho_0 = 1 / \sigma_0$  – butun hajm legirlangan shisha (diffuziya zonasi) bilan to'ldirilgan holatda namunaviy solishtirma qarshilikni anglatadi, va moslashtirish parametri rolini bajaradi.



1-rasm. Ligatura zarrachalari va diffuziya zonasi modeli (sxematik tarzda). Ligatura zarrachalari o'rtacha  $r$ -radiusga ega, diffuziya zonasi esa  $r + l_d$ .

2-



Diffuziya natijasida legirlangann shishada oqish darajalarining hosil bo'lishi ( $T_1 > T_2 > T_3$ ),  $\tau = const$ .

Ifoda (4) bizga diffuziya jarayonining aktivatsiya energiyasi  $E_a$  ni va diffuziya uzunligini  $l_d$  legirlash vaqti o'zgarmas bo'lganda,  $T_f$  haroratiga bog'liq holda aniqlash imkonini beradi.

Bundan tashqari, (4) ifodasi [10] turli xil shisha turlari, ligaturalar va legirlash rejimlari, shuningdek, kukunlarning dispersivligi uchun oqish chegarasi  $R(C)$  qanday va qanchalik o'zgarishi mumkinligini tushuntiradi. Darhaqiqat:

1) Shisha tarkibi va tuzilmasining o'zgarishi, shuningdek, ligatura turi bir xil legirlash rejimida diffuziya koeffitsienti  $D(T_f) = D_0 \exp(-E_a / kT_f)$  va diffuziya uzunligini  $l_d = \sqrt{D\tau} = \sqrt{D_0\tau} \exp(-E_a / 2kT_f)$  o'zgartiradi, bu esa shishaga nisbatan yuqori elektr o'tkazuvchanlikka ega diffuziya zonasining hajmiy ulushining o'zgarishiga olib keladi.

2) Ligatura kukuni qancha mayda bo'lsa, legirlangan shisha hajm birligidagi uning zarrachalari soni shuncha ko'p bo'ladi va ular orasidagi o'rtacha masofa shunchalik kichik bo'ladi. Shu sababli, bu masofani ligaturaning diffuziya qiluvchi atomlari bilan qoplash va diffuziya zonalaridan cheksiz klaster hosil qilish uchun boshqa barcha sharoitlar bir xil bo'lganda, kamroq diffuziya vaqti talab etiladi.

1-jadval. Qo'rg'oshin-silikat shishalarida ligatura atomlari uchun diffuziya koeffitsientlari va aktivatsiya energiyalari, shuningdek, diffuziya uzunliklari [4]-[10].

Legirlangan shisha namunasi	Shisha	Legirlangan shisha tarkibi, mass. %		Ligatura	$E_a$ , eV	$D_0$ , $\text{cm}^2/\text{s}$	$l_d$ , $\text{cm}$ , $T_f=1123 \text{ K}$ da
		shisha	ligatura				
1	B-17M1	80	20	PbRuO <sub>3</sub>	1.08	$5.65 \cdot 10^{-8}$	$2.2 \cdot 10^{-5}$
2	B-17M1	90	10	RuO <sub>2</sub>	0.624	$9.48 \cdot 10^{-6}$	$3.0 \cdot 10^{-3}$
3	B-17M2	90	10	RuO <sub>2</sub>	0.194	$5.74 \cdot 10^{-4}$	0.125
4	B-17M2	80	20	RuO <sub>2</sub>	0.212	$4.1 \cdot 10^{-4}$	0.166

**Natijalar.** Endi legirlash darajasi va legirlash vaqti, ligatura zarralarining o'lchamlari legirlashgan shisha namunasi elektr o'tkazuvchanligiga qanday ta'sir qilishini ko'rib chiqamiz [11]. Ligatura atomlarining shishada diffuziyasi, diffuziya zonasi hajmiga teng bo'lgan zarrachalardan sodir bo'ladi va tashqi manbadan diffuziant oqimi yo'q. Shuning uchun diffuziya jarayonini cheklangan manbadan sodir bo'layotgan deb hisoblash mumkin [12], va Fik tenglamasidan foydalanish mumkin:

$$\frac{\partial N(x, \tau)}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 N(x, \tau)}{\partial x^2} \quad (5)$$

Diffuziya profili quyidagi funksiya bilan tavsiflanadi

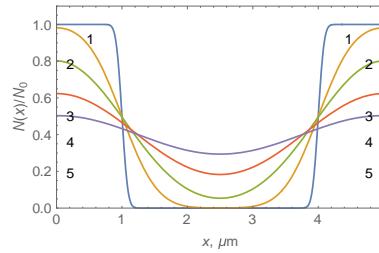
$$N(x, \tau) = \frac{N_0}{2} \left\{ \text{erfc} \frac{x-r}{2\sqrt{D\tau}} - \text{erfc} \frac{x+r}{2\sqrt{D\tau}} \right\} \quad (6)$$

Bu yerda  $N_0$  – ligatur atomlarining donadagi konsentratsiyasi,  $r$  – ligatur donasining radiusi,  $\text{erfc}(x, \tau)$  – xatolik funksiyasining qo'shimcha qismi,  $\tau$  – legirlash jarayonining davomiyligi. Diffuziya jarayoni uchun eng xususiy va eksperimental tekshiruv uchun qulay bo'lgan narsa diffuziya uzunligining vaqtga bog'liqligi hisoblanadi.

Diffuziya haroratiga bog'liq qarshilikka bog'liqlik uchun (yuqorida qarang, (4) ifodasi) qilinganidek, legirlashgan shishaning diffuziya jarayonining davomiyligiga bog'liq qarshilik  $R(\tau)$  uchun quyidagi ifodani olamiz:

$$(R/R_0)^{-1/t} = \frac{4\pi}{3V_0} (\sqrt{D\tau} + r)^3 - C_c \quad (7)$$

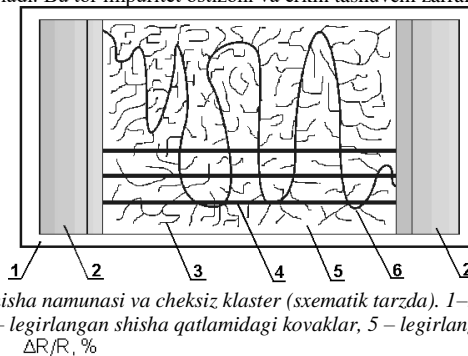
Legirlashgan shisha holatida, L masofasi bilan ajralgan qo'shni ligatur zarrachalari diffuziya jarayonining ikki cheklangan manbai sifatida ko'rib chiqilishi mumkin, ularning diffuziya oqimlari bir-biriga qarshi yo'nalgan. Shunday qilib, ligatur konsentratsiyasining ularning orasidagi taqsimlanishi vaqtning turli paytlarida, ligatur zarrachalarining ikki diametri va uning doimiy hajm kontenti uchun 5.5-rasmda ko'rsatilgan shaklga ega bo'ladi.



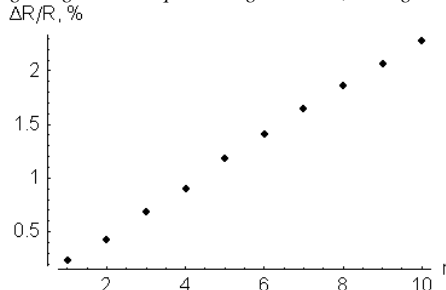
3-rasm. Ligatura atomlari konsentratsiya profili ikki ligatura zarrachasi orasida vaqtning quyidagi momentlarida:  $\sqrt{D\tau_1} = 0,05$ ;  $\sqrt{D\tau_2} = 0,3$ ;  $\sqrt{D\tau_3} = 0,55$ ;  $\sqrt{D\tau_4} = 0,8$ ;  $\sqrt{D\tau_5} = 1,05$ .

Ligatura zarrachalari radiusi (mkm): 0,5 (a); 1 (b). Zarrachalar markazlari orasidagi masofa – 5 mkm.

**Muhokama.** Diffuziya natijasida hosil bo'lgan diffuziya zonasi legirlashgan shisha namunasining barcha qismiga teng taqsimlanadi. Elektr o'tkazuvchanlik, shu diffuziya zonasida joylashgan turli zaryadli ligatura ionlari o'rtasidagi elektron almashinuvi orqali amalga oshiriladi, ya'ni tashuvchi zarralarning o'zining impuritet ostizona ichidagi harakati orqali. Shunday qilib, aynan ushbu impuritet ostizonaning eni  $m^*$  tashuvchi zarralarning samarali massasini belgilaydi: zona qanchalik tor bo'lsa,  $m^*$  shuncha katta bo'ladi [13]. Legirlashgan shisha holatida, ligaturaning shishadagi eruvchanligi yoki diffuziya legirlash darajasi past bo'lganda (taxminan 7% yoki kamroq, yuqoriga qarang), ligaturaning qo'shni atomlari orasidagi o'rtacha masofa o'zining shisha atomlari orasidagi masofaga nisbatan katta bo'lib, ligatur qo'shni atomlarining to'liq funksiyalarining qoplam integrali kichik bo'ladi. Bu tor impuritet ostizoni va erkin tashuvchi zarralarning katta samarali massasiga olib keladi.



4-rasm. Kontaktlarga ega legirlangan shisha namunasi va cheksiz klaster (sxematik tarzda). 1 – taglik (96%  $Al_2O_3$ ), 2 – kontaktlar (kumush-vismut), 3 – o'lik uchlar, 4 – legirlangan shisha qatlamidagi kovaklar, 5 – legirlangan shisha, 6 – cheksiz klaster.



5-rasm. Legirlangan shisha namunasining qarshiligi kesilgan kovaklar soniga bog'liqligi.

Bizning nazarimizcha, ushbu maksimumning paydo bo'lishini ligatur zarrachalari orasidagi o'rtacha masofaning (sakrash yoki tunel qilish uzunliklari) o'zgarishi bilan izohlash mumkin emas, chunki alyuminiy oksidi asosining issiqlik kengayish koeffitsienti  $8,4 \times 10^{-6} K^{-1}$  C71-K shishasining esa  $7 \times 10^{-6} K^{-1}$  ga teng. Bu 700 K (o'tkazuvchanlikning pasayishi boshlanishi) dan 1000 K gacha bo'lgan harorat o'zgarishi bilan yuqorida aytilgan masofaning  $8,4 \times 10^{-6} \times 300 = 2,5 \times 10^{-3} = 0,25\%$ ga o'zgarishiga olib keladi. Bu yerda biz atrofdagi atomlar orasidagi masofaning o'zgarishi asosining issiqlik kengayishi natijasida yuz berishini qabul qildik, chunki plenka qalinligi asos qalinligidan deyarli 20 barobar kam, va oxirgisining Yung moduli qatlam modulidan sezilarli darajada yuqoriroq. Shu bilan birga, tunel qilish (sakrash) ehtimoli va namunani o'tkazuvchanligi  $e^{-0,0025} = 1,0025$  martaga o'zgaradi, bu eksperimentda kuzatilganidan deyarli 4 tartib kichikroq. Bunday farq yana bir bor ko'rsatadiki, legirlashgan shishaning o'tkazuvchanligi ligatura zarrachalaridan iborat uzluksiz zanjirlar (cheksiz klaster) hosil bo'lishidan ko'ra, boshqa omillar (xususan, shishaning diffuziya legirlashishi natijasida o'tkazuvchi bo'lishi) bilan bog'liq.

**Xulosa.** Shisha va ligatur kukunlari aralashmasining legirlash paytida ligatura atomlarining shishada diffuziyasi sodir bo'ladi. Shishada hosil bo'lgan diffuziya zonalari, shishaga nisbatan yuqori (shishaga nisbatan) o'tkazuvchanlik va ligaturaga nisbatan katta hajmga ega bo'lib, diffuziya mavjud bo'lmagan holatga nisbatan kamroq ligatura tarkibida cheksiz klasterni hosil qilishi mumkin. Ligatura atomlarining diffuziya uzunligi va shu bilan birga diffuziya zonasi hajmi harorat va diffuziya davomiyligi oshishi bilan o'sadi, shuningdek, shisha va ligatura tarkibiga bog'liq bo'ladi.

1. O'tkazuvchanlik sohasining (legirlangan sohaslar) hajmini harorat, davomiylik va legirlash darajasi, shuningdek, ligatura zarrachalarining o'lchamlari bilan bog'laydigan ifodalar olinib, legirlashgan shishaning o'ziga xos qarshiligini o'lchash orqali diffuziya jarayonining parametrlarini (diffuziya koeffitsienti, faollashish energiyasi va diffuziya uzunligi) aniqlash mumkin bo'ldi. Natijada, o'tkazilish egrisining nazariy qiymatiga nisbatan legirlash darajasi (ligatura tarkibi) pastroq darajaga siljiydi.

2. Muayyan sharoitlarda diffuziya zonasi namunani butun hajmiga egallashi mumkin, va bu holda o'tkazilish darajalari va cheksiz klaster haqida gapirish ma'nosiz bo'ladi, balki legirlashgan shishani yuqori o'tkazuvchanlikka ega yangi material sifatida ko'rib chiqish kerak. Aynan ligatura atomlarining diffuziyasi o'tkazilish egrisining legatura tarkibini kamaytirishga yoki ushbu egri yo'qligiga olib kelishini, shishaning va ligaturaning tarkibi, legirlash davomiyligi va harorati parametrlariga ta'sirini tushuntiradi; bu legirlashgan shishadan nominal aniqlik va bo'linish koeffitsienti  $\pm 0,01$  % dan yaxshiroq rezistorlar va kuchlanish bo'luvchilarini ishlab chiqishga imkon beradi.

#### ADABIYOTLAR

1. Aburakhmanov G., Amanov Sh. High voltage ceramic isolators with resistive layer for potential linearizing// Proceedings 7- ISAM, September 2001. – Islamabad (Pakistan), 2001. -pp. 84-89.
2. Абдурахманов Г., Абдурахманова Н.Г., Вахидова Г.С. О состоянии частиц двуокиси рутения в толстоленочных резисторах // Фундаментальные и прикладные вопросы физики: Материалы международной конференции. - Ташкент, 2006. - С. 331-335.
3. Абдурахманов Г. Влияние диффузии на порог протекания в толстоленочных резисторах // Uzbek Journal of Physics. – Tashkent, 2009. – vol. 11, N 3. - pp. 207-211.
4. Абдурахманов Г., Вахидова Г. С. Диффузия и электропроводность в толстоленочных резисторах // ДАН РУз - Ташкент, 1995. - №1. – С. 19-21.
5. Абдурахманов Г., Вахидова Г. С. Диффузия и электропроводность в толстоленочных резисторах // ЖТФ. – С.-Петербург, 1995. - Т. 65, в.7. – С. 187-190.
6. Займан Дж. Модели беспорядка. Пер. с англ. – М.: Мир, 1982. – 592 с.
7. Бонч-Бруевич В. Л., Звягин И. П., Кайпер Р., Миронов А. Г., Эндерлайн Р., Эсер Б.-М. Электронная теория неупорядоченных полупроводников / Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича - М.: Наука, 1981. – 384 с.
8. Шкловский Б.И., Эфрос А.А. Электронные свойства легированных полупроводников. – М.: Наука, 1979. – 416 с.
9. Мотт Н., Дэвис Э., Электронные процессы в некристаллических веществах. В 2-х т. Пер. с англ. – М.: Мир, 1982. – 664 с.
10. Abdurakhmanov G., Vakhidova G. Diffusion of RuO<sub>2</sub> and PbRuO<sub>3</sub> into Lead Silicate Glasses // MRS Fall Meeting, Boston, USA, 27 November - 1 December 1995.
11. [11]. Донован Р. П., Смит А. М., Бэрри Б. М. Окисление, диффузия, эпитаксия / Под ред. Бургера Р. и Донована Р. Пер. с англ. – М.: Мир, 1969. – 451 с.
12. Lee J., West R.W. Firing studies with model thick film resistor systems // IEEE Trans. Comp. Hybrids and Manufact. Technol. – Urbana (IL, USA), 1983. – vol. CHMT-6, N 4. - pp. 430-435.
13. Фельц А. Аморфные и стеклообразные неорганические твердые тела. Пер. с нем. - М.: Мир, 1986. – 558 с.



UDK: 546.28 + 546.89 + 669.018 + 539.2

**Xalmurat ILIYEV**,  
Toshkent davlat texnika universiteti professori, fizika-matematika fanlari doktori  
**Mamasobir TURSUNOV**,  
Termiz davlat universiteti dotsent v.b., fizika-matematika fanlari falsafa doktori  
**Shaxvoz QARSHIYEV**,  
Termiz davlat universiteti tayanch doktoranti  
E-mail: mtursunov@tersu.uz

PhD, dotsent O.Musayev taqrizi asosida

## BINARY NICKEL AND SELENIUM ALLOYED TO SILICON INTERACTION OF COMPLEXES

Аннотация

The research results of silicon doped with Ni and Se atoms are presented. Incorporation of nickel was sputtered onto the silicon surface followed by a "low temperature" diffusion method at  $T=1150^{\circ}\text{C}$  for 0.5 hours. Additional thermal treatment of samples doped with Ni and Se was carried out in the same way ( $T = 820^{\circ}\text{C}$ , for 0.5 hours). The composition of the samples was studied using SEM (Scanning Electron Microscope). The change in properties of Si<Ni, Se> was explained by the formation of binary complexes of nickel and selenium input atoms in the crystal lattice of silicon.

**Key words:** binary complex, nickel, selenium, forward voltage, short circuit current.

## БИНАРНЫЙ НИКЕЛЬ И СЕЛЕН, ЛЕГИРОВАННЫЙ С КРЕМНИЕМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КОМПЛЕКСОВ

Аннотация

Представлены результаты исследования кремния, легированного атомами Ni и Se. Введение никеля напыляли на поверхность кремния с последующим методом «низкотемпературной» диффузии при  $T=1150^{\circ}\text{C}$  в течение 0,5 часов. Дополнительную термическую обработку образцов, легированных Ni и Se, проводили аналогично ( $T = 820^{\circ}\text{C}$ , в течение 0,5 часа). Состав образцов изучали с помощью СЭМ (сканирующего электронного микроскопа). Изменение свойств Si<Ni,Se> объяснили образованием бинарных комплексов входных атомов никеля и селена в кристаллической решетке кремния.

**Ключевые слова:** бинарный комплекс, никель, селен, прямое напряжение, ток короткого замыкания.

## KREMNIYGA LEGIRLANGAN NIKEL VA SELEN BINAR KOMPLEKSLARNING O'ZARO TA'SIRLASHUVI

Анотация

Ni va Se atomlari bilan legirlangan kremniyni taqqiqot natijalari keltirilgan. Nikelning kiritilishi kremniy yuzasiga changlatib olinadi va undan so'ng  $T=1150^{\circ}\text{C}$  da 0,5 soat davomida "past haroratli" diffuziya usulida amalga oshirildi. Ni va Se legirlangan namunalarga qo'shimcha termik ishlov berish xuddi shunday amalga oshirildi ( $T = 820^{\circ}\text{C}$ , 0,5 soat davomida). Namunalarning tarkibi SEM (Skannerlovchi elektron mikroskop) yordamida o'rganildi. Si<Ni, Se> xossalarning o'zgarishi kremniyning kristall panjarasida Nikel va selen kirishma atomlarining binar komplekslarning hosil bo'lishi bilan izohlandi.

**Kalit so'zlar:** binar kompleks, nikel, selen, salt yurish kuchlanishi, qisqa tutashuv toki.

Hozirgi kunda kremniy zamonaviy elektronika uchun asosiy material bo'lib kelmoqda. Kremniy panjarasiga turli elementlarning kirishma atomlarini o'z ichiga olgan elektroneytral molekula yoki kompleksli obyektlarning kiritilishi yangi effektlarni aniqlashga olib keladi [1-3]. Ushbu maqolada Ni va Se atomlari bilan qo'shilgan kremniyga asoslangan quyosh elementlari tadqiqotlari natijalari keltirilgan. Bizga ma'lumki, kremniydagi termik va radiatsion defektlar asosan optik aktiv kislorod konsentratsiyasi orqali aniqlanadi. Chunki bunday kislorod konsentratsiyasini boshqarish katta texnologik imkoniyat yaratadi. nikel va kislorod segregatsiya jarayonini tadqiq etish muhim hisoblanadi. Bunga sabab kremniyda nikel atomlari yetarli darajada yuqori eruvchanligi  $N \sim 10^{18} \text{ sm}^{-3}$  ga teng va ular elektroneytral holatda bo'ladi [4-6].

1-jadval.

Dastlabki namunalarning o'rtacha qiymat elektrik va optik parametrlari.

Dastlabki material	O'tkazuvchanlik tipi	$\rho$	$\mu$	p, n
KDB-0,5	p	0,5	329	$4 \cdot 10^{16}$
KEF-100	n	97	1340	$4,8 \cdot 10^{13}$

Dastlabki material sifatida Choxralskiy metodi bilan olingan, solishtirma qarshiligi p-tip  $\rho=0.5 \text{ Om}\cdot\text{sm}$ , va n-tip  $\rho=100 \text{ Om}\cdot\text{sm}$  bo'lgan monokristall kremniy foydalanildi. Bu namunalarda optik aktiv kislorod konsentratsiyasi  $N_{O_2}=(5\div 6) \cdot 10^{17} \text{ sm}^{-3}$  ni tashkil etadi. Namunaning o'lchami  $1 \times 4 \times 0,8 \text{ mm}^3$ .

Barcha namunalar bir xil sharoitda mexanik va kimyoviy ishlov berildi. Namunalarning elektrik parametrlari Xoll effekti yordamida aniqlandi. Namunalarning kontakt qismi kimyoviy gipofosfit rastvorli nikel bilan qo'plandi.

Nikel atomlarining diffuziyasi  $T=1150^{\circ}\text{C}$  da  $t=30$  minut davomida kvarts ampulalarda "past haroratli bosqichma-bosqich" diffuziya usulida amalga oshirildi. Keyin Se atomlarini diffuziyasi  $T=1200^{\circ}\text{C}$  da  $t=30$  daqiqa davomida amalga oshirildi. Natijada p-n ko'rinishdagi tuzilmalar, ya'ni fotoelementlar olindi. "NiSe" molekulasidagi nisbatan yuqori bog'lanish energiyasi va nikelning yuqori diffuziya koeffitsiyentini hisobga olgan holda, qo'shimcha termik ishlov berish harorati  $T = 820^{\circ}\text{C}$  da tanlandi. Qo'shimcha termik ishlov berishdan so'ng, fotoelementning (FE) salt yurish kuchlanishi ( $U_{\text{syu}}$ ) va qisqa tutashuv toki zichligi ( $J_{\text{qt}}$ ) o'lchandi. Si<B, Mn, Se> fotoelementlarida  $J_{\text{qt}}$  qiymati Si<B, Se> FE ga nisbatan 22% ga oshdi,  $U_{\text{syu}}$  qiymati esa 427 mV dan 480 mV ga, ya'ni 12 % ga ortdi (2-jadval). Termik ishlov berishdan so'ng FE larni parametrlarining Si<B,Se> oshishi selen atomlarini kremniydagi rekombinatsion kirishmalarni getterlash xususiyati bilan tushuntirildi [7-9]. Diffuziya jarayonidan so'ng selen atomlarining bunday xususiyatlari deyarli namoyon bo'lmaydi, chunki diffuziyadan keyin tez sovutish sababli elektrofaol bo'lishiga ulgurmaydi. Uzoq muddatli qo'shimcha termik ishlov berish komplekslar hosil bo'lish jarayonini faollashtiradi va bu nazoratsiz kirishmalar va nuqtali nuqsonlarning getterlanishiga olib keldi.

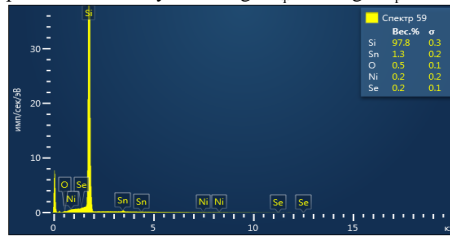
2-jadval.

Quyosh elementlarining  $T=820^{\circ}\text{C}$  haroratda qo'shimcha termik ishlov berishdan keyingi elektrofizik parametrlari

Namunalar	$J_{\text{qt}}, \text{mA}/\text{cm}^2$	$U_{\text{syu}}, \text{mV}$	$P_{\text{pik}}, \text{mW}/\text{cm}^2$
Si<B, Se>	18	427	7,7
Si<B, Ni, Se>	22	480	10,6
Si<B, Ni, Se> FE parametrlarini	+22%	+12 %	+37,4%

Si<B, Se> FE ga nisbatan o'zgarishi

Demak, Si<sub>2</sub>NiSe turdagi komplekslarni hosil bo'lishining texnologik optimal sharoitlari aniqlandi - selen va nikel kirishma atomlarining diffuziya harorati T=1160 °C, qo'shimcha termik ishlov berish (kompleks hosil bo'lish) harorati T=820 °C ni tashkil etdi. Diffuziya va qo'shimcha termik ishlov berishdan so'ng FE parametrlarini Usyu - 12% ga, J<sub>qt</sub> - 22% ga, P<sub>pik</sub> - 37,4% ga oshgani aniqlandi [10-12].



1-rasm. Diffuziyadan keyin kremniya hosil qilingan nikel va selen atomlari komplekslarining tarkibi (SEM).

O'tkazilgan tajribalardan keyin biz elektron mikroskop yordamida namunaning tarkibini aniqladik(1-rasm). Natijalar shuni ko'rsatdiki kremniya nikel va selen atomlari miqdori bir biriga teng ekan. Bu shundan dalolat beradiki kremniya nikel va selen atomlari birikib binar komplekslar hosil qilgan. Kremniyning salt yurish kuchlanishi U<sub>syu</sub> - 12% ga, qisqa tutashuv toki J<sub>qt</sub> - 22% ga, quvvati P<sub>pik</sub> - 37,4% ga oshganligi ham olingan natijalarni tasdiqlaydi.

3-jadval

Dastlabki namunalarning o'rtacha qiymat elektrik va optik parametrlari

Dastlabki namuna	O'tkazuvchanlik tipi	solishtirma qarshilik ρ	harakatchanlik μ,	Zaryad tashuvchilar konsentratsiyasi p, n	Optik aktiv kislorod konsentratsiyasi, N <sub>o</sub> <sup>opt</sup>
KDB-3	p	3,2	252	7,7·10 <sup>15</sup>	5,7·10 <sup>17</sup>
KEF-100	n	97	1340	4,8·10 <sup>13</sup>	5,7·10 <sup>17</sup>

Ni krishma atomlari va kislorodning o'zaro ta'siri.

Nikel diffuziyasidan so'ng kremniy namunalarida tugunlararo optik faol kislorod konsentratsiyasi 1106 sm<sup>-1</sup> (9 μm) mintaqasida Furey spektrometri bilan o'lchandi. (3-rasm).

Misol tariqasida, Ni diffuziyadan keyin optik faol kislorod konsentratsiyasi mavjud ma'lumotlar asosida hisoblab chiqildi [13-14]:

1) Nikel qo'shilgan namunalar uchun - KEF-100 asosida olingan Si<Ni>

$$N_o^{OIT} = 3.3 \cdot 10^{17} \cdot \frac{1}{d} \cdot \ln \frac{I}{I_0} = 1.8 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \quad (2)$$

2) Nazorat namunasi uchun - Si <nazorat namuna>

$$N_o^{OIT} = 3.3 \cdot 10^{17} \cdot \frac{1}{d} \cdot \ln \frac{I}{I_0} = 4.9 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \quad (3)$$

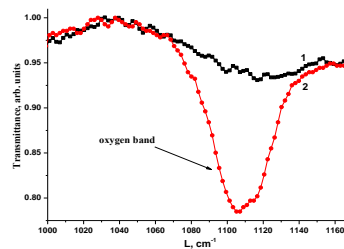
Misol tariqasida, Ni diffuziyadan keyin optik faol kislorod konsentratsiyasi mavjud ma'lumotlar asosida hisoblab chiqildi:

1) Nikel qo'shilgan namunalar uchun - KEF-100 asosida olingan Si<Ni>

$$N_o^{OIT} = 3.3 \cdot 10^{17} \cdot \frac{1}{d} \cdot \ln \frac{I}{I_0} = 1.8 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \quad (2)$$

2) Nazorat namunasi uchun - Si <nazorat namuna>

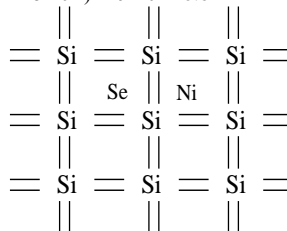
$$N_o^{OIT} = 3.3 \cdot 10^{17} \cdot \frac{1}{d} \cdot \ln \frac{I}{I_0} = 4.9 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \quad (3)$$



3-rasm. - Namuna o'tkazuvchanligining tushayotgan nurlanish to'liqin uzunligiga bog'liqligi (1 - nikel legirlangan namuna, 2 - nazorat namunasi).

3) Si <Ni> namunalarida kislorod konsentratsiyasining nazorat namunalariga nisbatan nisbiy o'zgarishi

$$(N_o^{opt}(\text{nazorat namuna}) - N_o^{opt}(\text{Ni})) / N_o^{opt}(\text{nazorat namuna}) = (4.9 \cdot 10^{17} - 1.8 \cdot 10^{17}) / 4.9 \cdot 10^{17} = 0.6$$



2-rasm. Kremniy panjarasida nikel va selen binar komplekslarining joylashish imkoniyatlari. Binar komplekslarning kremniy panjarasida tugunlararo joylashishi.

Shunday qilib, kremniy nikel bilan legirlangan namunaning optik faol kislorod konsentratsiyasi 60% ga kamayishiga olib keladi. Bu natija kremniy tugunlari orasida nikel va kislorod brikmalarining hosil bo'lganligidan dalolat beradi. Qolgan nikel atomlari esa selen atomlari bilan birikadi. Kremniy materialida kremniy panjarasida Si<sub>2</sub>NiSe tipidagi tetraedral binar komplekslarning ancha yuqori N ~ (3÷4)·10<sup>16</sup> sm<sup>-3</sup> konsentratsiyasi mavjud bo'lib, bu katta ilmiy va amaliy qiziqish uyg'otadi [15-17]. Bunday binar komplekslarning konsentratsiyasini oshirish

yo'llarini va bunday materiallarning xususiyatlarini o'rganish kelajakda qayta tiklanuvchi energiya manbalari va fotoelektrik qurilmalarni ishlab chiqish uchun kremniy asosidagi materiallarning yangi sinfini yaratishga imkon beradi.

#### ADABIYOTLAR

1. *M.K. Bakhadirxanov, Kh.M. Iliev, M.O. Tursunov, S.B. Isamov, S.V. Koveshnikov, M.Kh. Majitov.* Electrical Properties of Silicon Doped with Manganese via High-Temperature Diffusion // *Inorganic Materials*. 2021. Vol. 57, No. 7, pp. 655-662. <https://doi.org/10.1134/S0020168521070013>
2. *Bakhadyrkhanov, M.K., Isamov, S.B., Zikrillaev, N.F., Tursunov M.O.* Anomalous Photoelectric Phenomena in Silicon with Nanoclusters of Manganese Atoms // *Semiconductors*, 2021. Vol. 55, No. 6, pp. 542-545. <https://doi.org/10.1134/S1063782621060038>
3. *Ismailov K.A., Iliev X.M., Tursunov M.O., Ismaylov B.K.* Formation of complexes consisting of impurity Mn atoms and group VI elements in the crystal lattice of silicon. // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*. 2021, Vol. 24, No. 3, pp. 255-260. <https://doi.org/10.15407/spqeo24.03.255>
4. *Tursunov M.O., Iliev Kh.M., Ismaylov B.K.* High-temperature analysis of silicon properties with manganese-oxygen binary complexes // *Physical Sciences and Technology. Scopus Q4*. 2024, Vol. 11 (No. 1-2), Pp. 4-12. <https://doi.org/10.26577/phst2024v11i1a1>
5. *Iliev Kh.M., Tursunov M.O., Koveshnikov S.V., Khudaynazarov Z.B.* Research of properties of silicon with binary nanoclusters with participation of Mn and Se atoms // *Semiconductor Physics and Microelectronics*. 2020, Vol. 2, Issue 2, pp. 59-62.
6. *Илиев Х.М., Турсунов М.О., Исамов С.Б., Ковешников С.В.* Влияние легирования никелем и марганцем на концентрацию кислорода в кремнии // *Фан ва жамият – Nukus*, 2022. – S. 2. – № 4. – С. 7-10.
7. *Бахадирханов М.К., Илиев Х.М., Исамов С.Б., Тачилин С.А., Зикrillaев Н.Ф., Ибодуллаев Ш.Н., Турсунов М.О.* Особенности фотоэлектрических свойств кремния с нанокластерами атомов марганца в области  $\lambda=1,5...2,5$  мкм // *Приборы*. Россия, 2019, Т.231, Вып 10, С. 52-55.
8. *Iliev Kh.M., Tursunov M.O., Ismaylov K.A.* Interaction of manganese with O, S, Se and Te impurities // *Science and Education in Karakalpakstan – Nukus*, 2021. – Vol. 18. – № 3. – Pp. 9-13.
9. *Tursunov M. Iliev Kh. Abdiev U.B. Bobomuatov S.* Research of properties of silicon with binary complexes involving Mn and S atoms // *Norwegian Journal of development of the International Science*. 2023, June, №118. – Pp. 55-59.
10. *Tursunov M.* Formation of complexes of impurity atoms nickel and manganese in silicon // *German International Journal of Modern Science*. 2024, May, №. 80, – Pp. 55-58.
11. *Бахадирханов М.К., Илиев Х.М., Турсунов М.О. Каршиев Ш.Ж* Interaction of nickel atoms with group VI impurities in the silicon lattice // *Polish journal of science*. 2022. - № 52, - Pp. 52-54.
12. *Илиев Х.М., Турсунов М.О., Тачилин С.А.* Влияние легирования марганцем на концентрацию кислорода в кремнии. // VII Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии» ЛАПЛАЗ-2021. В.2. Ч.1., 23 – 26 марта 2021 г. – Москва. – С. 215-216.
13. *Илиев Х.М., Турсунов М.О., Ковешников С.В.* Новые функциональные материалы для фотоэнергетики на основе кремния // VI Всероссийская научно-практическая конференция «Энергетика и энергосбережение: теория и практика» 8-10 декабря 2021 г. – Кемерово. – С.221-225.
14. *Tursunov M. Iliev Kh. Abdiev U.B. Bobomuatov S.* Research of properties of silicon with binary complexes involving Mn and S atoms // *Norwegian Journal of development of the International Science*. 2023, June, Vol. 2, - №118. – Pp. 55-59.
15. *Турсунов М.О, Илиев Х.М., Хужаназаров У.М., Шопулатов Ш.Ш.* Взаимодействия марганца и кислорода в решетке кремния при высоких температурах // Международной научной конференция "Тенденции развития физики конденсированных сред" 30-31 октября 2023 г. – Фергана, С. 52-54.
16. *Х.М.Илиев, М.О.Турсунов, С.В.Ковешников, А.С.Аллаёров.* Энергии связи комплексов марганца с элементами VI группы в решетке кремния // VII Международная научно-практическая конференция «Энергетика и Энергосбережение: теория и практика» г. Кемерово, 7-9 декабря 2022. С. 227, 1-5.
17. *Турсунов М.О., Илиев Х.М., У.М.Хужаназаров, Ш.Ш.Шопулатов.* Фотоэлектрических свойств p-n перехода, сформированного теллуром совместно с марганцем в решетке кремния // VIII Международная научно-практическая конференция «Энергетика и энергосбережение: теория и практика» 6-8 декабря 2023 г. – Кемерово. – С. 2127-1-4.



UDK: 523.9:621.373.8:66011

Fayoziddin KAMOLIDDINOV,

O'z RFA U.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti kichik ilmiy xodimi

E-mail: [f\\_kamoliddinov@yahoo.com](mailto:f_kamoliddinov@yahoo.com)

Anvarjon SHERNIYOZOV,

O'z RFA U.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti katta ilmiy xodimi, PhD

Shermakhmat PAYZIYEV,

O'z RFA U.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti professori, f.-m.f.d

F.-m.f.d., professor v.b., A.Kasimov taqrizi asosida

### FAOL MUHIT YON SIRTIGA DAVRIY TRAPETSIIYA SHAKLINI BERISHNING QUYOSH LAZERLARI CHIQISH PARAMETRLARIGA TA'SIRI

Annotatsiya

Bu ishda biz quyosh bilan damlanadigan va sirti strukturalangan kristallardan tashkil topgan lazerlarni modellashtirish orqali o'rgandik. Bu ishda ishlatilgan simulyatsion modellar Monte-Karlo foton yo'lini kuzatish usulidan foydalanib tuzildi. Simulyatsion modelning ko'rsatishicha, sirtini strukturalash damlash samaradorligini 7% ga oshishiga olib kelar ekan. Bu o'sishning asosiy sabablaridan biri sirtini strukturalash natijasida lazer sistemasidagi nurlarning trayektoriyalari keskin o'zgarishi bo'lishi mumkin. Damlash quvvati 800 W da ko'rilganda, samaradorligining yaxshilanishi o'z navbatida lazer chiqish quvvatining absolut qiymati 20% ga yaxshilanishiga olib keldi. Tekis va strukturalangan sirtli kristalga ega lazerlarning chiqish quvvati mos ravishda 8.5 W va 10.5 W bo'lishi ko'rsatildi. Olingan ilmiy natijalar turli strukturalangan sirtli kristallardan foydalanib quyosh lazerlarini takomillashtirish yoki optimallashtirish mumkinligini ko'rsatdi.

**Kalit so'zlar:** Quyosh lazerlari, Monte-Karlo metodi, Frenel linzasi, Strukturalangan sirt.

### ВЛИЯНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ТРАПЕЦИЕВИДНОЙ ФОРМЫ ПОВЕРХНОСТИ АКТИВНОЙ СРЕДЫ НА ВЫХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ СОЛНЕЧНОГО ЛАЗЕРА

Аннотация

В этой работе были исследованы солнечные лазеры с поверхностно-структурированными лазерными средами через разработку симуляционной модели на основе метода трассировки фотонов Монте-Карло. Результаты показывают, что структурирование поверхности приводит к 7%-ному повышению эффективности накачки, вероятно, из-за значительных изменений в траекториях фотонов в лазерной системе. Эта повышенная эффективность привела к 20%-ному повышению выходной мощности лазера, достигнув 10,5 Вт при уровне накачки 800 Вт по сравнению с 8,5 Вт для лазеров с полированными поверхностями. Эти результаты указывают на потенциал оптимизации солнечных лазеров с использованием кристаллов со структурированными поверхностями.

**Ключевые слова:** Солнечные лазеры, метод Монте-Карло, линза Френеля, структурированная поверхность.

### IMPACT OF PERIODIC TRAPEZOIDAL SHAPING OF THE ACTIVE MEDIUM'S SURFACE ON SOLAR LASER OUTPUT PARAMETERS

Annotation

In this study, we investigated solar lasers with grooved lasing media by developing simulation models based on the Monte Carlo photon tracing method. The results demonstrate that surface structuring leads to a 7% increase in pumping efficiency, likely due to significant changes in photon trajectories within the laser system. This enhanced efficiency resulted in a 20% improvement in the laser's output power, reaching 10.5 W at an 800 W pumping level, compared to 8.5 W for lasers with polished surfaces. These findings indicate the potential for optimizing solar lasers using crystals with structured surfaces.

**Key words:** Solar lasers, Monte Carlo method, Fresnel lens, Structured surface.

**Kirish.** Oxirgi yillarda quyosh energiyasini to'g'ridan-to'g'ri lazer nuriga aylantirib foydalanishga qiziqish oshmoqda. Quyosh nurlari bilan ishlaydigan lazerlar bo'yicha dastlabki tadqiqotlar 1960-yillarning boshlariga to'g'ri keladi [1,2]. Quyosh lazer texnologiyasini odatiy energiya manbalari yetib bormagan joylarda, kosmosda va qayta tiklanuvchi energiya manbalarini olish jarayoni zanjirida ishlatish mumkin [3-5].

Shu kungacha quyosh energiyasini lazer nuriga aylantirishda erishilgan eng katta umumiy samaradorlik 4.64% ni tashkil etadi [6]. Bu ko'rsatkich quyosh lazerlarining amaliyotda qo'llanish uchun to'sqinlik qilmoqda va quyosh lazerlari samaradorligini oshirish ustidagi tadqiqotlar bir nechta yo'nalishda davom etmoqda. Jumladan, quyosh energiyasini faol muhitga samarali uzatish mexanizmlarini topish [7], ko'p sterjenli sxemalardan foydalanish [8, 9], ichki va tashqi sensiblizatorlardan foydalanish [10, 11]. Keyingi yillarda faol muhit sirtiga shakl berish orqali quyosh lazerning samaradorligini oshirishga qaratilgan ilmiy izlanishlar ham paydo bo'ldi [12]. Bu ishda strukturalangan sirtli faol muhitga ega quyosh lazerlari o'rganiladi.

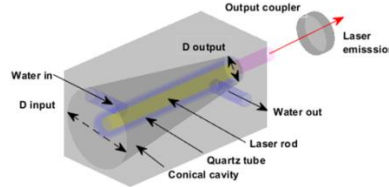
Dastlabki eksperimental ishda [12] quyosh lazerlarida strukturalangan sirtli Nd:YAG faol muhitlardan foydalanib, lazer samaradorligi va optik dastanang fizik sifatini yaxshilanish mumkinligi ko'rsatilgan. Keyinchalik [13], strukturalangan sirtli Nd:YAG faol muhitini ishlatish orqali ostona quvvatini pasaytirish mumkinligi va yuqori nishab (qiyalik) samaradorlik 4.98% olish mumkinligi eksperimental o'rganilgan. 2018-yilga kelib geliostat-parabolik oyna tizimida strukturalangan sirtli Nd:YAG faol muhiti bilan experimentlar o'tkazilgan [14]. Bunda chiqish quvvat 20.1W, nishab samaradorlik 5.04% ga erishilgan. Bu ko'rsatkich oldingi eng yaxshi natijani 1,31 baravar yaxshiladi. Yaqindagina [15], 2023-yil strukturalangan sirtli Ce:Nd:YAG/YAG faol muhiti bilan Frenel linzasi yordamida experimentlar o'tkazildi. Bunda lazer chiqish quvvati 26.93 W va nishab samaradorlik 6.3% bo'lgan.

Oxirgi ishda olingan nishab samaradorlik yakka kristalli quyosh lazerlari o'rtasida bugungi kungacha eng yaxshisi hisoblanadi va bu strukturalangan sirtli kristallar orqali quyosh lazerlarini takomillashtirish mumkinligiga ishora qiladi. Shu sababli, bu ishda quyosh lazeridagi faol muhit sirtini trapetsiya ko'rinishidagi shakllar orqali strukturalash (naqsh berish), lazerning chiqish parametrlariga qanday ta'sir qilishini modellashtirish orqali o'rganish maqsad qilingan.

**Tadqiqot metodologiyasi.** Eksperimental natijalarni tushunish va jarayonlarni to'liq tahlil qilib mexanizmlarini aniqlash uchun biz strukturalangan faol muhitli quyosh lazerlarini modellashtirishda ko'p qirralilikni ta'minlovchi Monte-Karlo foton yo'lini kuzatish (MKFYK) metodi orqali modellarni ishlab chiqdik. Bu metod optika sohasida ko'p ishlatiladigan nur yo'lini kuzatish usulining takomillashtirilgan varianti hisoblanadi [16]. U o'rganilayotgan obyektning barcha optik va fizik xususiyatlarini o'z ichiga oladi. Bir nechta jarayonlarda rivojlanishi mumkin bo'lgan optik jarayonlarga duch kelganda, Monte Karlo usuli aniq simulyatsiyani ta'minlash uchun jarayonni boshqaradi. Biz oldingi ilmiy

tadqiqotlarimizda MKFYK yordamida olingan natijalar haqiqiy eksperimentda kuzatilgan natijalar bilan deyarli ustam-ust tushushini va uning ishonchli ekanini ko'rsatganmiz [17], qisqalik uchun bu yerda batafsil to'xtalib o'tirmaymiz.

**Quyosh lazeri modeli tavsifi.** Quyosh lazeri tizimda dastlabki konsentrator sifatida Frenel linzalari ishlatilgan. U tejamkor, yengil va ixcham. Frenel linza yuzasining diametri  $1\text{ m}$ , yuzasi  $0.785\text{ m}^2$ . Ikkilamchi konsentrator sifatida kesik konus shaklidagi kamera (1-Rasm) tanlab olingan. Konus kamerasi Frenel linzaning fokusiga joylashtiriladi. U quyosh nurining lazer kristaliga yo'naltiradi va samarali yutilishga yordam beradi. Konus kamerasining uzunligi  $80\text{ mm}$ , kameraga kirish tuynukining diametri  $36\text{ mm}$ , kameraning chiqish tuynuki diametri  $12\text{ mm}$ , ikkilamchi konusli konsentratorning ichida tashqi diametri  $12\text{ mm}$ , ichki diametri  $10\text{ mm}$ , oldi egrilik radiusi  $6\text{ mm}$  va uzunligi  $80\text{ mm}$  bo'lgan kvarts trubka joylashtirilgan. Kvarts trubkada distillangan suv aylanadi va shu orqali trubka ichida joylashgan lazer kristali doimiy ravishda sovutilib turilishi ko'zda tutilgan. Lazer kristali sifatida Ce:Nd:YAG sterjeni olingan va uning o'lchamlari  $6\text{ mm}$  diametr va uzunligi  $95\text{ mm}$ .



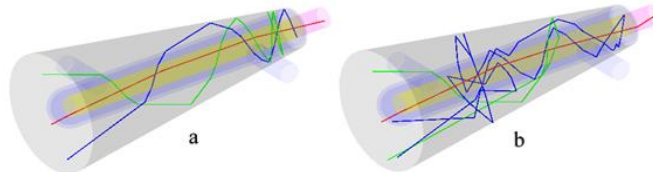
1-Rasm. Quyosh lazeri kamerasing sxematik ko'rinishi.

*Sirtini trapetsiya shaklidan foydalanib strukturalash.* Endi quyosh lazerining modelini yasashda ishlatilgan faol muhit kristali sirtini strukturalashga keladigan bo'lsak, dastlab sirti tekis silindr shaklidagi kristal olingan va uning sirtiga radiusga nisbatan o'lchami kichkina bo'lgan trapetsiya shaklidan foydalanib naqsh berilgan, ya'ni davriy trapetsiyalash orqali strukturalangan (2-rasm). Lazer kristalining diametri  $6\text{ mm}$ , uni rasmda ko'rsatilgan kabi  $0.1\text{ mm}$  chuqurlikda trapetsiya shaklida davriy o'yib chiqilgan. Trapetsiya shaklining takrorlanish davri  $0.6\text{ mm}$ . Kristall deformatsiyaga uchrashmasligi uchun kristallning ikki chetidan  $5\text{ mm}$  sohasi o'yilmagan silindrik ko'rinishda olindi. Trapetsiya shaklining o'lchamlari 2c-rasmda keltirilgan.



2-Rasm. (a) Sirti tekis silindrik kristal, (b) strukturalangan sirtli kristal, (c) trapetsiya tavsifi.

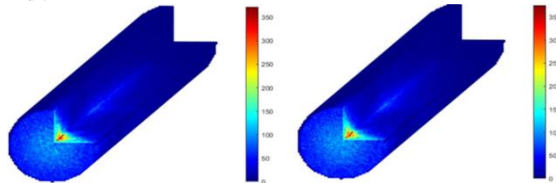
**Modelning ishlash jarayoni.** Yuqorida ta'riflangan elementlardan tuzilgan sistemadagi damlash jarayonini o'rganish uchun MKFYK usulidan foydalanib modellashirildi. Bunda, quyoshning spektral xarakteristikasi va sistema elementlarining fizik xususiyatlari hisobga olindi. 2-rasmdagi keltirilgan ikkita sterjenning sirt farqi mavjudligi sababli, sistemaga kirayotgan fotonning sistema bilan o'zaro ta'siri har xil manzarada kechishini kutish mumkin. Shuni ko'rish uchun, 3 ta foton yo'nalishi tasodifiy tanlab olindi va sistemadagi yurish trayektoriyasining modeli qilindi (3-rasm). Yashil, qizil va ko'k ranglar bilan chizilgan foton trayektoriyasidan ko'rish mumkinki, sirtini strukturalash fotonning yurish yo'lini keskin o'zgartiradi va shu orqali fotonning faol muhitda yutilishiga ya'ni damlanishiga ta'sir o'tkazadi.



3-Rasm. (a) Tekis sirtga ega sterjenli va (b) Strukturalangan sirtga ega sterjenli lazer modeli.

Sirt o'zgarishining lazer chiqish quvvatiga ta'sirini baholash uchun rezonator parametrlaridan tashqari damlash jarayonidan dastlab asosiy kattalik - yutilish samaradorligi (faol muhitda yutilgan fotonlarning sistemaga kirgan jami fotonlar soniga nisbati) kerak, keyin yutilishning sterjen bo'yab taqsimoti kerak bo'ladi. Yutilishning taqsimotini olish uchun fotonlarning faol muhitda yutilgan joyi qayd qilinadi va jamlash kerak bo'ladi.

Biz sistemaga  $2 \times 10^7$  ta fotonni kiritdik va ularning faol muhitda yutilgan joylari qayd qilish orqali yutilish taqsimoti olindi. Tekis sirtli sterjen uchun faol muhitda yutilish samaradorligi  $15.81\%$ , strukturalangan yuza uchun esa  $16.93\%$  ni tashkil qildi. Ko'rinib turibdiki, strukturalash faol muhitda yutilish samaradorligini  $7\%$  ga oshirishi kuzatildi. Tabiiyki, bu ko'rsatgich trapetsiyaning o'lchamlari va davri bilan bog'liq. Yutilish taqsimoti 4-rasmda chizildi.



4-Rasm. (chapda) Tekis sirtga ega sterjenli va (o'ngda) Strukturalangan sirtga ega sterjenli yutilish taqsimoti.

Bu ikkala damlash parametridan tashqari lazer chiqish quvvatini baholash uchun bir nechta rezonator parametrlari kerak bo'ladi. Damlash taqsimoti 4-rasm ko'rsatadiki, damlash kristal bo'yab juda notekis taqsimlangan va shu sababli bizga fazoviy bog'liq bo'lgan elektronlarning sathlararo o'tish tezligi tenglamasini kerak bo'ladi [7]

$$\phi = \tau_c \iiint_{\text{volume}} \frac{R_p(1+f) - fN_t / \tau}{(1+f) + V / (\phi c \sigma_e \tau |u|^2)} dV. \quad (1)$$

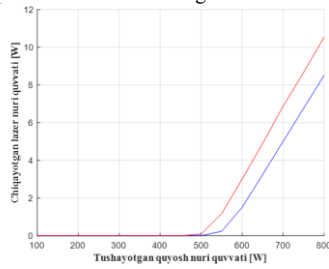
$$P_{out} = k\phi \quad (2)$$

Bu yerda  $k = h\nu\gamma_2 c / 2L_e$  proporsionallik koeffitsienti ( $\gamma_2$  chiqish ko'zgusining o'tkazish koeffitsienti,  $L_e$  - rezonator uzunligi,  $h$ -Plank doimiysi,  $V$  -lazer chastotasi,  $c$ -yorug'lik tezligi), rezonator ko'zgisiga va uzunligiga bog'liq. Lazer chiqish quvvati  $P_{out}$



damlash tezligi  $R_p(r)$  ning funksiyasi, rezonator modasi  $u(r)$  va temperaturaga bog'liq nurlanish ko'ndalang kesim nisbati  $f = \sigma_a(T(R_p, u)) / \sigma_e(T(R_p, u))$ , bu yerda  $T$  faol muhit temperaturasi.

Modeldan olingan samaradorlik va taqsimotga qo'shimcha rezonator parametrlarini nazarda tutgan holda, ikkala hol uchun lazer chiqish quvvatini elektronlarning sathlararo o'tish tezligi (1) va (2) tenglamalarini ishlatib hisoblangan natijalar 5-rasmda keltirilgan.



5-Rasm. Tekis sirtga ega sterjenli (ko'k rang) va strukturalangan sirtga ega sterjenli (qizil rang) lazer chiqish quvvatining damlash quvvatiga bog'liqligi.

5-rasmdan ko'rinadiki, 800 W damlash quvvatida, strukturalangan sirtga ega sterjenli lazer tekis sirtli holga qaraganda deyarli 20% yaxshilanishga olib keladi.

**Xulosa.** Bu ishda biz quyosh bilan damalanadagan va sirti strukturalangan kristallardan tashkil topgan lazerlarni o'rgandik. Strukturalangan sirtli kristallar yordamida qilingan experimental ishlar lazer chiqish xarakteristikasi yaxshilanishi mumkinligiga ishora qilgandik. Bu ishda MKFYK bilan tuzilgan modeldan foydalanib yaxshilanishning sabablari qidirdik. Modelning ko'rsatishicha sirtli strukturalash damlash samaradorligini 7% ga oshishga olib kelar ekan. Bu o'sishning zamirida, lazer sistemasidagi nurlarning trayektoriyalari keskin o'zgarishi turgan bo'lishi mumkin. Damlash samaradorligining yaxshilanishi natijasida, lazer chiqish quvvatining absolyut qiymati 20% ga yaxshilandi ya'ni 8.5 W dan 10.5 W gacha oshirdi. Xulosa o'rnida shuni aytish mumkinki, turli strukturalangan sirtli kristallardan foydalanib quyosh lazerlarini takomillashtirish yoki optimallashtirish mumkin.

#### ADABIYOTLAR

1. Z. J. Kiss, H.R. Lewis, R. C. Duncan, Sun pumped continuous optical maser, Appl. Phys. Lett., 2 (1963) 93, <https://doi.org/10.1063/1.1753794>
2. C. G. Young, A Sun-Pumped c. w. One-Watt Laser, Opt., 5 (1966) 993, <https://doi.org/10.1364/AO.5.000993>
3. Z. Guan et al., "Demonstration of a free-space optical communication system using a solar pumped laser as signal transmitter," Laser Phys. Lett. 14(5), 055804 (2017)
4. T. Yabe et al., "100 W-class solar pumped laser for sustainable magnesium-hydrogen energy cycle," J. Appl. Phys. 104, 083104 (2008).
5. M. Oliveira et al., "A path to renewable Mg reduction from MgO by a continuous-wave Cr, Nd:YAG ceramic solar laser," Sol. Energy Mater. Sol. Cells 155, 430–435 (2016).
6. Liang, D., Vistas, C. R., Garcia, D., Tibúrcio, B. D., Catela, M., Costa, H., ... & Almeida, J. (2022). Most efficient simultaneous solar laser emissions from three Ce: Nd: YAG rods within a single pump cavity. Solar Energy Materials and Solar Cells, 246, 111921.
7. Sherniyozov Anvarjon Akhmedjonovich and Shermakhamat Dalievich Payziyev. "Side-pumped efficient Ce: Nd: YAG solar laser in a multi-pass scheme." Journal of Photonics for Energy 12, no. 3 (2022): 034501-034501.
8. Sherniyozov Anvarjon, Shermakhamat Payziyev and Sherzod Begimqulov. "Enhancing solar laser performance through multirod configurations." Journal of Photonics for Energy 14, no. 2 (2024): 024501-024501.
9. Payziyev Sh, Kh Makhmudov, S. Bakhramov, A. Sherniyozov and Kh Zikrillayev. "Solar-pumped multi-rod laser on a separate heliostat of big solar furnace." Applied Solar Energy 57, no. 6 (2021): 541-551.
10. Payziyev Sh, A. Sherniyozov, S. Bakhramov, Kh Zikrillayev, G. Khalikov, Kh Makhmudov, M. Ismailov, and D. Payziyeva. "Luminescence sensitization properties of Ce: Nd: YAG materials for solar pumped lasers." Optics Communications 499 (2021): 127283.
11. Bakhramov S. A., A. A. Sherniyozov, Sh D. Payziyev, Kh F. Zikrillayev, G. A. Khalikov, Kh M. Makhmudov, M. Z. Ismailov, D. E. Payziyeva, and T. G. Khotchenkova. "Feasibility of luminophores in solar-pumped laser heads." Journal of Applied Spectroscopy 88, no. 2 (2021): 370-372.
12. Xu Peng, Suhui Yang, Changming Zhao, Zhu Guan, Huaxin Wang, Yichen Zhang, Haiyang Zhang, and Tao He. "High-efficiency solar-pumped laser with a grooved Nd: YAG rod." Applied optics 53, no. 18 (2014): 3941-3944. <http://dx.doi.org/10.1364/AO.53.003941>.
13. Guan Z., Zhao C., Yang S., Wang Y., Ke J., Gao F., & Zhang H. (2016, November). Low threshold and high efficiency solar-pumped laser with Fresnel lens and a grooved Nd: YAG rod. In High-Power Lasers and Applications VIII (Vol. 10016, pp. 16-24). SPIE.
14. Guan Z., Zhao C., Zhang H., Li J., He D., Almeida J., ... & Liang D. (2018). 5.04% system slope efficiency solar-pumped Nd: YAG laser by a heliostat-parabolic mirror system. Journal of Photonics for Energy, 8(2), 027501-027501.
15. Cai Z., Zhao C., Zhao Z., Zhang J., Zhang Z., & Zhang H. (2023). Efficient 38.8 W/m<sup>2</sup> solar pumped laser with a Ce: Nd: YAG crystal and a Fresnel lens. Optics Express, 31(2), 1340-1353.
16. Sherniyozov A. A. and Payziyev Sh. D. "Simulating optical processes: Monte Carlo photon tracing method." «Uzbek journal of Physics» 24, no. 3 (2022): 157-162.
17. Sherniyozov A. A. and Payziyev Sh. D. "Side-pumped efficient Ce: Nd: YAG solar laser in a multi-pass scheme." Journal of Photonics for Energy 12, no. 3 (2022): 034501-034501.



UDK:004.032.26.

*Isomiddin NASRIDDINOV,*  
*Angren universiteti dotsenti, iqtisod fanlari nomzodi*  
*Raximqul QURBONOV,*  
*Belorusiya-O'zbekiston qo'shma tarmoqlararo amaliy texnik kvalifikatsiyalar instituti dotsenti, fizika-matematika fanlari nomzodi*

*O'z FA U. Arifov nomidagi IPLT instituti professori, fizika-matematika fanlari doktori, Z.Isaxanov taqrizi asosida*

#### SUN'IY NEYRON TARMOQLARINI TOG'-KON ISHLARI MASALALARINI YECHISHDA QO'LLASH

Аннотация

Mazkur maqolada neyron tarmoqlarini tog'-kon ishlarida qo'llanish masalasi ko'rib chiqilgan. Odatda tog'-kon ishlari, noaniqlik sharoitida olib borilishi sababli, bu jarayoni to'g'ri va aniq baholashda ehtimoliy faktorlar katta rol o'ynaydi. Mualliflar mavjud matematik modeldan foydalanib tog'-kon sharoitida rejalashtirish masalasini neyron tarmoqlari yordamida ko'rib chiqish usulini ishlab chiqqanlar.

**Kalit so'zlar:** neyron, tarmoq, sun'iy intellekt, rejalashtirish, tog'-kon, boshqaruv parametrlari, samaradorlik, o'rtasalmoqli, usul, muqobil, algoritim, tezkorlik, dasturlash tili.

#### APPLICATION OF AN ARTIFICIAL NEURAL NETWORK TO SOLVE MINING PROBLEMS

Annotation

This article discusses the use of neural networks of one of the areas of artificial intelligence in solving open-pit mining problems. The authors examined the use of this method in solving operational and calendar planning of open-pit mining. The use of neural networks in mining, due to the uncertainty in natural and technological systems, is a rather difficult task. The authors, based on the developed mathematical model, made an attempt to formalize knowledge.

**Key words:** Neuron, network, intellect, artificial, planning, mountain, controlled parameters, equipment performance, weighted, methods, option, algorithm, operational, language programming.

#### ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГОРНЫХ РАБОТ

Аннотация

В данной статье рассматривается использование нейронных сетей одного из направлений искусственного интеллекта в решении задач открытых горных работ. Авторами рассмотрена применение этого метода в решении задачи оперативно-календарного планирования открытых горных работ. Использование нейронных сетей в горных работах в силу неопределенности в природно-технологических системах довольно сложная задача. Авторами на основе разработанной математической модели предпринята попытка формализации знаний нейросетями.

**Ключевые слова:** Нейрон, сеть, искусственный интеллект, планирование, горный, управляемые параметры, производительность, средневзвешенное, методы, вариант, алгоритм, оперативный, язык программирования.

Планирование горных работ является непрерывным процессом составления последовательности управляющих решений для различных календарных периодов, уточняющих решения по разработке месторождения. В нем занят широкий круг специалистов инженерных служб горнодобывающего предприятия. Реальная непрерывность такого процесса возможна только при создании общего информационного пространства, включающего геолого-маркшейдерскую и горнотехническую информацию, состав и состояние горно-транспортной техники, экономические показатели и др.

«Планы развития горных работ являются основным документом, регламентирующим работу карьеров» [1]. Они разрабатываются в соответствии с утвержденными проектами разработки месторождений, технико-экономическими показателями предприятий. Основными задачами планов развития горных работ являются обеспечение выполнения задания по добыче полезного ископаемого и повышения эффективности работы карьера при соблюдении требований правил технической и экологической безопасности.

Развитие цифровых технологий привело к пересмотру всего спектра задач на производстве по применению новых информационных технологий. Задачи горного производства как наименее поддающегося решению классическими математическими методами оптимизации и моделирования, нуждаются в новых способах решения.

Известно, что решение горных задач в силу неопределенностей в природно-технологических системах, всегда имело вероятностный характер. В последние десятилетия применение имитационного моделирования в решении горных задач, частично заполняло отсутствие надежных методов решения.

Известно, что стандартный способ решения производственных задач с применением компьютера приводилось в целом по следующей схеме: постановка и исследование задачи, моделирование процесса решения, создание математической модели и алгоритма решения задачи с последующим программированием на языке программирования.

Искусственные нейронные сети представляют собой систему соединенных и взаимодействующих между собой последовательность горных работ (искусственных нейронов). Каждый технологический процесс сети имеет дело только с сигналами, которые он периодически получает по динамической схеме от предыдущего состояния. И тем не менее, будучи соединенными в достаточно большую сеть с управляемым взаимодействием, такие локально простые процессы вместе способны выполнять довольно сложные задачи. «Нейронные сети не программируются в привычном смысле этого слова, они обучаются. Возможность обучения - одно из главных преимуществ нейронных сетей перед традиционными алгоритмами» [2]

Можно ли решать задачи горных работ методами нейронных сетей, то есть с помощью алгоритмов, на основе многократных повторений которого происходит самообучение системы. В производственных системах с изменяющимися технологическими схемами работ, текущие планы рекомендуется обосновать в два этапа:

-на первом этапе методом имитационного моделирования необходимо формировать планы вариантов;

-на втором этапе - выбрать из них наилучшее по схемам динамического программирования для отдельных управляемых параметров.

Для карьеров с открытыми горными работами используются следующие управляемые параметры: производительность оборудования, средневзвешенное расстояние транспортирования, объем транспортных работ, объем путе-передвижных работ.

Анализ функционирования технологий горных работ на разрезе показал, что по взаимным причинам в смежных производственных процессах имеют место простои оборудования. Разрез рассматривается как управляемая динамическая система, основными материальными потоками, которой являются грузопотоки. Они характеризуются изменчивостью во времени объемов и состава груза, рассредоточенностью по различным сходящимся и расходящимся коммуникационным путям, жесткой зависимостью одних грузопотоков от других, приводящей к тому, что диспетчерская служба постоянно изменяет в соответствие с графиком загрузки горного оборудования

При составлении плана вскрышных работ на угольных разрезах, использующих экскаваторы и железнодорожный транспорт, необходимо формировать множество вариантов технологических схем на каждом уступе и рассматривать их совместно при выборе оптимального плана.

Технически, обучение заключается в нахождении коэффициентов связей между нейронами. В процессе обучения нейронная сеть способна выявлять сложные зависимости между входными данными и выходными, а также выполнять обобщение. Это значит, что в случае успешного обучения сеть сможет вернуть верный результат на основании данных, которые отсутствовали в обучающей выборке, а также неполных или «зашумленных», частично искаженных данных.

Классические методы построения АСУ технологическими процессами строятся на формализованных знаниях человека об объекте управления. Вариант построения АСУ (Автоматизированная система управления) на основе нейросети реализует свойственные человеку когнитивные приемы. В качестве примеров успешного применения искусственной нейронной сети (ИНС) в данной сфере можно назвать управление сложными процессами и объектами в условиях информационной неопределенности, процессами механообработки, робототехническими системами.

Сначала определим понятие нейрон и как она интерпретируется в процессе планирования горных работ. Нейрон - это вычислительная единица, которая получает информацию, производит над ней простые вычисления и передает ее дальше. Они делятся на три основных типа: входной, скрытый и выходной. Соответственно, есть входной слой, который получает информацию и обрабатывает скрытый слой в выходной слой, который выводит результат. У каждого из нейронов есть 2 основных параметра: входные данные (input data) и выходные данные (output data). В случае входного нейрона: input=output. В остальных, в поле input попадает суммарная информация всех нейронов с предыдущего слоя, после чего, она нормализуется, с помощью функции активации  $f(x)$  и попадает в поле output.

Как работает нейронная сеть [3] в технологическом процессе горных работ?

Рассмотрим создание элемента нейронной сети (нейрона) в планировании горных работ.

$$H_{1\text{ input}} = (I_1 \cdot W_1) + (I_2 \cdot W_2) \quad (1)$$

$$H_{1\text{ output}} = f_{\text{activation}}(H_{1\text{ input}}) \quad (2)$$

В данном примере изображена часть нейронной сети, где буквами I обозначены входные нейроны, буквой H - скрытый нейрон, а буквой W - веса. Из формулы видно, что входная информация - это сумма всех входных данных, умноженных на соответствующие им веса.

Рассмотрим месячный план работы экскаватора на вскрышных работах, производительность экскаватора зависит от фронта подготовленных горных работ на уступе. Месячный план работы вскрышного экскаватора определим по формуле

$$Q_{\text{пл}} = \bar{Q} + t_{\alpha} \delta_Q$$

где  $Q_{\text{пл}}$  — месячный план по вскрышке;  $\bar{Q}$  — средняя погрузка на экскаватор согласно данным статического анализа;  $t_{\alpha}$  — аргумент нормальной функции распределения при доверительной вероятности выбора плана  $\alpha$ .  $\delta_Q$  — среднее квадратическое отклонение нагрузки.

«Для применения нейронных сетей определим входные данные input data» [4]

Для этого используем математическую модель определения фронт работы экскаватора на уступе. Математическая модель описывает технологический допустимый (возможный) порядок отработки блоков уступа и продолжительность их отработки, объемы и продолжительность выполнения подготовительных и вспомогательных работ [1]. Технологические варианты цепи блоков R -го экскаватора определяются по следующим правилам:

а) при  $W = 1$  начальный блок принимает местоположение экскаватора на начало месяца, то есть  $j_n^r = j_m^r$ , где  $j_n^r \leq j \leq j_k^r$ ,  $j_m^r$  - номер блока, местонахождения  $r$  - го экскаватора на начало планирования;  $j_n^r$  - тоже, принимаемого в качестве начального в зоне работы экскаватора;  $j_k^r$  - то же, в качестве конечного, в зоне работы  $i$  -го экскаватора.

б) при  $W = 2$  - определяется блок на участке уступа с максимальной шириной рабочей площадки,  $j_n^r = i^r$  для  $D_i^r = \max \sum_{j=j+1}^{K_{\text{max}}^r} S_{ij}$  - нахождение максимума по  $i$  -тому уступу, где  $\bar{J} = \bar{O}, K_B^r - K_{\text{max}}^r$ ,  $K_B^r = J_k^r - J_n^r$  - количество блоков, где технологически возможна работа  $r$  - го экскаватора.  $K_{\text{max}}^r$  - максимально возможное количество блоков, включенных в  $i$  -ю цепь для отработки за месяц.  $S_{ij}$  - площадь  $j$  -го блока в  $\text{м}^2$ .

в) при  $W = 3$  - определяется блок с минимальной шириной.

Математическая модель описывает технологический допустимый (возможный) порядок отработки блоков уступа и продолжительность их отработки, объемы и продолжительность выполнения подготовительных и вспомогательных работ. Теперь, когда у нас есть входные данные, мы можем получить выходные данные, подставив входное значение в функцию активации [5]. Исходя из этого, определенные выходные данные используем для дальнейших расчетов. И так, мы повторяем для всех блоков, пока не дойдем до выходного нейрона. Запустив такую сеть в первый раз, мы увидим, что ответ далек от правильного, потому что сеть не натренирована. Чтобы улучшить результаты, будем ее тренировать с помощью функции активации [5]

В работе также построены (рис.1) зависимости стоимости экскавации и транспортирования  $1 \text{ м}^3$  вскрыши от уровня резерва производительности экскаваторного парка (от 0,05 до 0,30) при различной вероятности выполнения месячного плана (0,7 - 0,9). Как видно из графика одинаковая стоимость на экскавацию и транспортирование горной массы может быть достигнута при вероятности выполнения плана ( $P = 0,7; 0,8; 0,9$ ). На графике обозначены точками  $M_1, M_2, M_3$  соответствующие величинам резерва  $R = 0,05; 0,10; 0,26$  или в машиносменах работы экскаватора ( $P=3; 9,6; 15,5$ ).

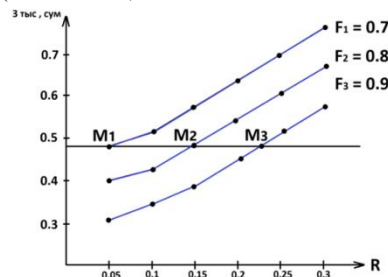


Рис. 1 Зависимость затрат на транспортные расходы

Если резерв увеличить в 5 раз (с 0,05 до 0,25), то как видно из рисунки, вероятность выполнения плана увеличивается с 0,7 до 0,9.

В данной статье мы рассмотрели пример на самом базовом типе нейронных сетей сеть прямого распространения(СПР). Авторами ведется исследование по «Применению имитационного моделирования горных работ для рекуррентных нейронных сетей» [6]. СПР как вытекает из названия, это сеть с последовательным соединением нейронных слоев, в ней информация всегда идет только в одном направлении.

«Главной задачей применения нейронной сети в календарном планировании горных работ является повышение надежности и текущего состояния работы оборудования» [7]. В настоящее время искусственные нейронные сети используются во многих областях, но прежде, чем их можно будет применять, должны быть решены важные вопросы, касающиеся надежности их работы.

Использование искусственных интеллектуальных нейронных технологий в последнее время резко возросло. Данная работа является одним из попыток использования искусственных нейронных сетей в решении задач оперативно-календарного планирования горных работ.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Ржевский, Открытые горные работы. Производственные процессы. Часть М. 2021. стр. 115.
2. С. И.Фомин, Д. Н Лигоцкий. К. Р. Аргимбаев, Планирование открытых горных работ: Учебное пособие . СМ.: Издательство «Лань», 2018. с 60.
3. З. Павлов С. Н. Системы искусственного интеллекта: учеб. пособие.Томск: Эль Контент, 2011, стр. 56.
4. Применение нейросетей в области экономики и финансов. «Научно-практический электронный журнал Аллея Науки» №16, 2017.
5. Суровцев И.С., Клюкин В.И., Пивоварова Р.П. Нейронные сети. – Воронеж: ВГУ – с. 224, 2018.
6. А. Н. Горбань, Обучение нейронных сетей. Изд. «Параграф», Москва, 2020. с 160.
7. К.М Бейсембаев., Н.Р. Ибраева Нейросетевой подход к разработке, моделированию и управлению горными машинами / Разработка моделей и элементов управления технологическими машинами Томск. 2017. с. 57.



UDK: 523.9/523.7

**Murod OLLAYOROV**,  
O'zbekiston Milliy universiteti magistranti  
**Fazliddin SHAMSHIYEV**,  
O'zbekiston Milliy universiteti dotsenti  
**Sanobar AMIROVA**,  
O'zbekiston Milliy universiteti talabasi  
E-mail: [shamshiyev\\_f@nuu.uz](mailto:shamshiyev_f@nuu.uz)

ChDPU dekani, f.-m.f.d I. Tadjibayev taqrizi asosida

#### JEYMS UEBB KOSMIK TELESKOPINING DASTURI VA UNING BA'ZI KUZATUV MA'LUMOTLARINI TAHLILI HAQIDA

Annotatsiya

Mazkur maqolada Jeyms Uebb kosmik teleskopining dasturi va uning ba'zi kuzatuv ma'lumotlarining tahlili haqida so'z boradi. Bunda asosan, teleskopning kuzatuv ma'lumotlari bo'yicha oxirgi yillarda chop etilgan maqolalar va internet tizimining ishonchli ilmiy sahifalaridan olingan ma'lumotlarga tayanadi. Ko'proq e'tibor, Koinotning ilk davrlaridagi galaktikalarning shakllanish jarayonlari va ularning evolyutsiyasiga beriladi.

**Kalit so'zlar:** Jeyms Uebb kosmik teleskopi, ilg'or texnologiya, ekzosayyoralar va galaktikalar.

#### О ПРОГРАММЕ КОСМИЧЕСКОГО ТЕЛЕСКОПА ДЖЕЙМСА УЭББА И АНАЛИЗЕ НЕКОТОРЫХ ЕГО НАБЛЮДЕТЕЛЬНЫХ ДАННЫХ

Аннотация

В данной обзорной работе речь идет о программе космического телескопа Джеймса Уэбба и анализе некоторых его наблюдательных данных. При этом, данный анализ основан на статьях, опубликованных за последние годы и на надежные научные страницы интернета. Больше внимания уделяется процессам формирования галактик и их эволюции в ранние периоды Вселенной.

**Ключевые слова:** космический телескоп Джеймса Уэбба, передовые технологии, экзопланеты и галактики.

#### ABOUT THE JAMES WEBB SPACE TELESCOPE PROGRAM AND THE ANALYSIS OF SOME OF ITS OBSERVATIONAL DATA

Annotation

The review work deals with the program of the James Webb Space Telescope and the analysis of some of its observational data. At the same time, this analysis is based on articles published in recent years and on reliable scientific Internet pages. More attention is paid to the processes of galaxy formation and their evolution in the early periods of the universe.

**Keywords:** James Webb Space Telescope, advanced technologies, exoplanets and galaxies.

**Kirish.** Jeyms Uebb kosmik teleskopi (JWST) - bu zamonaviy astrofizika va astronomiyada eng ilg'or va eng katta maqsadlarga ega kosmik observatoriyalardan biri hisoblanadi. 2021 yil dekabrda orbitaga chiqarilgan ushbu teleskop, asosan infraqizil diapazonida ishlaydi va Koinotning eng uzoq burchaklarini kuzatish imkonini berdi. JWSTning asosiy maqsadi va vazifalari ilgari qilingan ilmiy tadqiqotlar va kashfiyotlar uchun yangi ufqlarni ochishga qaratilgan.

JWSTning asosiy texnologik jihatlari, jumladan, uning ko'zgusi, asboblari va ilmiy maqsadlari [1, 2] maqolalarda batafsil yoritilgan. Bund JWST o'zining infraqizil kuzatuvlaridan qanday qilib yashashga yaroqli ekzosayyoralarini aniqlash yoki dastlabki Koinotning tuzilishi va evolyutsiyasini o'rganish kabi ilmiy yutuqlarga erishish uchun foydalanishiga katta e'tibor qaratilgan. Teleskop tomonidan "birinchi yorug'lik" deb nomlanuvchi kuzatuvlarning dastlabki bosqichida olingan kuzatuvlarning ilk natijalari [3] da keltirilgan. Ushbu bosqich teleskop uchun muhim bosqichi hisoblanadi, chunki u haqiqiy astronomik kuzatuvlarda uning imkoniyatlari va aniqligini namoyish etadi. Galaktikalar evolyutsiyasining asosiy bosqichlari, ularning Katta portlashdan keyingi dastlabki milliardlab yillardagi shakllanishidan hozirgi holatigacha bosqichlari [4]da ko'rib chiqilgan. Unda galaktikalarning kosmologik tarixi davomida qanday shakllanishi, o'zgarishi va o'zaro ta'sirini tushunishga yordam beradigan kuzatuvlar va nazariy modellarning so'nggi yutuqlariga alohida e'tibor qaratilgan. Katta portlashdan keyingi dastlabki bir necha milliard yil ichida hosil bo'lgan galaktikalarni o'rganishga qaratilgan JWST teleskopi tomonidan olingan birinchi chuqur tasvirlari haqidagi natijalar [5, 6]da batafsil yoritilgan. Infraqizil diapazonda olingan ushbu tasvirlar misli ko'rilmagan aniqlik va sezgirlikni namoyon etgani, bu esa kosmik tarixning eng uzoq va dastlabki bosqichlarini ko'rish imkonini yaratgani haqida so'z boradi. [7, 8]da JWST teleskopining ekzosayyora atmosferalarni o'rganish uchun hayot belgilarini izlash istiqbollari ko'rib chiqilgan. Bu maqola ekzosayyoralar atmosferasining spektroskopiyasini gazlarning tarkibini tahlil qilish orqali amalga oshirishga imkon beradi, bu esa ushbu sayyoralaridagi kimyoviy va fizik-geologik sharoitlar to'g'risida muhim ma'lumotlarni berishi mumkinligi ko'rsatilgan. Ekzosayyoralarini o'rganish uchun JWST teleskopi yordamida infraqizil spektroskopiyani qo'llash imkoniyatlari va natijalari haqida izlanishlar [9]da ko'rib chiqilgan. Mualliflar ushbu vosita ekzosayyora atmosferasining tarkibi va tuzilishini tushunishni qanday chuqurlashtirishi, shuningdek biologik jarayonlar yoki hayotni qo'llab-quvvatlovchi sharoitlar bilan bog'liq bo'lishi mumkin bo'lgan kimyoviy izlarni ochib berishi mumkinligi bilan qiziqishgan. Adabiyotlar ro'yhatida keltirilgan [10, 11, 12] internet ba'zalarida JWST haqida va uning astrofizikaning barcha mavzulari bo'yicha kuzatuv ma'lumotlarini topish mumkin.

#### 1. JWSTning dasturi haqida.

##### 1. Koinotning dastlabki bosqichlarini o'rganish.

JWSTning eng muhim maqsadi - kosmosning dastlabki bosqichlarini o'rganishdan iborat. Teleskop Yerdan 1,5 million kilometr uzoqlikda joylashgan Lagrang 2 nuqtasida kuzatuvlarni olib boradi, bu esa unga ko'plab masalalarni hal qilish uchun yaxshi imkoniyat yaratadi. JWST, xususan, "Eng qadimgi yulduzlar va galaktikalarni o'rganish" orqali ularga oid kashfiyotlar qilishni maqsad qilgan.

Ushbu teleskop yordamida kosmosning ilk yillarida yuzaga kelgan yulduzlar va galaktikalarning shakllanish jarayonlarini o'rganiladi. Jeyms Uebb teleskopi, Xabli teleskopi kabi avvalgi teleskoplar bilan taqqoslagandada, ko'proq uzoq masofalarga qarab, ko'proq aniq va batamom detallashgan tasvirlarni olish imkoniyatiga ega. Bu, o'z navbatida, kosmosning ilk 100-200 million yillik davrini o'rganish imkonini beradi.

##### 2. Infraqizil diapazonida ishlash.

JWSTning o'ziga xos xususiyatlaridan biri uning infratqizil diapazonida ishlashi hisoblanadi. Xabli teleskopi asosan optik nurda (ya'ni, ko'k, yashil va qizil) kuzatuvlar olib boradi, endi infratqizil diapozonga o'tish, kashfiyotlar uchun yangi imkoniyatlar yaratdi. Jeyms Uebb teleskopi *eng qadimgi va eng uzoqdagi obyektlarni* aniqlashda yordam berdi, chunki u juda uzoq masofalardagi galaktikalarning yorug'lik nurlari seza oladi.

Bu teleskop Yerdan o'zining yuqori texnologiyali infratqizil kameralaridan foydalanib, masalan, galaktikalar, yulduzlar va yulduzlararo bulutlar kabi ko'p obyektlarni o'rganish qobiliyatiga ega. Ularning tashqi ko'rinishida juda ko'p detallar mavjud va bu yulduzlarning yashash siklini yaxshiroq tushunishga yordam beradi.

### 3. Ekzosayyoralarini o'rganish.

JWSTning yana bir muhim vazifalaridan biri *ekzosayyoralarini, ya'ni bizning Quyosh tizimimizdan tashqaridagi sayyoralarini* o'rganishdir. Ularning atmosferasini tahlil qilish orqali, u yerda *hayot mavjud bo'lishi mumkin bo'lgan sharoitlarni* aniqlash imkoniyatini beradi. JWST yordamida ekzosayyoralarining atmosferasini o'rganish, ular ustida suv bug'lari, uglerod oksidi, metan va boshqa hayot uchun muhim bo'lgan moddalar mavjudligini tekshirishi mumkin.

### 4. Suv va hayot uchun imkoniyatlarni izlash.

JWST, shuningdek, kosmik hayot izlash bo'yicha tadqiqotlar olib boradi. Ekzosayyoralar va boshqa obyektlarning atmosferasini o'rganish orqali, astronomlar, agar u yerda hayot bo'lsa, uning qanday belgilarini aniqlash imkoniyatini oshiradilar. Ularning atmosfera tarkibi, shu jumladan, organik moddalar yoki hayot uchun kerakli kimyoviy elementlarning mavjudligi, Yerdan tashqarida hayot ehtimolini ko'rsatishi mumkin.

### 5. Temir, temirli yulduzlar va qora teshiklarni o'rganish.

Jeyms Uebb teleskopi infratqizil kameralarini orqali, qora tuynuklar va shu kabi boshqa murakkab astrofizik hodisalarni o'rganish imkonini beradi. Bu teleskop yordamida qora tuynuklar atrofidagi yulduzlar va gaz bulutlarining qanday o'zgarishini ko'rish mumkin. Shuningdek, JWST katta hajmdagi galaktikalar va ular orasidagi yulduzlarni o'rganish orqali, galaktikalar va ularning markazidagi qora tuynuklar o'rtasidagi bog'liqlikni yaxshiroq tushunishga yordam beradi.

### 6. Ilg'or ilmiy tadqiqotlar.

JWST ko'plab yangi ilmiy metodlarni qo'llab-quvvatlaydi, masalan, maxsus kosmik obyektlarning spektral tahlilini amalga oshirish orqali. Bu orqali turli galaktikalardagi yulduzlarning kimyoviy tarkibini, yulduzlararo materiallarning holatini va boshqa kosmik obyektlar orasidagi bog'liqliklarni o'rganishi mumkin.

## II. Galaktikalarning paydo bo'lishi va evolyutsiyasi bo'yicha JWSTning kuzatuv ma'lumotlarining tahlili.

JWST astrofizika va kosmologiyada inqilobiy kashfiyotlarni amalga oshirishga qaratilgan eng ilg'or va murakkab astronomik observatoriyalardan biri hisoblanadi. Infratqizil diapazonida ishlashi uning uzoqdagi galaktikalar va yulduzlararo obyektlarni kuzatishdagi ahamiyatini yanada oshiradi. JWSTning eng muhim vazifalaridan biri galaktikalarning paydo bo'lishi va evolyutsiyasini o'rganishdir, chunki bu olamning dastlabki bosqichlari va uning hozirgi shaklini tushunish uchun muhim ahamiyatga ega.

### 1. Galaktikalarning paydo bo'lishi va shakllanishi.

JWST kosmik teleskopi yordamida olingan dastlabki kuzatuv ma'lumotlari, galaktikalar qanday paydo bo'lib, ular qanday o'zgarishlarga uchraganini tushunishda yangi yoritilgan nuqtalarni taqdim etmoqda. Galaktikalar, kosmosning eng yirik tuzilmalari bo'lib, ular milliardlab yulduzlar, gazlar, va qora tuynuklar kabi turli komponentlardan iborat. Galaktikalar qanday paydo bo'lishini va ularning shakllanish jarayonini tushunish, Koinotning dastlabki vaqtlari haqida ko'plab ma'lumotlarni bermoqda.

JWSTning yuqori sezgirlikka ega infratqizil kameralari orqali, o'ta uzoq masofadagi galaktikalarni kuzatish imkoniyatiga ega bo'lmoqda. Bu galaktikalar hozirgi davrda ko'rilmaydigan holatlarda bo'lib, ular Koinotning boshlanishiga yaqin davrlarda mavjud bo'lgan. Ushbu galaktikalar orasida, "qizilga siljigan" galaktikalar kabi, yoritilgan nurlar ko'p vaqt davomida kosmosda sayr qilgan va ular sezilarli darajada "qizargan". Bu kuzatuvlar galaktikalarning shakllanishi va evolyutsiyasi haqidagi tasavvurlarni qayta ko'rib chiqishga olib kelmoqda.

### 2. Galaktikalarning evolyutsiyasi.

JWSTning keyingi tahlil qilgan sohalardan biri galaktikalarning evolyutsiyasini o'rganishdir. Koinotda mavjud bo'lgan galaktikalar, yillar davomida o'z shaklini va tuzilishini o'zgartirishgan. Shakllanishning birinchi bosqichlari haqida ma'lumot olish uchun, JWST mutaxassislari "deep field" (chuqur maydon) usulidan foydalanishmoqda, ya'ni juda uzoq galaktikalarga qarash orqali, bu galaktikalar millionlab yillar oldin qanday ko'rinishda bo'lganini tushunishga harakat qilishadi. JWST ko'p yillar davomida yoritilgan nurlarning to'liq spektrini, jumladan, infratqizil nurlarni tahlil qilish orqali, galaktikalarning ichki tuzilishini va ularning evolyutsiyasini aniqroq aniqlash imkonini tug'ildi.

JWSTning yangi kuzatuvlari, galaktikalarning o'zaro qo'shilishi (yoki to'qnashuvi) jarayonlarini ham tahlil qilishga imkon beradi. Bunday to'qnashuvlar galaktikalar uchun muhim evolyutsion bosqichni tashkil qiladi, chunki ular birlashib, yangi yulduzlar va boshqa obyektlar hosil qilishi mumkin. Galaktikalarning o'zaro to'qnashuvlari va birlashuvi haqida olingan ma'lumotlar, ularning tuzilishi va rivojlanishining qanday sharoitda amalga oshganini tushunishga yordam beradi.

### 3. Yangi galaktikalar va ularning tuzilishi.

JWSTning yana bir muhim yutuqi, juda uzoq va qadimgi galaktikalarning shakllanishi haqida yangi ma'lumotlarni olishdir. Teleskop, kosmosning eng uzoq nuqtalariga qarab, galaktikalarning yoshini, ularning shaklini va tuzilishini o'rganmoqda. 2022 yilda, JWST o'zining birinchi yilida eng uzoq galaktikalarni kuzatib, ular birinchi marta faqat 300-500 million yil o'tgach paydo bo'lganini aniqladi. Bu galaktikalar, bizning kashfiyotlarimizdan juda uzoqda bo'lib, ular ko'plab yillar davomida qulay sharoitlarda rivojlanib, yulduzlar va boshqa kosmik sistemalarni yaratgan.

Shuningdek, JWST yangi galaktika turlarini aniqlashga yordam bermoqda. Bu galaktikalar o'zlarining shakli va tarkibi bo'yicha ilgari tasavvur qilinganlardan farq qiladi. Misol uchun, JWSTning kuzatuvlari yordamida, ko'plab galaktikalar uzoq vaqt davomida tartibga solingan shaklni hosil qilmaganini va tartibsiz shakllarda bo'lganini ko'rsatdi. Bu kabi galaktikalarning paydo bo'lishi va rivojlanish jarayonlari haqidagi tasavvurlarni qayta ko'rib chiqishga olib kelmoqda.

### 4. Galaktikalarning ichki tarkibi va yulduz shakllanishi.

JWST yordamida galaktikalar ichidagi yulduz shakllanish jarayonini ham yaxshiroq o'rganish mumkin. Teleskop yulduzlararo bulutlar fizikasi, ularning qanday va qachon yulduzlarni shakllantirishini o'rganishga yordam beradi. Infratqizil ko'rinishdagi tasvirlar, yulduz shakllanishining barcha bosqichlarini, jumladan, yulduzlarning to'liq tug'ilishi va evolyutsiya jarayonlarini kuzatishga imkon beradi.

JWSTning "NIRCam" va "MIRI" kabi yuqori texnologiyali qurilmalari galaktikalar ichidagi yulduz shakllanish zonalarini aniqlashda juda samarali bo'lib, bu ma'lumotlar bizga galaktikalarda yulduz shakllanishining hozirgi vaqtda qanday amalga oshayotganini aniqlashda yordam bermoqda. Bu, o'z navbatida, galaktikalar evolyutsiyasiga ta'sir qiluvchi asosiy omillarni aniqlashga yordam beradi.

### 5. Kelajakdagi tadqiqotlar va kuzatuvlar.

JWSTning kelajakdagi kuzatuvlari galaktikalarning paydo bo'lishi va evolyutsiyasini yanada chuqurroq tushunishga imkon beradi. Yangi texnologiyalar va metodologiyalar yordamida, astronomlar galaktikalar orasidagi to'qnashuvlar, ular orasidagi materiyaning tarqalishi va galaktikalarning ichki dinamikasi haqida yanada aniqroq ma'lumotlarga ega bo'lishadi.

## Xulosa.

1. Jeyms Uebb kosmik teleskopi astronomiya va astrofizikaning ko'plab sohalarida inqilobiy yutuqlarni kutmoqda. U, birinchidan, Koinotning eng uzoq, eng qadimgi va eng kichik qismlarini o'rganish imkonini bermoqda. Infratqizil diapozonga asoslangan texnologiyalar yordamida JWST galaktikalar, yulduzlar, ekzosayyoralar va qora tuynuklar haqida yangi-yangi ma'lumotlarni taqdim etmoqda. Shuningdek, bu teleskop Yerdan tashqarida hayot mavjudligini izlashda muhim qadamlarni qo'yishda yordam bermoqda. Uning ilmiy ilmiy izlanishlari olam haqidagi tushunchamizni kengaytirishga yordam beradi.

2. Jeyms Uebb kosmik teleskopi galaktikalarning paydo bo'lishi va evolyutsiyasini o'rganishda yangi davrni boshlab berdi. Uning yuqori sezgirligi va infraqizil diapazonidagi imkoniyatlari yordamida, Koinotning eng uzoq va qadimgi nuqtalarini kuzatish imkoniyatiga ega bo'ldi. Bu teleskopning ma'lumotlari, galaktikalarning shakllanish jarayonlarini va ularning hozirgi tuzilishini yaxshiroq tushunishga yordam berishi bilan birga, kosmologiya va astrofizikadagi eng qiziqarli savollarga javob topish uchun yangi ufqlarni ochmoqda.

#### ADABIYOTLAR

1. Mather J. C., Glauser J. va boshqalar, *The Astrophysical Journal*, "The James Webb Space Telescope: Overview and scientific objectives", 2021
2. Mather J.M., Thomas S. L. va boshqalar, *Space Science Reviews*, "James Webb Space Telescope: Design, Development, and Science Goals", 2020
3. Stephanie C. L., Mark R. M. va boshqalar, *Nature*, "First light observations of the James Webb Space Telescope", 2022
4. Sanders D.S., Kevin P. Oesch va boshqalar, *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, "The Evolution of Galaxies: From the Early Universe to the Present Day", 2022
5. Ellis R.S. va boshqalar, *Astrophysical Journal*, "James Webb Space Telescope: The First Deep Field Images of the Early Universe", 2023
6. Cobb B.S., Steven L. Finkelstein va boshqalar, *Science*, "Galaxies in the Early Universe: What the James Webb Space Telescope Will Reveal", 2021
7. Cowan N.B., Tinetti G. va boshqalar, *Astrobiology*, "Searching for Life: The James Webb Space Telescope and Exoplanet Atmospheres", 2021
8. Batalha N., Mark E. va boshqalar, *Everett Nature Astronomy*, "The James Webb Space Telescope and the Characterization of Exoplanets", 2022
9. Stevenson K.B., Hogg J.L. va boshqalar, *The Astrophysical Journal Letters*, "Infrared Spectroscopy of Exoplanets with JWST", 2023
10. NASA's James Webb Space Telescope Page, <https://webb.nasa.gov/>
11. *The Astrophysical Journal*, JWST va kosmik tadqiqotlar bo'yicha ilmiy maqolalar va tahlillarni nashr etuvchi asosiy ilmiy jurnal, <https://iopscience.iop.org/journal/0004-637X>
12. *Nature Astronomy*, JWST tomonidan amalga oshirilgan kuzatuvlar va tahlillar haqida maqolalar mavjud ilmiy jurnal, <https://www.nature.com/natastron/>
13. Arxiv, ochiq arxiv platformasi, astronomiya va astrofizika bo'yicha JWST bilan bog'liq eng yangi ilmiy tadqiqotlarni taqdim etuvchi sahifa, <https://arxiv.org/>



УДК: 524.3/4

Аббос ОМОНОВ,

Базовый докторант Национального университета Узбекистана

E-mail: [abbosmonov998@gmail.com](mailto:abbosmonov998@gmail.com)

Tel: (90) 343 87 98

Заведующий отделом «Астрономии за пределами Галактики» Института астрономии РАН, проф. по отзывам К.Т. Миртаджиевой

### LOPSAIDAL SPIRAL GALAKTIKALARDAGI SUPER-MASSIV QORA O‘RALAR

Annotatsiya

Biz o‘tamassiv qora o‘ra massalarining lopsaidal spiral galaktikalardagi asosiy fizik xarakteristikalarini o‘rtasidagi mumkin bo‘lgan korrelyatsiyalarni tahlil qildik. Korrelyatsiya koeffitsientlari va tegishli empirik bog‘lanishlar topildi. Natijalarga ko‘ra, spiral galaktikalardagi qora o‘ra diskning asimtriyasiga va undagi yulduzlar evolutsiyasiga ta‘sir ko‘rsatadi.

**Kalit so‘zlar:** galaktika: lopsaidal, akkretsiya, galaktik disk, evolyutsiya, qoramtir materiya.

### SUPER-MASSIVE BLACK HOLES IN LOPSAIDAL SPIRAL GALAXIES

Annotation

We analyzed the possible correlations between the main physical characteristics of the disk of supermassive black hole galaxies and the lopsided spiral galaxies. Correlation coefficients and corresponding empirical relationships were found. According to the results, the black hole in spiral galaxies affects the asymmetry of the disk and the evolution of stars in it.

**Key words:** galaxy: lopsided, accretion, galactic disk, evolution, dark matter.

### СВЕРХМАССИВНЫЕ ЧЕРНЫЕ ДЫРЫ В ЛОПСАИДАЛЬНЫХ СПИРАЛЬНЫХ ГАЛАКТИКАХ

Аннотация

Мы проанализировали возможные корреляции между основными физическими характеристиками диска галактик с сверхмассивными черными дырами и лопсайдальными спиральными галактик. Были найдены корреляционные коэффициенты и соответствующие эмпирические зависимости. Согласно результатам, черная дыра в спиральных галактиках влияет на асимметрию диска и эволюцию звезд в нем.

**Ключевые слова:** галактика: лопсайдальность, аккреция, галактический диск, эволюция, темная материя.

**Введение.** Наблюдательные данные показывают, что распределение светимости и HI во многих галактиках выглядит асимметричным. Галактики с таким внешним видом были названы Болдуином и другими «лопсайдальными» [1]. Явление лопсидальности встречается в большинстве дисковых галактик. Минимум 30% спиральных галактик показывают значительную лопсайдальность, причем асимметрия часто измеряется как амплитуда Фурье компонента  $m=1$  [2-4]. Кроме того, лопсайдальность может вызывать асимметрию гало в галактиках [5]. Асимметрия гало может влиять на общую динамику и эволюцию галактики. Но что вызывает эту асимметрию? Это один из текущих вопросов астрофизики. Возможными механизмами возникновения лопсидальности являются приливное взаимодействие спутника (хотя без него также она наблюдается), аккреция спутников (галактик) или газообразного вещества и неустойчивость отдельных мод возмущений. Недавние достижения в наблюдениях, аналитических моделях и моделировании проливают свет на эти механизмы. Лопсидальность влияет на динамику галактик, на скорость звездообразования, на рост центральных сверхмассивных черных дыр (СМЧД) и общую эволюцию галактики [2,6-7]. СМЧД в центре галактики может влиять также на аккрецию газа на черную дыру. Этот процесс может привести к механизмам обратной связи, когда энергия и материя выбрасываются обратно в диск галактики, влияя на звездообразование и общую динамику диска [8]. Присутствие СМЧД может влиять на общую динамику диска галактики, включая кривую вращения и движение звезд и газа. Гравитационное влияние СМЧД может создавать асимметрию в кривой вращения. Из этого можно сделать вывод, что центральная СМЧД оказывает значительное влияние на физическую эволюцию звезд в диске.

**1. Цель и методы исследования.** СМЧД в центре лопсайдальных дисковых галактик может привести к асимметрии галактического диска. Это отражается в распределении массы в диске. Мы рассматриваем только спиральные галактики. Для проведения соответствующих статистических исследований и нахождения необходимых эмпирических формул мы сначала рассчитываем значения коэффициентов корреляции массы СМЧД с массой диска, возрастом звезд в диске и т.д. Цель данной работы - изучить, как черная дыра в центре лопсайдальных спиральных галактик влияет на эволюцию в диске.

**2. Результаты и обсуждение.** Мы впервые исследуем поставленную проблему на примере спиральных галактик. Для этой цели мы сначала создали выборку из 55 галактик с известными значениями масс центральных черных дыр и основными физическими свойствами диска, а именно массой диска, возрастом и металличностью звезд в диске и т.д. По нашему мнению, связь между физическими характеристиками диска и массой черной дыры в центре лопсайдальных спиральных галактик имеет фундаментальное значение для изучения эволюции диска и развития черной дыры.

1. Мы начинаем наш анализ этой проблемы с определения возможной корреляции массы черной дыры в центре лопсайдальных спиральных галактик с морфологическим типом галактики. Никто еще не изучал такую зависимость в мировой литературе. Коэффициент корреляции между массой черной дыры и морфологическим типом  $T$  оказался довольно хорошим:  $\text{cc} = -0.70$ . Было обнаружено, что взаимосвязь между ними имеет следующую форму:

$$\lg(M_{\text{чд}}/M_{\odot}) = (-0.38 \pm 0.05)T + (8.46 \pm 0.24) \quad (1)$$

Кроме того, ошибки в определении коэффициентов относительно невелики. рис.1 показывает, что масса черной дыры в центре лопсайдальной спиральной галактики уменьшается с увеличением кода типа, или чем больше масса черной дыры в центре галактики, тем меньше код типа.



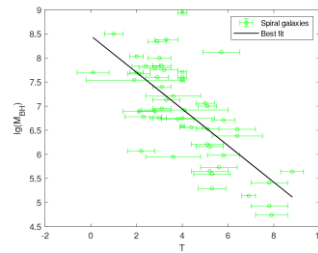


Рис. 1. Связь между массой СМЧД и кодом морфологического типа.

2. Мы также заинтересованы в соотношении между массой черной дыры и массой диска в лопсайдальных спиральных галактиках. Коэффициент корреляции  $\text{cc}=0.56$ , если использовать данные работы [9] для 40 спиральных галактик. Мы же изучили эту зависимость для 53 лопсайдальных спиральных галактик и обнаружили сильный коэффициент корреляции между этими показателями,  $\text{cc} = 0.70$ , и эмпирическая формула имеет следующий вид:

$$\lg(M_{\text{чд}}/M_{\odot}) = (1.33 \pm 0.20) \lg(M_{\text{диск}}/M_{\odot}) + (-6.51 \pm 1.98). \quad (2)$$

Из этого можно сделать вывод, что из-за явления асимметрии значение диска в развитии черной дыры значительно. Чем больше масса диска, тем больше масса черной дыры в его центре (Рис. 2). Кроме того, развитие диска, богатых газом, лопсайдальных спиральных галактик и черной дыры тесно взаимосвязаны.

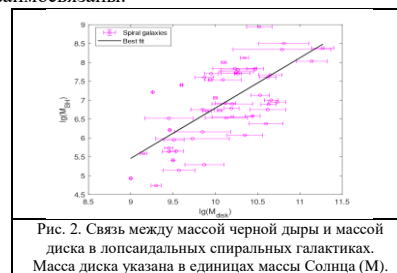


Рис. 2. Связь между массой черной дыры и массой диска в лопсайдальных спиральных галактиках. Масса диска указана в единицах массы Солнца (M).

3. Кроме того, впервые мы находим сильную корреляцию между массой черной дыры лопсайдальных спиральных галактик и возрастом звезд в диске, с топографическим коэффициентом корреляции  $\text{cc}=0.77$ . Соответствующая эмпирическая зависимость была получена в следующей форме:

$$\lg(M_{\text{чд}}/M_{\odot}) = (0.70 \pm 0.13) t_{\text{д}} + (1.11 \pm 1.04). \quad (3)$$

Анализ данных показал, что только у 24 из 56 спиральных галактик есть надежные данные о возрасте звезд в диске. В спиральных галактиках с активным звездообразованием диск населен молодыми массивными звездами. Эти галактики, как правило, имеют более высокие скорости притока газа, что может питать как звездообразование, так и рост черной дыры. Спиральные галактики со старыми звездными популяциями в их дисках часто более спокойны и имеют менее активное звездообразование. Масса черной дыры в этих галактиках может зависеть от массы старых звезд. Галактики с длительными периодами звездообразования могут иметь более массивные черные дыры, чем галактики, которые прекратили звездообразование на ранней стадии [10]. Кроме того, как видно из рис. 3, чем старше возраст звезд в диске, тем больше масса черной дыры в центре галактики.

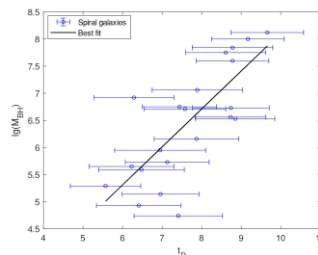


Рис. 3. Связь между массой черной дыры и возрастом звезд в диске для лопсайдальных спиральных галактик. Возраст звезд в диске указан в гигагодах (Gyr).

4. Мы также впервые искали возможную эмпирическую связь между массой черной дыры лопсайдальных спиральных галактик и металличностью звезд в диске, и обнаружили очень хорошую корреляцию  $\text{cc}=0.70$ . Соответствующая эмпирическая зависимость была получена в следующей форме.

$$\lg(M_{\text{чд}}/M_{\odot}) = (6.19 \pm 1.46) Z + (3.62 \pm 0.69) \quad \text{cc}=0.7 \quad (4)$$

Металличность звезд в диске галактик зависит в первую очередь от массы диска. Из этого можно сделать вывод, что чем больше масса звезд в диске, тем выше их металличность и тем больше масса черной дыры в центре. Это можно увидеть на рисунке 4. В нашей выборке лопсайдальных спиральных галактик металличность находится в пределах от  $0.2 Z_{\odot}$  до  $0.8 Z_{\odot}$ . Сравнение градиентов металличности в лопсайдальных и обычных спиральных галактиках может показать влияние асимметрии диска на звездообразование. Через это можно изучить влияние асимметрии на развитие центральной черной дыры.

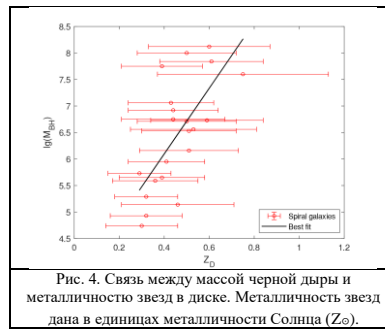


Рис. 4. Связь между массой черной дыры и металличностью звезд в диске. Металличность звезд дана в единицах металличности Солнца ( $Z_{\odot}$ ).

Мы можем использовать эту зависимость, чтобы понять совместную эволюцию галактик и их центральных черных дыр, а также использовать массы черных дыр как инструмент для изучения эволюции галактик и дисков.

**Заключение.** Таким образом, мы обнаружили, что основные физические свойства диска лопсидальных спиральных галактик связаны с массой центральной черной дыры. Полученные результаты показывают, что масса черной дыры регулирует значения основных физических свойств диска и влияет на эволюцию звезд в диске. Чем старше возраст, выше металличность и больше масса диска, тем массивнее черная дыра. Кроме того, из-за эффекта асимметрии распределения звезд, газа и темной материи в диске лопсидальность влияет на развитие черной дыры.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Baldwin J.E., Lynden-Bell D., Sancisi R. Lopsided galaxies // MNRAS. – Oxford. 1980. – vol. 193, - pp. 313-319.
2. Jog C.J., Combes F. Lopsided spiral galaxies // Physics review. 2009. – vol. 471, pp. 1-75.
3. Bournaud F., Combes F., Jog C.J., Puerari I. Lopsided spiral galaxies: 203 evidence for gas accretion // Astronomy and Astrophysics. – France. 2005. –vol. 438, - pp. 507-520.
4. Rix H-W., Zaritsky D. Nonaxisymmetric Structures in the Stellar Disks of Galaxies // Astrophysical Journal. - Chicago, 1995. – vol. 447, - pp. 82-102.
5. Varela-Lavin, S., “Lopsided galaxies in a cosmological context: a new galaxy-halo connection”, MNRAS, 2023 vol. 523, No. 4, pp. 5853–5868.
6. Dolfi, A., “Lopsidedness as a tracer of early galactic assembly history”, MNRAS, 2023 vol. 526, No. 1, pp. 567–584.
7. Reichard, T. A., Heckman, T. M., Rudnick, G., Brinchmann, J., Kauffmann, G., and Wild, V., “The Lopsidedness of Present-Day Galaxies: Connections to the Formation of Stars, the Chemical Evolution of Galaxies, and the Growth of Black Holes”, The Astrophysical Journal, 2009, vol. 691, No. 2, pp. 1005–1020.
8. Zhang, T.-C., Guo, Q., Qu, Y., and Gao, L., “The role of mergers and gas accretion in black hole growth and galaxy evolution”, Research in Astronomy and Astrophysics, vol. 21, no. 8, Art. no. 212, IOP, 2021. doi:10.1088/1674-4527/21/8/212.
9. Davis, B. L., Graham, A. W., and Cameron, E., “Black Hole Mass Scaling Relations for Spiral Galaxies. II”, The Astrophysical Journal, vol. 869, no. 2, Art. no. 113, IOP, 2018. doi:10.3847/1538-4357/aae820.
10. Merrifield, M. R., Forbes, D. A., and Terlevich, A. I., “The black hole mass-galaxy age relation”, MNRAS, vol. 313, no. 2, OUP, pp. L29–L32, 2000. doi:10.1046/j.1365-8711.2000.03461.x.



**Сатимбой ПАЛВАНОВ,**  
Национальный университет Узбекистана.  
Физический факультет профессор Ф.-м.ф.д.  
E-mail: satimbay@yandex.ru, palvanov1960@gmail.com

**Феруза ЭГАМОВА,**  
Национальный университет Узбекистана.  
Физический факультет

**Муқаддас МАМАЮСУПОВА,**  
Национальный университет Узбекистана.  
Физический факультет доцент Ф.-м.ф.н.  
Тел: (97) 729 88 78

**Саидмухаммад АХМЕДОВ,**  
Национальный университет Узбекистана.  
Физический факультет учитель  
E-mail: saidmuhammadaxmed@gmail.com  
Тел: (97) 445 75 34

**Асрорбек АЛИЖОНОВ,**  
Национальный университет Узбекистана.  
Физический факультет студент 2 курса

По материалам обзора доцент РФА ИЯФ, Ф.-м.ф.н. Ганиев О.

#### ВОЗБУЖДЕНИЯ ИЗОМЕРНЫХ СОСТОЯНИЙ $^{89m}\text{Zr}$ В РЕАКЦИЯХ $(\gamma, n)$ И $(n, 2n)$ НА ЯДРЕ $^{90}\text{Zr}$

Аннотация

Методом наведенной активности измерены сечения образования изомерных состояний в реакциях  $(\gamma, n)$  и  $(n, 2n)$  на ядре  $^{90}\text{Zr}$ . Получены энергетические зависимости изомерного отношения выходов реакций  $(\gamma, n)$  в области энергий 14–35 МэВ с шагом 1 МэВ. Результаты экспериментов сравниваются с данными других работ и расчетом TALYS-1.6.

**Ключевые слова:** ядерные реакции, изомерные отношения, тормозное излучение, радиоактивность, сечение, активность, изомер, ядро.

#### EXCITATIONS OF ISOMER STATES OF $^{89m}\text{Zr}$ IN THE REACTIONS $(\gamma, n)$ AND $(n, 2n)$ ON THE $^{90}\text{Zr}$ NUCLEUS

Annotation

The cross sections for the formation of isomeric states in the reactions  $(\gamma, n)$  and  $(n, 2n)$  on the  $^{90}\text{Zr}$  nuclei were measured by the induced activity method. The energy dependences of the isomeric ratio of the yields of reactions  $(\gamma, n)$  in the energy range of 14–35 MeV with a step of 1 MeV are obtained. The experimental results are compared with the data of other works and the TALYS-1.6 calculation.

**Key words:** nuclear reactions, isomeric ratios, bremsstrahlung, radioactivity, cross section, activity, isomer, nucleus.

Исследования возбуждения изомерных состояний в различных ядерных реакциях имеют фундаментальное и прикладное значения. Изомерные отношения, т.е. отношения выходов и сечений реакций образования остаточных ядер в изомерном и основном состояниях, зависят от спина ядра-мишени и вносимого углового момента, который определяется массой и энергией бомбардирующей частицы, а также механизмом реакции, свойствами возбужденных состояний как в непрерывной, так и в дискретной областях [1,2]. Таким образом, по данным об изомерных отношениях исследуются механизмы ядерных реакций и статистические свойства возбужденных состояний атомных ядер. Важное значение имеет изучение образования изомерных состояний ядер в ядерных реакциях с различными бомбардирующими частицами, которые получают сведения о механизмах ядерных реакций и о свойствах возбужденных состояний атомных ядер.

Особенно интересным является изучение ядерных реакций типа  $(n, 2n)$  и  $(\gamma, n)$  на ядрах с  $74 \leq A \leq 92$ . В этой области наблюдается ядерная деформация вытянутого типа. Ядра  $^{81}\text{Br}$ ,  $^{90}\text{Zr}$  и  $^{92}\text{Mo}$  находятся в этой области. Кроме того, ядра с замкнутой оболочкой  $N=50$  также находятся в этой области и являются объектом активного исследования как структуры уровней, так и изомерных отношений на этих ядрах в реакциях  $(n, 2n)$  и  $(\gamma, n)$  [3].

В настоящей работе методом наведенной активности исследовано сечение возбуждения изомерных состояний  $^{89m}\text{Zr}$  в ядерной реакции  $(n, 2n)$  при энергии нейтронов 14.1 МэВ. Определена энергетическая зависимость изомерного отношения выходов реакции типа  $(\gamma, n)$  на ядре  $^{90}\text{Zr}$  в области энергий 12–35 МэВ с шагом 1 МэВ.

**Методика эксперимента.** Исследования проводили на нейтронном генераторе НГ-150 Института ядерной физики АН РУз [4]. В качестве исходных экспериментальных данных по реакции  $(\gamma, n)$  служил атлас гамма-спектров радионуклидов, полученных в фотоядерных реакциях в области энергий 10–35 МэВ с шагом 1 МэВ на тормозном  $\gamma$ -пучке бетатрона. Временные режимы, т.е. время облучения, паузы и измерения выбрали в соответствии с периодом полураспада образующихся радионуклидов. В качестве мишени использован  $\text{ZrO}_2$  высокой чистоты (99.9%) прессованный в виде диска с диаметром 20 мм. Каждый образец  $\text{ZrO}_2$  помещался между двумя медными фольгами (в случае нейтронного облучения использовали алюминиевую фольгу). Масса образцов составляла 1–3 г. Время облучения нейтронным потоком с энергией 14.1 МэВ составляет 0,5–1 ч.

Наведенную активность мишеней измеряли на  $\gamma$ -спектрометре фирмы “Canberra”, состоящем из германиевого детектора HPGe (с относительной эффективностью 15%, разрешением для линии  $^{60}\text{Co}$  1332 кэВ – 1.8 кэВ), цифрового анализатора DSA 1000 и персонального компьютера с программным пакетом Genie 2000 для набора и обработки  $\gamma$ -спектров. Гамма-спектры мишеней начинали измерять после паузы 5–60 мин в течение 30–120 мин.

Заселение изомерного и основного уровней идентифицировали по  $\gamma$ -линиям. Спектроскопические характеристики ядер-продуктов реакций  $(\gamma, n)$  и  $(n, 2n)$ , необходимые для обработки результатов измерений, взяты из [5,6] и приведены в табл. 1, схема распада показана на рис. 1. где  $F$  – спин и четность уровня,  $T_{1/2}$  – период полураспада ядра,  $I_\gamma$  – интенсивность  $\gamma$ -квантов данной энергии на распад,  $p$  – коэффициент ветвления  $\gamma$ -перехода.

Таблица 1. Спектроскопические характеристики ядер-продуктов реакции ( $\gamma, n$ ) и ( $n, 2n$ )

Ядро-продукт	J <sup>π</sup>	T <sub>1/2</sub>	E <sub>γ</sub> , keV	I <sub>γ</sub> , %	P
<sup>89m</sup> Zr	1/2 <sup>-</sup>	4,18 мин	511,00	2,80	0,94
<sup>89m</sup> Zr	1/2 <sup>-</sup>	4,18 мин	587,80	93,00	0,94
<sup>89m</sup> Zr	1/2 <sup>-</sup>	4,18 мин	1508,00	6,70	0,94
<sup>89g</sup> Zr	9/2 <sup>+</sup>	78,8 ч	511,00	47,00	-
<sup>89g</sup> Zr	9/2 <sup>+</sup>	78,8 ч	909,10	99,00	-

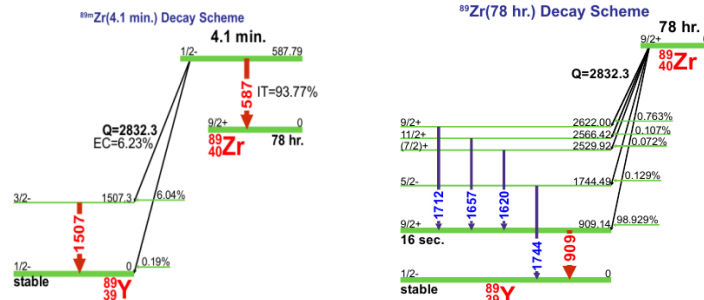


Рис. 1. Схема распада <sup>89</sup>Zr

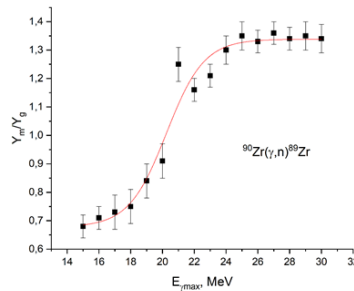
Результаты и их обсуждение

Реакция ( $\gamma, n$ )

Полученные экспериментальные изомерные отношения выходов и сечений реакций ( $\gamma, n$ ) и ( $n, 2n$ ) на ядре <sup>90</sup>Zr приведены на рисунке 2 и в табл. 2 и 3.

Рис. 1. Энергетические зависимости изомерных отношений выходов реакций <sup>90</sup>Zr( $\gamma, n$ )<sup>89m,g</sup>Zr

Абсолютная ошибка измерений изомерных отношений выходов определяется статистической погрешностью счетов в фотопике измеряемой  $\gamma$ -линии и эффективностью регистрации  $\gamma$ -излучения.



Как видно из рисунка 2, значение возрастало от порога реакции примерно до 28 МэВ, что обусловлено, по-видимому, увеличением числа каскадных  $\gamma$ -переходов с ростом энергии возбуждения, а также моментов, уносимых квазипрямыми нейтронами. При энергии  $E_\gamma \sim 21$  МэВ ( $E_{\gamma, \text{max}} \geq E_m + \Gamma$ , где  $E_m$  - положение максимума;  $\Gamma$  - полуширина гигантского дипольного резонанса) наступало насыщение кривой d, поскольку дальнейшее увеличение плотности уровней, возможно, не меняло заметным образом вероятность образования каскадов, приводящих к метастабильным состояниям. Полученные результаты в пределах погрешности измерений согласуются с данными других работ, полученных при фиксированных энергиях. В диапазоне энергии 29-35 МэВ изомерные отношения для <sup>90</sup>Zr измерены впервые. Для аппроксимации экспериментальных данных по изомерным отношениям выходов использовали сигмоидальную (ступенькообразную) функцию Больцмана (сплошная кривая).

В табл. 2 данные об изомерных отношениях выходов реакций приведены в виде  $d = Y_m/Y_g$ . В области энергий возбуждения выше гигантского дипольного резонанса, т.е. в области 25–35 МэВ, энергетическая зависимость изомерных отношений выходов реакции <sup>90</sup>Zr( $\gamma, n$ )<sup>89m,g</sup>Zr определена впервые.

Таблица 2. Изомерные отношения выходов реакций <sup>90</sup>Zr( $\gamma, n$ )<sup>89m,g</sup>Zr

E, МэВ	Y <sub>m</sub> /Y <sub>g</sub>	Источник
16,5	0,70±0,04	7
18,0	0,75±0,05	7
20,5	0,92±0,06	7
30	0,61	8
22	1,44±0,02	8
19	1,46±0,05	9
25	1,21±0,04	9
30	1,35±0,05	10
40	0,85±0,4	11
25	1,35±0,05	Настоящая работа
30	1,34±0,05	Настоящая работа

Как видно из табл. 2, результаты, полученные нами для реакций ( $\gamma, n$ ) в пределах погрешностей согласуются с данными следующих работ [8,10]. В области энергий E>25 МэВ энергетическая зависимость изомерных отношений выходов получены нами впервые.

Реакция ( $n, 2n$ )

В случае реакции ( $n, 2n$ ) (табл. 3). Здесь также приведены расчетные данные сечения реакции, проведенные с помощью программного пакета TALYS-1.6[12,13]. Результаты теоретических расчетов приведены для сечений образования изомерных состояний, относительно результатов других работ несколько занижены. В случае сечений образования основного состояний значение в пределах погрешностей измерений согласуются.

Для получения абсолютных значений сечений основного и изомерного состояний использовались методы сравнения выходов исследуемой и мониторинжной реакции. В качестве мониторинжной реакции использовали <sup>27</sup>Al( $n, \alpha$ )<sup>24</sup>Na ( $T_{1/2}=15$  ч,  $E_\gamma=1368$  кэВ), сечение которой равно:  $\sigma_m = 121.57 \pm 0.57$  мбн при  $E_n = 14.1$  МэВ [14].

Абсолютная ошибка изомерных отношений сечений реакций определяется статистической погрешностью счетов в фотопике измеряемой  $\gamma$ -линии, эффективностью регистрации  $\gamma$ -излучения и ошибкой значений сечений мониторов.

Таблица 3. Сечение реакции  $^{90}\text{Zr}(n,2n)^{89m,g}\text{Zr}$

$E_n$ , МэВ	$\sigma_m$ , мб	$\sigma_g$ , мб	$\sigma_m/\sigma_g$	Источник
14.8	130±12	387±35	-	15
14.1	76±7	580±38	0,131±0,012	Настоящая работа
14*	77	516,96	0,149	Настоящая работа
14,5*	120,21	610,54	0,197	Настоящая работа

Примечание. \*Расчет сечений проводили по программе TALYS-1.6.

Для расчета изомерных отношений выходов использовали программный пакет TALYS-1.6. Общая схема протекания реакции предполагается следующей: вначале происходит поглощение дипольного  $\gamma$ -кванта на ядре с образованием составного ядра, затем происходит испарение нейтрона с образованием возбужденного состояния конечного ядра. Возбуждение дочернего ядра снимается каскадным испусканием  $\gamma$ -квантов с образованием в итоге основного или изомерного состояния конечного ядра.

Плотность ядерных уровней рассчитывали по формуле Бета-Блоха [2], спиновая часть которой имеет вид

$$\rho(J) = (2J + 1) \exp\left[-(J + 1/2)^2 / 2\sigma^2\right] \quad (1)$$

Улучшить количественное согласие расчетов с экспериментом удалось при фиксации параметра спинового ограничения  $\sigma$ . При этом удовлетворительное согласие достигается при  $\sigma = 2.5\hbar$ .

**Заключение.** Из анализа данных, приведенных в табл. 2 и 3, следует, что экспериментальные исследования возбуждения изомерных состояний в фотоядерных реакциях типа  $(\gamma,n)$  на ядре  $^{90}\text{Zr}$  проводили в основном в области энергий 10–25 МэВ, т.е. в области гигантского дипольного резонанса. В области энергий, выше гигантского резонанса, энергетическая зависимость изомерных отношений мало изучена. Благодаря этим исследованиям, можно получить информацию о плотности ядерных уровней и о вкладе прямых процессов в механизм фотоядерных реакций в данной области энергий.

**Благодарности.** В заключение автор выражает благодарность М. Каюмову и О. Жураеву за облучение образцов на нейтронном генераторе, Ж. Рахмонову за помощь в измерениях, С.В. Артемову за полезные обсуждения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. A.S. Danagulyan, G.H. Hovhannisyan, T.M. Bakhshiyani, R.H. Avagyan, A.E. Avetisyan, I.A. Kerobyan, R.K. Dallakyan. Physics of Atomic Nuclei 78, No.4, 447 (2015).
2. V.M. Mazur. Fiz. Elem. Chastits At. Yadra 31, No.2, 1043 (2000); [Phys. Part. Nucl. (Engl. Transl.) 31, No.2, 188 (2000)].
3. S.R. Polvonov. J. Nucl. Phys. 90, No.5, 567 (2013).
4. <http://www.inp.uz>.
5. R.B. Firestone, V.S. Shirley, C.M. Baglin, Table of isotopes CD-ROM, 8-th Ed. (1996).
6. R. Vänška, R. Rieppo. The experimental isomeric cross-sections ratio in the nuclear activation technique. Nucl. Instrum. Methods **179**, 525-532 (1981).
7. Hoang Duc Luc, Tran Duc Thiep, Truong Thi An, Phan An. Isomeric yield ratios in the production of Sm-143, Nd-141, Zr-89 and Pd-109 by 15 - 20 MeV bremsstrahlung. Bulgarian J. of Physics, 1987, Vol. 14, part 2, p.15.
8. Kato T. – J. Radioanal. Chem., 1973, v.16, N1, p.307.
9. Antonov A.D., Balabanov N.P., Belov A.G., Kondev F.G., Peres G., Tonchev A.P., Khristov Kh.G. //Isomeric ratios in the reaction  $(\gamma, n)$  for nuclei in the range  $A=70-125$ // Conf.Nucl.Spectroscopy Nucl.Struct., Minsk 1991.
10. Palvanov S.R., Razhabov O. Isomeric yield ratios of photonuclear reactions Eg-max 25 and 30 MeV. Atomnaya Energiya v.87, p.75, – 1999.
11. Demekhina N.A., Danagulyan A.S., Karapetyan G.S. Isomeric ratio analysis in  $(\gamma,n)$  and  $(\gamma,p)$  reactions at giant-resonance energy range. Yadernaya Fizika, 2002, vol.65, part 2, p.390.
12. A.J. Koning, S. Hilaire, M.C. Duijvestijn TALYS-1.0. Proc. of the Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology. Eds. O. Bersillon, F. Gunsing, E. Bauge, R. Jacqmin, S. Leray ND 2007 (Nice, France April 22 -27, 2007). EDP Sciences 211-214 (2008).
13. [www.talys.eu](http://www.talys.eu)
14. Filatenkov A.A., Chuvaev S.V., Aksenov V.N. and Jakovlev V.A. Systematic measurement of activation cross sections at neutron energies from 13.4-14.9 MeV.
15. Sothras S.L., Salaita G.N.  $(n,2n)$  cross sections at 14.8-MeV on some closed shell nuclides. //Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry. V.40, pp.585. 1978.



УДК: 524.45, 520.87

**Меҳринисо ПАРМАНОВА,**

Базовый докторант Астрономический институт АН РУз

E-mail: mehriniso@astrin.uz

**Ренат ГАЙСИН,**

Старший научный сотрудник Астрономический институт АН РУз

**Ривкат КАРИМОВ,**

Старший научный сотрудник Астрономический институт АН РУз

**Отабек БУРХОНОВ,**

старший научный сотрудник, заведующий лабораторией «Галактическая астрономия», Астрономический институт АН РУз

Рецензент: Доцент Самаркандского государственного университета Р.Эибурев

### ИЗУЧЕНИЕ ЗВЕЗД В ПОЛЕ РЗС STOCK 2 ПО КАТАЛОГУ GAIA

Аннотация

Проведен отбор 2393 вероятных звезд скопления Stock 2 и их классификация по спектральным классам, определено среднее гелиоцентрическое расстояние – 452 пк, изохронный возраст около 398 млн лет ( $\log(\text{age}) = 8.60$ ), среднее покраснение в полосах пропускания Gaia  $E(\text{BP-RP}) = 0.5059$ , среднее селективное поглощение  $A_G = 0.8625$  и металличность  $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.008$  dex.

**Ключевые слова.** Рассеянные скопления звезд, Stock2, диаграмма цвет-величина, астрометрия.

### GAIA KATOLOGIDAN TYUT STOCK 2 MAYDONIDAGI YULDUZLARNI O'RGANISH

Аннотация

Stock 2 tarqoq yulduz to'dasining 2393 ta ehtimoliy a'zo yulduzlari tanlab olindi va ularni spektral sinflar bo'yicha tasniflash amalga oshirildi, o'rtacha geliotsentrik masofa 452 pc, izoxron yoshi taxminan 398 million yil ( $\log(\text{age}) = 8.60$ ), o'rtacha qizarishi Gaia  $E(\text{BP-RP}) = 0.5059$ , o'rtacha selektiv yutilishi  $A_G = 0.8625$  va metalligi  $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.008$  dex ekanligi aniqlandi.

**Kalit so'zlar.** TYUT tarqoq yulduz to'dasi, Stok 2, rang-kattalik diagrammasi, astrometriya.

### STUDYING STARS IN THE FIELD OF STOCK 2 OSC USING THE GAIA CATALOGUE

Annotation

A selection of 2393 probable members of the open cluster Stock 2 was carried out and their classification into spectral classes was determined. The average heliocentric distance was found to be 452 parsecs, and the isochronic age was approximately 398 million years ( $\log(\text{age}) = 8.60$ ). The average reddening in Gaia passbands was  $E(\text{BP-RP}) = 0.5059$  and the average selective absorption  $A_G = 0.8625$ . The metallicity was found to have a value of  $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.008$  dex.

**Key words.** Open cluster of stars (OSC), Stock 2, color-magnitude diagram, astrometry.

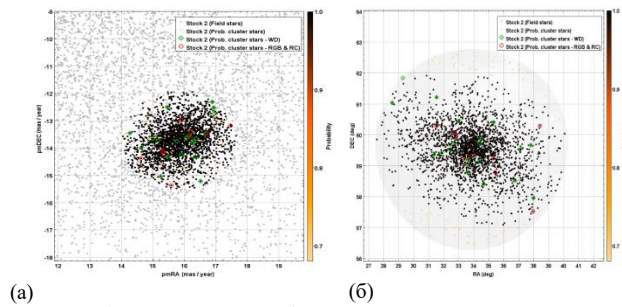
**Введение.** Рассеянные звездные скопления являются уникальными объектами для изучения звездного населения Нашей Галактики. Они представляют собой связанные гравитацией группы звезд численностью от нескольких десятков до нескольких десятков тысяч звезд, имеющих общее происхождение место звездообразования. Что в свою очередь обусловило их практически одинаковый возраст, химический состав и расстояние, на котором они расположены, а их различия объясняются только их массами. Изучение звездного состава требует однозначного определения принадлежности звезд к изучаемому рассеянному звездному скоплению. В настоящее время разработаны и используются различные методы определения принадлежности звезд к скоплению, но наиболее достоверным остается астрометрический метод отбора. В связи с чем, опубликованные каталоги астрометрических данных Gaia DR3 [1], представляющие собой каталог для большого количества источников с высокоточными измерениями астрометрических параметров, являются очень полезным инструментом астронома-исследователя. Они представляют собой весьма информативный 5D-параметрический наблюдательный обзор звездного населения значительного объема Нашей Галактики, заново открывающей для научного сообщества свои тайны и заставляющей корректировать устоявшиеся накопленные знания.

**Литературный обзор.** В данной статье мы представляем работу по изучению молодого массивного рассеянного звездного скопления (РЗС) Stock 2 [2], [3], расположенного в созвездии Кассиопея ( $RA = 02^h 14^m 42.0^s$  DEC =  $+59^\circ 29' 00''$ ) в спиральном рукаве Ориона и входящего состав ближайших к Солнцу (до ~600 пк) РЗС [4]. Скопление открыто Юргеном Стоком (Jürgen Stock) в 1956 году [2] в Межамериканской обсерватории Серро-Тололо (СТЮ).

Близкое гелиоцентрическое расположение без сомнений подразумевает большие возможности для детального исследования РЗС, однако угловые размеры участка неба, по которому распределено Stock 2 значительно усложняют не только наблюдение с наземных телескопов, но и увеличивает общий объем точек данных в каталоге Gaia, необходимых для охвата РЗС. Из исследования [5] известно, что радиус ядра Stock 2 (расположение 50% от наиболее вероятных звезд РЗС ~1157) оценивается в  $0.851^\circ$ . Кроме ядра для охвата периферии РЗС и звезд поля необходимократно увеличить область исследования. Становится понятно, что для выполнения работы придется оперировать параметрами почти нескольких миллионов звезд, что незамедлительно сказывается на затратах по времени и мощностях вычислений.

**Методология исследования.** Для отсева звезд скопления от звезд поля использовалась классическая методика выделения по векторной диаграмме собственных движений доступными в TOPCAT [6]. Необходимый набор данных GAIA DR3 размером поля  $6.5^\circ \times 6.5^\circ$  (рис. 1, б) был подготовлен с использованием web-сервиса Clusterix [7] с фильтрацией по максимальному значению звездных величин  $20.5^m$  и по одному из параметров качества астрометрии – RUWE [8], [9], [10] не превышающем порога в 1.4. Подобный отбор проводился для того, чтобы получить наиболее полную выборку и охватить как можно большую область вокруг РЗС Stock 2, с учетом ограничений сервиса Clusterix.

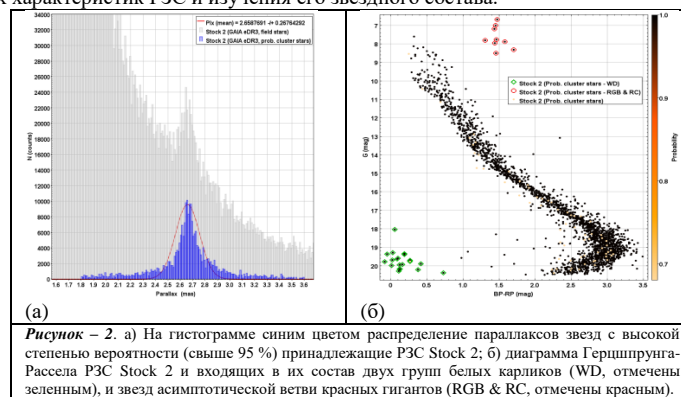
Как уже подчеркивалось выше хоть близкое расположение звезд РЗС Stock 2 отчетливо проявляется на векторной диаграмме собственных движений (см рис. 1а), тем не менее для надежности мы использовали априорные значения центра из работы [11]. Радиус выделяемой группы звезд РЗС и близких звезд поля подбирался с запасом и составил  $1.9 \text{ mas/yr}$ .



**Рисунок – 1.** а) Векторная диаграмма собственных движений, выделенных вероятных звезд скопления в области с центром в P3C Stock 2; б) Карта области P3C с отмеченными положениями вероятных звезд Stock 2 и входящих в их состав двух групп белых карликов (WD, отмечены зеленым), и звезд ветви красных гигантов (RGB & RC, отмечены красным).

**Анализ и результаты.** Построена и изучена векторная диаграмма P3C, выделены вероятные члены скопления, численность которых составил 2393 звезды, что больше, чем список вероятных членов скопления в работе [5]; определены их средние значения собственных движений и параллакса ( $\mu_{\alpha} \cos \delta = 15.8379 \pm 0.1556 \text{ mas/yr}$ ,  $\mu_{\delta} = -13.7252 \pm 0.1556 \text{ mas/yr}$ ,  $Plx = 2.6587 \pm 0.2676 \text{ mas}$  (рис. )), что хорошо сочетается со значениями определенными в работе [5] ( $\mu_{\alpha} \cos \delta = 15.845 \pm 0.69 \text{ mas/yr}$ ,  $\mu_{\delta} = -13.698 \pm 0.642 \text{ mas/yr}$ ,  $Plx = 2.641 \pm 0.082 \text{ mas}$ ). Различия в полученных оценках можно объяснить используемыми методами отбора вероятных членов скопления.

Карта области P3C с отмеченными положениями вероятных звезд Stock 2 и входящих в их состав двух групп белых карликов (WD, отмечены зеленым), и звезд ветви красных гигантов (RGB & RC, отмечены красным, см. рисунки 1а и 1б, 2б и 3а). Гистограммы распределения собственных движений и параллаксов вероятных членов скопления приведены на рисунке 2а. Диаграмма показатель цвета – звездная величина приведена на рисунке 2б. Проведенный отбор вероятных членов скопления будет использован для определения астрофизических характеристик P3C и изучения его звездного состава.



**Рисунок – 2.** а) На гистограмме синим цветом распределение параллаксов звезд с высокой степенью вероятности (свыше 95 %) принадлежащие P3C Stock 2; б) диаграмма Герцшпрунга-Рассела P3C Stock 2 и входящих в их состав двух групп белых карликов (WD, отмечены зеленым), и звезд асимптотической ветви красных гигантов (RGB & RC, отмечены красным).

Для расчета вероятности принадлежности выделенных звезд нами использовался один из классических методов кластеризации DBSCAN [12], реализованного на языке программирования Python [13]. По координатам и величинам собственных движений в области P3C Stock 2 обнаружено 2325 звезд, являющимися звездами скопления с вероятностью выше 95 %, что больше, чем известно из опорных каталогов [2], [5], [11], [14].

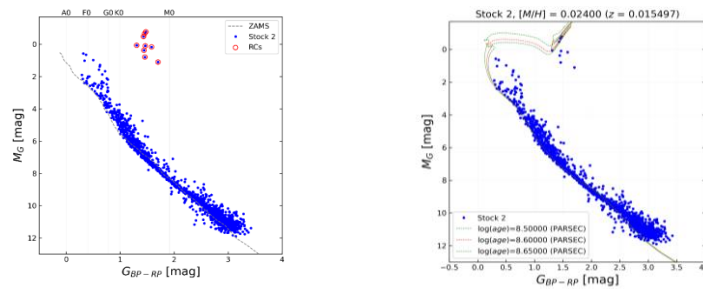
Используя каталог [15] скорректированных геометрических и фотогеометрических расстояний для 1.5 млрд звезд на основе наблюдений Gaia EDR3, нами были получены расстояния выделенных вероятных звезд скопления и вычислены их абсолютные звездные величины, представленные на рисунке 3а и 3б.

Для звезд ветви красных гигантов (RGB & RC) данные о покраснении и поглощении были получены отдельно из работы [16] так как отсутствовали в [1] и прочих каталогах. В статье [16] используются восемь независимых источников оценок покраснения и поглощения для примерно 60 000 звезд Главной последовательности Gaia DR1 Tycho–Gaia Astrometric Solution (TGAS) моложе 3 млрд лет с относительной ошибкой параллакса Gaia менее 0.1, на основе точной фотометрии Gaia, Tycho-2, 2MASS и WISE. Наличие данных звезд на диаграмме цвет-абсолютная величина позволила точнее спозиционировать изохрону и оценить изохронный возраст в пределах  $\log(\text{age}) = 8.60$ .

К сожалению, данные о покраснении, поглощении и расстоянии по выделенной группе звезд вероятных белых карликов на диаграмме Герцшпрунга-Рассела, обозначенной как WD (отмечены зеленым, на рис. 1а, 1б и 2б) отсутствовали полностью или были фрагментарны. Установить недостающие данные по другим независимым исследованиям так же не удалось, вероятно из-за весьма слабого свечения объектов (ниже  $19^m$ ) наблюдения их наземными телескопами так же отсутствовали. Вероятно, более детальная информация по этим объектам появится в поздних релизах Gaia.

Линия звезд Главной последовательности (ZAMS) и градуировка спектральных классов в цветах фотометрии Gaia получены из теоретических исследований [17].

Среднее соотношение металлов к водороду  $[M/H] = 0.0240 \text{ dex}$  с  $\tau = 0.015497$ , что с условием параметров задаваемых для  $z_0 \approx 0.0152$  в [18], соответствует  $[Fe/H] = 0.008 \text{ dex}$ , что в свою очередь сильно отличается от величин из опорных работ, например, [5], что скорее всего связано с значительно большим количеством отобранных вероятных звезд P3C Stock 2.



(a)

(б)

**Рисунок – 3.** а) диаграмма Герцшпрунга-Рассела в значениях абсолютных звездных величин в полосах пропускания Gaia. Синими точками обозначены положение звезд РЗС Stock 2 на линии Главной последовательности (ZAMS), показанной черной штриховой линией, по верхней оси отложены соответствующие нулевые значения спектральных классов [17]. Красными кружками отмечена группа вероятных звезд и звезд асимптотической ветви красных гигантов RGB & RCs; б) диаграмма Герцшпрунга-Рассела РЗС Stock 2 с подобранными изохронами PARSEC.

**Заключение.** Используемая нами методика фильтрации позволяет работать с большими объемами данных ближайших к Солнцу РЗС с большими угловыми размерами. Использование надежного проверенного алгоритма DBSCAN по-прежнему позволяют показывать сопоставимые результаты с новыми данными Gaia. Построена и изучена векторная диаграмма РЗС и выделены вероятные звезды скопления, набор составил 2393 звезды с вероятностью  $P > 0.8$ , для которых вычислены абсолютные звездные величины и предварительно обозначены спектральные классы, а значит и диапазоны эффективных температур и другие важные астрофизические параметры звезд РЗС. Определены среднее гелиоцентрическое расстояние – 452 пк, изохронный возраст около 398 млн лет ( $\log(\text{age})=8.60$ ), среднее покраснение в полосах пропускания Gaia  $E(BP-RP)=0.5059$ , среднее селективное поглощение  $A_G=0.8625$  и металличность  $[Fe/H]=0.008$  dex. По результатам проведенной работы была подготовлена база для проверки вероятных звезд скопления для дальнейшего исследования и поиска кандидатов в новые переменные.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Gaia Collaboration et al. Gaia Data Release 3. Summary of the content and survey properties // *Astron. Astrophys.* 2023. Vol. 674. P. A1.
2. Cantat-Gaudin T. et al. Painting a portrait of the Galactic disc with its stellar clusters // *Astron. Astrophys.* 2020. Vol. 640. P. A1.
3. Spagna A. et al. The nearby strongly reddened open cluster Stock2 . A new study based on accurate proper motions and 2MASS photometry // *Mem. Della Soc. Astron. Ital.* 2009. Vol. 80. P. 129.
4. Stock J. Magnitudes and Colors for Stars in Two New Galactic Clusters. // *Astrophys. J.* 1956. Vol. 123. P. 258.
5. Dias W.S. et al. Updated parameters of 1743 open clusters based on Gaia DR2 // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 2021. Vol. 504. P. 356–371
6. Taylor M.B. TOPCAT & STIL: Starlink Table/VOTable Processing Software. 2005. Vol. 347. P. 29.
7. Balaguer-Núñez L. et al. Clusterix 2.0: a virtual observatory tool to estimate cluster membership probability // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 2020. Vol. 492. P. 5811–5843.
8. 14.1.2 ruwe• 14.1 Main tables Chapter 14 Datamodel description Part V Gaia archive Gaia Data Release 2 Documentation release 1.2 [Electronic resource]. URL: [https://gea.esac.esa.int/archive/documentation/GDR2/Gaia\\_archive/chap\\_datamodel/sec\\_dm\\_main\\_tables/ssc\\_dm\\_ruwe.html](https://gea.esac.esa.int/archive/documentation/GDR2/Gaia_archive/chap_datamodel/sec_dm_main_tables/ssc_dm_ruwe.html) (accessed: 05.04.2024).
9. Fabricius C. et al. Gaia Early Data Release 3. Catalogue validation // *Astron. Astrophys.* 2021. Vol. 649. P. A5.
10. Lindegren L. et al. Gaia Early Data Release 3. The astrometric solution // *Astron. Astrophys.* 2021. Vol. 649. P. A2.
11. Cantat-Gaudin T. et al. Painting a portrait of the Galactic disc with its stellar clusters // *Astron. Astrophys.* 2020. Vol. 640. P. A1.
12. Martin Ester H.-P.K. A Density-Based Algorithm for Discovering Clusters in Large Spatial Databases with Noise [Electronic resource] // AAAI. URL: <https://aaai.org/papers/kdd96-037-a-density-based-algorithm-for-discovering-clusters-in-large-spatial-databases-with-noise/> (accessed: 16.10.2024).van Rossum G. Python reference manual: R 9525. 1995.
13. Hunt E.L., Reffert S. Improving the open cluster census. II. An all-sky cluster catalogue with Gaia DR3 // *Astron. Astrophys.* 2023. Vol. 673. P. A114.
14. Bailer-Jones C.A.L. et al. Estimating Distances from Parallaxes. V. Geometric and Photogeometric Distances to 1.47 Billion Stars in Gaia Early Data Release 3 // *Astron. J. IOP*, 2021. Vol. 161. P. 147.
15. Gontcharov G.A., Mosenkov A.V. Verifying reddening and extinction for Gaia DR1 TGAS main sequence stars // *Mon. Not. R. Astron. Soc. OUP*, 2017. Vol. 472. P. 3805–3820.
16. Majaess D.J. et al. Deep Infrared ZAMS Fits to Benchmark Open Clusters Hosting Delta Scuti Stars // *J. Am. Assoc. Var. Star Obs. JAAVSO*. 2011. Vol. 39. P. 219.
17. Bressan A. et al. PARSEC: stellar tracks and isochrones with the PAdova and TRieste Stellar Evolution Code // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 2012. Vol. 427. P. 127–145.





UDK: 533.9; 536-33; 544.272

**Otamurot RAJABOV,**

*O'zbekiston Respublikasi Fanlar Akademiyasi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti stajyor tadqiqotchisi*

*E-mail: otamurot.rajabov@outlook.com*

**Sirojiddin MIRZAYEV,**

*O'zbekiston Respublikasi Fanlar Akademiyasining vitse-prezidenti, professor*

**Umedjon XALILOV,**

*O'zbekiston Respublikasi Fanlar Akademiyasi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti bosh ilmiy xodimi, f.-m.f.d*

**Maksudbek YUSUPOV,**

*"TIQXMMI" Milliy tadqiqot universiteti huzuridagi Fundamental va Amaliy Tadqiqotlar Instituti laboratoriya mudiri, f.-m.f.d*

*E-mail: maksudbek.yusupov@outlook.com*

*F.-m.f.d. X.Raximov taqrizi asosida*

### SOVUQ ATMOSFERIK PLAZMANING FARMATSEVTIK OQAVA SUVLAR TARKIBIDAGI OFLOKSATSIN ANTIBIOTIGIGA TA'SIRINI MODELLASHTIRISH

Annotatsiya

Antibiotiklardan keng foydalanish oqava suvlar ifloslanishining ortishiga olib keldi. Sovuq atmosferik plazma (SAP) an'anaviy usullarga qaraganda antibiotiklarni parchalashda samaraliroq bo'lib chiqdi. Biroq, SAP ta'sirining asosiy mexanizmlari hali to'liq o'rganilmagan. Ushbu tadqiqotda ofloksatsin (OFL) antibiotikining SAP yordamida parchalanish mexanizmlari reaktiv molekulyar dinamika usuli orqali o'rganildi. Xususan, SAP tomonidan hosil qilingan reaktiv zarralar sifatida kislorod atomi tanlandi va OFL bilan o'zaro ta'siri atomar darajada tadqiq etildi. Natijalar OFLning metil va metilen guruhlarida, ayniqsa, gidroksil va epoksid guruhlarining shakllanishini, shuningdek, tizimdan suv va karbonat angidridining ajralib chiqishini ko'rsatdi.

**Kalit so'zlar:** oqava suvlar, ftorxinolon, ofloksatsin, sovuq atmosferik plazma, reaktiv kislorod zarralari, molekulyar dinamika.

### MODELING THE EFFECT OF COLD ATMOSPHERIC PLASMA ON THE ANTIBIOTIC OFLOXACIN IN PHARMACEUTICAL WASTEWATER

Annotation

The widespread use of antibiotics has led to an increase in the pollution of wastewater. Cold atmospheric plasma (CAP) has proven to be more effective than conventional methods in degrading antibiotics. However, the fundamental mechanisms of CAP's effects are still not fully understood. This study investigates the degradation mechanisms of the antibiotic ofloxacin (OFL) using the reactive molecular dynamics method. Specifically, oxygen was chosen as the reactive species generated by CAP, and its interaction with OFL was studied at the atomic level. The results showed the formation of hydroxyl and epoxy groups in the methyl and methylene regions of OFL, as well as the release of water and carbon dioxide from the system.

**Key words:** wastewater, fluoroquinolone, ofloxacin, cold atmospheric plasma, reactive oxygen species, molecular dynamics.

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ХОЛОДНОЙ АТМОСФЕРНОЙ ПЛАЗМЫ НА АНТИБИОТИК ОФЛОКСАЦИН В ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ СТОЧНЫХ ВОДАХ

Аннотация

Широкое использование антибиотиков привело к увеличению загрязнения сточных вод. Холодная атмосферная плазма (ХАП) оказалась более эффективной для разложения антибиотиков по сравнению с традиционными методами. Однако основные механизмы действия ХАП до сих пор не полностью изучены. В данном исследовании изучаются механизмы разложения антибиотика офлоксацина (ОФЛ) с использованием метода реакционной молекулярной динамики. В частности, кислород был выбран в качестве реактивного вещества, образуемого ХАП, и его взаимодействие с ОФЛ было исследовано на атомарном уровне. Результаты показали образование гидроксильных и эпоксидных групп в метильных и метиленовых участках ОФЛ, а также выделение воды и углекислого газа из системы.

**Ключевые слова:** сточные воды, фторхинолоны, офлоксацин, холодная атмосферная плазма, частицы активного кислорода, молекулярная динамика.

**Kirish.** Antibiotiklar dunyo bo'ylab eng keng tarqalgan va ko'p ishlatiladigan dori vositalaridan biri hisoblanadi [1]. Metabolizm jarayonidan so'ng antibiotiklar, ularning sekin parchalanishi sababli, ko'p miqdorda suv muhitiga chiqariladi. Bu esa ularning oqava suvlarda uzoq muddat turib qolishiga olib keladi [2]. Natijada oqava suvlardagi bakteriyalarning rezistentligi (ya'ni, antibiotiklarning ularni yo'q qilishda samarali bo'lmay qolishligi) oshadi. Undan tashqari, ushbu oqava suvlar tirik organizm tomonidan iste'mol qilinganda uning endokrin tizimiga buzuvchi ta'sir ko'rsatishi kabi salbiy oqibatlariga olib kelishi mumkin [3,4]. Shuning uchun, antibiotiklarni oqava suvlardan tozalash muhim vazifalardan hisoblanadi [5].

Kimyoviy tuzilishi, ta'sir qilish mexanizmi va faollik doirasi (ya'ni, mikroorganizmlarni yo'q qilish sohasi) bo'yicha antibiotiklar turli xil guruhlariga (masalan,  $\beta$ -laktam, ftorxinolon, tetratsiklin, makrolid va aminoglikozidlarga) bo'linishi mumkin [6]. Shulardan ftorxinolon (FX) turli infeksiyalarni davolashda butun dunyoda keng qo'llaniladigan antibiotiklardan biridir [7]. Shunga qaramay, FX antibiotiklarining inson va hayvonlarda so'rinish qobiliyati juda past bo'lganligi sababli ularning ko'p (~70% gacha) qismi atrof-muhitga (asosan, oqava suvlarga) chiqariladi [8].

FX antibiotiklar guruhidagi ofloksatsin (OFL) keng qo'llaniladigan antibiotiklardan biri bo'lib, uning dengiz va oqava suvlarga chiqarilishi ekotizimga salbiy ta'sir ko'rsatmoqda [9]. Ayniqsa Xitoy kabi mamlakatlarda bu muammo yechilishi lozim bo'lgan dolzarb masalalardan biriga aylanmoqda [10,11]. Xususan, OFLning faqat 10% qismi metabolizmga uchrab, bakteritsid ta'sir ko'rsatsa, qolgan 90% qismi to'g'ridan-to'g'ri o'z holicha oqava suvlarga chiqariladi [12,13].

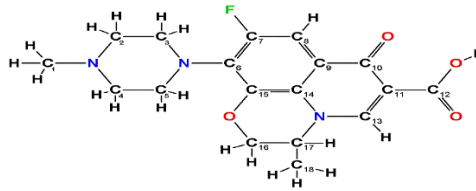
Oqava suvlardagi OFLni tozalashda an'anaviy usullar, masalan, adsorbsiya, fotokataliz, membranali filtrlash va biologik tozalash usullari qo'llaniladi [14]. Bu usullar faqat qisman samaradorlikka ega bo'lib, antibiotiklarni (xususan, OFLni) to'liq bartaraf etish uchun yetarli emas [15]. Shu sababli, so'nggi yillarda an'anaviy va zamonaviy usullarni birlashtiruvchi innovatsion yondashuvlar rivojlanmoqda [16,17]. Bunday yondashuvlardan biri xona haroratiga yaqin haroratda va atmosferik bosimda ishlovchi plazma, yoki oddiygina sovuq atmosferik plazma

(SAP) bo'lib, u suvdagi ifloslantiruvchi moddalarni, jumladan, antibiotiklarni samarali ravishda kimyoviy parchalaydi [18]. Nguyen va boshqalar [19] SAPdan foydalanib shifoxonalardan chiqadigan oqava suvlarda mavjud bo'lgan antibiotiklar, jumladan FXlar sinfiga kiruvchi OFL va siprofloksatsin, shuningdek  $\beta$ -laktam sinfiga tegishli bo'lgan amoksitsillinning parchalanishini eksperimental tadqiq etishgan. Tadqiqot natijalari shuni ko'rsatganki, 30 kV kuchlanishli SAP bilan 15 daqiqalik tozalash jarayonida siprofloksatsinning deyarli to'liq yo'q qilinishi, OFL va amoksitsillinning esa 72% dan ortiq qismi parchalanganligi kuzatilgan. Sarangapani va boshqalar [20] SAPdan foydalanib, oqava va go'sht tozalashdan chiqqan suvlarda ko'p miqdorda aniqlangan ikkita FX antibiotiklari – OFL va siprofloksatsinni yuqori samaradorlik bilan yo'q qilish bo'yicha tadqiqot olib borishgan. Natijalar SAP ushbu antibiotiklarni muvaffaqiyatli parchalashini hamda ularning faolligini sezilarli darajada pasayishini ko'rsatgan.

Yuqoridagi kabi ko'plab ilmiy tadqiqotlar olib borilayotganiga qaramasdan, SAPning FX antibiotiklariga, xususan, OFLga degradativ ta'sirini tushuntiruvchi tub mexanizmlar hali ham noaniq bo'lib qolmoqda. Bu borada kompyuterda modellashtirish tadqiqotlari eksperimental tadqiqotlarni to'ldirib, ular yordamida tushuntirish qiyin yoki imkonsiz bo'lgan jarayonlarni atomar darajada tadqiq etishda muhim rol o'ynaydi [21–27]. Ushbu modellashtirish tadqiqot ishida SAP ning OFL antibiotigiga ta'sirini o'rganish uchun reaktiv molekulyar dinamika (MD) simulyatsiyalari olib borildi. Xususan, SAP hosil qilgan reaktiv kislorod (O) atomi bilan OFL molekulasining o'zaro ta'sir mexanizmlari atomar darajada tadqiq etildi.

**Modellashtirish tafsilotlari.** SAP hosil qilgan O atomi va OFL molekulasida orasidagi o'zaro ta'sirni o'rganish hamda reaksiya mexanizmlarini atomar darajada tushunish uchun zichlik funktsional-zich bog'lash (*ing.*, density functional-tight binding, DFTB) [28] potentsialidan foydalangan holda reaktiv MD simulyatsiyalari olib borildi. Xususan, DFTB ning takomillashtirilgan DFTB3 usulidan foydalanildi [29] hamda ushbu usul uchun maxsus ishlab chiqilgan, organik va biomolekulyar tizimlarni yuqori aniqlikda tasvirlaydigan “3ob-3-1” parametrlar to'plamidan foydalanildi [30,31].

OFL model tizimi (1-rasm) o'lchami  $30 \times 30 \times 30 \text{ \AA}^3$  bo'lgan simulyatsiya qutisi ichida joylashtirildi. Simulyatsiya qutisi yetarlicha katta o'lchamda tanlangan bo'lib, u uchchala Dekart koordinatalari yo'nalishlarida davriy chegara shartlari qo'llanilganligi sababli OFL molekulasini va uning davriy tasvirlari orasida o'zaro ta'sirlarni oldini oldi.



1-rasm. OFL molekulasining kimyoviy tuzilishi. Ushbu molekulaning kislorod (O) atomlari bilan o'zaro ta'sirida ishtirok etishi mumkin bo'lgan barcha uglerod (C) atomlari strukturada raqamlangan.

Model tizim (ya'ni OFL) energiyasi dastlab birlashgan gradient (*ing.*, conjugate gradient) usuli yordamida minimallashtirildi. So'ngra, ushbu tizim 300 ps davomida kanonik (NVT) ansambl yordamida termalizatsiya qilindi. Termalizatsiya jarayonida zarralar soni (N), tizim hajmi (V) va harorati (T) doimiy saqlanib, harorat 300 K atrofida Berendsen termostati [32] yordamida, ulanish doimiysoni 100 fs qilib tanlash orqali, ushlab turildi. Keyin esa OFL model tizimi bilan O atomlari orasidagi o'zaro ta'sirni o'rganish bo'yicha simulyatsiyalar o'tkazildi. Xususan, yuqorida ta'kidlanganidek, OFL atrofida bitta O atomi tasodifiy joylashtirildi; bunda O atomi bilan OFL orasidagi dastlabki bog'lanmagan (ya'ni, Kulon va van der Waals) o'zaro ta'sirlarning oldini olish maqsadida O atomi OFL molekulasidan kamida 5 Å uzoqlikda joylashtirildi.

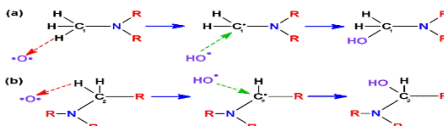
Shundan so'ng, OFLning O atomi bilan o'zaro ta'siri natijasida kimyoviy bog'lar hosil bo'lishi yoki parchalanishi jarayonlari, ya'ni reaksiya mexanizmlari, bo'yicha cheklangan statistik ma'lumotlarni olish uchun 100 ta DFTB-MD simulyatsiyalari o'tkazildi. Shuni ta'kidlash joizki, yuqorida ta'kidlanganidek, har bir MD simulyatsiyasida O atomi OFL atrofida tasodifiy hosil qilindi. O atomlar har birining ta'siri (ya'ni, har bir MD simulyatsiya) 200 ps davom etdi; bu vaqt oralig'i OFL strukturasiidagi kimyoviy bog'larning uzilishi va hosil bo'lishi jarayonlarini kuzatish uchun yetarli bo'ldi. Barcha simulyatsiyalar, ya'ni termalizatsiya va O atomlar ta'sir simulyatsiyalarida 0,5 fs vaqt qadamidan foydalanildi. Simulyatsiyalar DFTB+ paketi yordamida amalga oshirildi [33,34].

**Natijalar va ularning tahlili.** Oldingi bo'limda ta'kidlanganidek, O atomi va OFL molekulasida orasidagi o'zaro ta'sir jarayonlarini atomar darajada o'rganish uchun 100 ta DFTB-MD simulyatsiyalari o'tkazildi. Ushbu simulyatsiyalarda O atomi va OFL molekulasida orasidagi o'zaro ta'sir bo'yicha jami 19 xil reaksiya mexanizmi kuzatildi. Ushbu reaksiya mexanizmlari 1-jadvalda umumlashtirilgan. Jadvaldan ko'rinadiki, reaksiyalarning aksariyati (91%) OFL molekulasidan vodorod (H) atomini ajratib olish bilan boshlanadi (1-11 reaksiyalar). Ushbu H ajratib olish reaksiyalari strukturada asosan (90%) gidroksil guruhlarini hosil bo'lishiga olib keladi (1-10 reaksiyalar). Qolgan H ajratib olish reaksiya mexanizmidagi (11-reaksiya) esa strukturadan H<sub>2</sub>O va CO<sub>2</sub> molekullari ajralib chiqishiga olib keladi. H ajratib olish reaksiyalaridan boshqa (9%) reaksiyalarda (12-19 reaksiyalar), strukturada ayrim bog'larning hosil bo'lishi (*mas.*, C-O-C) va uzilishi (*mas.*, C-C) holatlari kuzatildi. Ushbu reaksiyalarning ayrimlari (4%) molekulada epoksi guruhlarining shakllanishiga ham olib keldi.

1-jadval. O atomi (qizil rangda) va OFL molekulasida orasidagi o'zaro ta'sir reaksiya mexanizmlari. 1-11 reaksiyalarning barchasi molekuladan H ajratib olish reaksiyasi bilan boshlanadi, ammo bu reaksiyalar ikkinchi ustunda ko'rsatilganidek, har xil C atomlarida sodir bo'ladi. 2-ustundagi C atomlarining raqamlanishi 1-rasmga mos keladi. 12-19 reaksiyalarda H ajratib olishdan boshqa reaksiyalar sodir bo'ladi.

№	H ajratib olish reaksiyasi	Sodir bo'lishlar soni	Reaksiya natijasi
1	C <sub>1</sub> H	15	C <sub>1</sub> -OH hosil bo'ldi
2	C <sub>2</sub> H	12	C <sub>2</sub> -OH hosil bo'ldi
3	C <sub>3</sub> H	9	C <sub>3</sub> -OH hosil bo'ldi
4	C <sub>4</sub> H	10	C <sub>4</sub> -OH hosil bo'ldi
5	C <sub>5</sub> H	12	C <sub>5</sub> -OH hosil bo'ldi
6	C <sub>13</sub> H	2	C <sub>13</sub> -OH hosil bo'ldi
7	C <sub>16</sub> H	11	C <sub>16</sub> -OH hosil bo'ldi
8	C <sub>17</sub> H	6	C <sub>17</sub> -OH hosil bo'ldi
9	C <sub>18</sub> H	10	C <sub>18</sub> -OH hosil bo'ldi
10	C <sub>12</sub> OH	3	C <sub>12</sub> -O-H hosil bo'ldi
11	C <sub>12</sub> OH va C <sub>13</sub> H	1	C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub> bog' uzildi, CO <sub>2</sub> and H <sub>2</sub> O hosil bo'ldi
12	–	1	C <sub>10</sub> -O-C <sub>11</sub> hosil bo'ldi, C <sub>10</sub> -C <sub>11</sub> bog' uzildi
13	–	1	C <sub>7</sub> =O bog' hosil bo'ldi, C <sub>7</sub> -F bog' uzilib, F-C <sub>6</sub> bog' hosil bo'ldi
14	–	1	C <sub>6</sub> -O-C <sub>15</sub> hosil bo'ldi, C <sub>6</sub> -C <sub>15</sub> bog' uzildi
15	–	1	C <sub>15</sub> =O bog' hosil bo'ldi, C <sub>6</sub> -C <sub>15</sub> bog' uzilib, C <sub>6</sub> =N <sub>2</sub> bog' hosil bo'ldi
16	–	1	C <sub>15</sub> =O bog' hosil bo'ldi, C <sub>15</sub> -O bog' uzilib, C <sub>14</sub> -O bog' hosil bo'ldi
17	–	1	C <sub>8</sub> -O-C <sub>9</sub> epoksi guruhi hosil bo'ldi
18	–	2	C <sub>11</sub> -O-C <sub>13</sub> epoksi guruhi hosil bo'ldi
19	–	1	C <sub>9</sub> -O-C <sub>14</sub> epoksi guruhi hosil bo'ldi
<b>JAMI</b>		<b>100</b>	

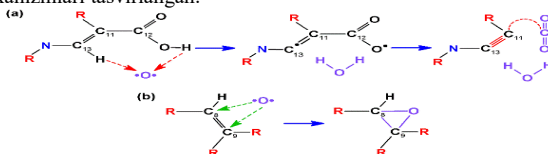
Jadvaldan yana ko'rinadiki, eng ko'p kuzatilgan reaksiya mexanizmlari (15% va 12%) bu OFL molekulasini metil va metilen guruhlaridan H ajratib olish reaksiyasi natijasida strukturada gidroksil guruhlarining hosil bo'lishidir (1-2 reaksiyalarga qarang). 2-rasmda ushbu reaksiya mexanizmlari ko'rsatilgan.



2-rasm. O atomining OFL molekulasidagi metil (a) va metilen (b) guruhlarini o'zaro ta'sir reaksiya mexanizmlari. H ajratib olish va OH radikalining bog'lanish reaksiyalari, mos ravishda, qizil va yashil punktir chiziqli strelkalar bilan ko'rsatilgan. O atomi, OH radikali va yangi hosil bo'lgan gidroksil guruhi binafsha rangda ko'rsatilgan.

Rasmdan ma'lumki, O atomi dastlab OFL molekulasidagi metil (2a-rasm) yoki metilen (2b-rasm) guruhidan H atomini ajratib oladi (qizil strelkalarga qarang). Bu esa tizimda OH radikali va OFL molekulasidagi radikal joyning hosil bo'lishiga olib keladi. Natijada ushbu radikal OFL molekulasidagi radikal joy bilan o'zaro ta'sirlashib (yashil strelkalarga qarang) strukturada yangi gidroksil guruhi hosil bo'ladi.

3-rasmda O atomi va OFL molekulasini orasidagi o'zaro ta'siri natijasida H<sub>2</sub>O va CO<sub>2</sub> molekularining ajralishi hamda epoksi guruhlarining hosil bo'lish reaksiya mexanizmlari tasvirlangan.



3-rasm. O atomining OFL molekulasini orasidagi o'zaro ta'siri natijasida H<sub>2</sub>O va CO<sub>2</sub> molekularining (a) hamda epoksi guruhining (b) hosil bo'lishi. H ajratib olish va OH radikalining bog'lanish reaksiyalari, mos ravishda, qizil va yashil punktir chiziqli strelkalar bilan ko'rsatilgan. O atomi, ajralgan H<sub>2</sub>O va CO<sub>2</sub> molekulari hamda yangi hosil bo'lgan epoksi guruhi binafsha rangda ko'rsatilgan.

3a-rasmdan ko'rinadiki (1-jadvaldagi 14-reaksiya), O atomi H atomlarini C<sub>13</sub> va C<sub>12</sub>O dan ajratib oladi. Bu esa H<sub>2</sub>O molekulasini strukturada radikal joylar hosil bo'lishiga olib keladi. Keyinchalik, C<sub>11</sub>-C<sub>12</sub> bog'ining uzilishi natijasida CO<sub>2</sub> molekulasini ajralib chiqadi. Bu esa pirovardida C<sub>11</sub> va C<sub>13</sub> orasida turg'un uchlik bog' hosil bo'lishiga olib keladi. 3b-rasmda (1-jadvaldagi 21-reaksiya) H ajratib olish reaksiyasi kuzatilmasdan O atomi to'g'ridan-to'g'ri strukturadagi C<sub>8</sub> va C<sub>9</sub> atomlari bilan bog'lanib, epoksi guruhining hosil bo'lishiga olib keladi.

**Xulosalar.** Ushbu tadqiqotda oqava suvlar tarkibidagi FX sinfiga kiruvchi OFL antibiotigining SAP hosil qilgan O atomlari bilan o'zaro ta'siri mexanizmlari MD modellashirishlari yordamida o'rganildi. Simulyatsiya natijalari O atomlari bilan OFL molekulasini orasidagi o'zaro ta'sir molekulasida gidroksil va epoksi guruhlarini hosil bo'lishiga olib kelishini ko'rsatdi. Asosan, ushbu gidroksil funksional guruhlarini OFLning metil va metilen guruhlarida hosil bo'lishi kuzatildi. Undan tashqari, reaksiyalar mobaynida H<sub>2</sub>O va CO<sub>2</sub> kabi molekular ajralib chiqish hodisalari ham kuzatildi. Ushbu modellashirish natijalari tibbiy oqava suvlardagi FX sinfiga kiruvchi antibiotiklarni tozalashda SAPning rolini yanada yaxshiroq tushunish imkonini beradi.

#### ADABIYOTLAR

1. G. Muteeb *et al.*, Pharmaceuticals 16, 1615 (2023).
2. R. Gothwal *et al.*, Clean – Soil, Air, Water 43, 479 (2015).
3. C. A. Fewson, Trends in Biotechnology 6, 148 (1988).
4. M. Santos *et al.*, Journal of Hazardous Materials 175, 45 (2010).
5. A. Joss *et al.*, Water Research 39, 3139 (2005).
6. A. R. Coates *et al.*, British Journal of Pharmacology 163, 184 (2011).
7. T. Senasu *et al.*, J Mater Sci: Mater Electron 31, 9685 (2020).
8. K. K. Sodhi *et al.*, Journal of Water Process Engineering 43, 102218 (2021).
9. P. Huang *et al.*, Science of The Total Environment 616–617, 1384 (2018).
10. X. Peng *et al.*, Science of The Total Environment 371, 314 (2006).
11. A. Szymonik *et al.*, Ecological Chemistry and Engineering S 24, 65 (2017).
12. H.-B. Lee *et al.*, Journal of Chromatography A 1139, 45 (2007).
13. P. Verlicchi *et al.*, Science of The Total Environment 429, 123 (2012).
14. N. Rahman *et al.*, Journal of Environmental Management 318, 115525 (2022).
15. A. Joss *et al.*, Water Research 40, 1686 (2006).
16. P. Pal *et al.*, Separation & Purification Reviews 43, 89 (2014).
17. C. H. Neoh *et al.*, Chemical Engineering Journal 283, 582 (2016).
18. E. Wielogorska *et al.*, Antibiotics 12, 1115 (2023).
19. P. T. T. Nguyen *et al.*, Journal of Chemistry 2021, e9981738 (2021).
20. C. Sarangapani *et al.*, Sci Rep 9, 3955 (2019).
21. M. Yusupov *et al.*, New J. Phys. 14, 093043 (2012).
22. M. Yusupov *et al.*, J. Phys. Chem. C 117, 5993 (2013).
23. M. Yusupov *et al.*, J. Phys. D: Appl. Phys. 47, 025205 (2014).
24. M. Yusupov *et al.*, Plasma Processes and Polymers 12, 162 (2015).
25. M. Yusupov *et al.*, Sci Rep 7, 5761 (2017).
26. M. Yusupov *et al.*, Redox Biology 43, 101968 (2021).
27. M. Yusupov *et al.*, Plasma Processes and Polymers 20, 2200137 (2023).
28. M. Elstner *et al.*, Phys. Rev. B 58, 7260 (1998).
29. M. Gaus *et al.*, J. Chem. Theory Comput. 9, 338 (2013).
30. M. Gaus *et al.*, J. Chem. Theory Comput. 10, 1518 (2014).
31. M. Kubillus *et al.*, J. Chem. Theory Comput. 11, 332 (2015).
32. H. J. C. Berendsen *et al.*, Journal of Chemical Physics 81, 3684 (1984).
33. B. Aradi *et al.*, J. Phys. Chem. A 111, 5678 (2007).
34. B. Hourahine *et al.*, J. Chem. Phys. 152, 124101 (2020).

Aziz SAPARBAYEV,

Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti katta ilmiy xodimi

E-mail: [saparbaevaziz83@gmail.com](mailto:saparbaevaziz83@gmail.com)

O'zMU dotsenti, PhD G'.Eshonqulov taqrizi asosida

### D18 DONORNING STRUKTURASI MODIFIKATSIYA QILIB OLINGAN YANGI DONOR POLIMERLARNING OPTIK XOSSALARI

Annotatsiya

Bu ishda D18, D18-C6Cp, D18-C6Ch va D18-C6Chp donor polimerlarining optik xossalari qiyosiy tadqiq qilindi. Optik xossalari bo'yicha olingan natijalarga ko'ra, D18-C6Cp, D18-C6Ch va D18-C6Chp yangi donor polimerlarining optik xususiyatlari D18 polimeriga qaraganda barcha parametrlarda optimal ekanligi aniqlandi. Absorbsiya va FL spektrlari D18-C6Cp, D18-C6Ch va D18-C6Chp yangi donor polimerlarda rekombinatsiyalar kamayganini va zaryadni tashishning yuqori samaradorligiga ega ekanligini tasdiqladi.

**Kalit so'zlar:** D18 donor, polimer, yutilish, Fluoressensiya, samaradorlik.

### OPTICAL PROPERTIES OF NEW DONOR POLYMERS WITH MODIFIED DONOR STRUCTURE D18

Annotation

In this work, the optical properties of D18, D18-C6Cp, D18-C6Ch and D18-C6Chp donor polymers were compared. According to the results obtained for the optical properties, it was found that the optical properties of the new donor polymers D18-C6Cp, D18-C6Ch and D18-C6Chp are optimal in all parameters than the D18 polymer. The absorption and PL spectra confirmed that this allows reducing recombination and has high efficiency of charge transport, reducing energy losses and charge transfer.

**Key words:** D18 donor, polymer, absorption, fluorescence, efficiency.

### ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НОВЫХ ДОНОРНЫХ ПОЛИМЕРОВ С МОДИФИЦИРОВАННОЙ СТРУКТУРОЙ ДОНОРА D18

Аннотация

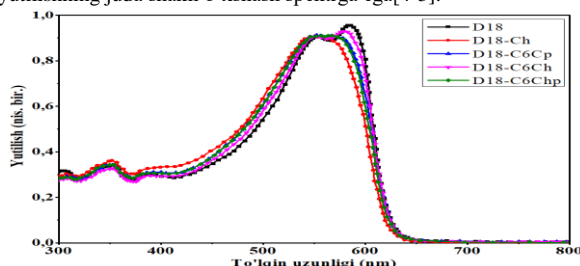
В данной работе проведено сравнение оптических свойств D18, D18-C6Cp, D18-C6Ch и D18-C6Chp донорных полимеров. По результатам, полученным по оптическим свойствам, установлено, что оптические свойства новых донорных полимеров D18-C6Cp, D18-C6Ch и D18-C6Chp оптимальны по всем параметрам, чем полимер D18. Спектры поглощения и ФЛ подтвердили, что это позволяет уменьшить рекомбинацию и обладают высокой эффективностью транспорта заряда, снижение потерь энергии и переноса заряда.

**Ключевые слова:** Донор D18, полимер, поглощение, флуоресценция, эффективность.

**Kirish.** Hajmiy getero-strukturaga ega faol qatlamga asoslangan polimer quyosh element (PQE)lari eritmani qayta ishlash usuli, moslashuvchanligi, shaffofligi va yengil vazni bo'yicha keng qamrovli ishlab chiqarish kabi ko'plab xususiyatlari tufayli dunyo olimlarining katta e'tiborini qaratmoqda. So'nggi bir necha yilda PQElarning jadal rivojlanishining samarasi tufayli, yuqori samarali donor va akseptor polimer materiallar yaratildi va PQElar strukturasi doimiy ravishda optimallashtirildi, interfeys qatlamlari o'zgartirildi. Natijada bitta faol qatlamga ega PQElarning energiyani o'zgartirish samaradorligi 19 % dan oshirilishiga erishildi[1-2].

Shunga qaramay, noorganik va pervoskit quyosh elementlari bilan solishtirganda, PQElarda nisbatan past to'ldirish faktori va yuqori energiya yo'qotilishi hali ham asosiy muammolar bo'lib, bu muammolar PQElarning yaxshi ishlashini cheklaydi [2-3]. Bunday muammolarga yechim topish uchun samarali PQE materiallarni loyihalash va innovatsion strategiyani ishlab chiqish juda muhimdir. Bizga ma'lumki PQElarning samaradorligi donor va akseptor materiallarning optik xossalari bilan bevosita uzviy bog'liqdir. Shu sababli, bu ishda D18 polimerining strukturasi modifikatsiya qilib olingan yangi donor polimerlarning optik xossalari tadqiq qilindi.

**Natijalar va muhokama.** Gibril yon zanjir usulida sintez qilib olingan yangi D18 donorning modifikatsiya qilingan donor polimerlarning strukturasi yutilish xossalari ta'siri birinchi navbatda tahlil qilindi. 1-rasm va 2-raslarda gibril zanjirli strukturaga ega barcha donor polimerlar eritma shaklida va qatlam holatida ham arzimmas batoxromik siljishlar va shunga o'xshash intensivlik cho'qqilariga ega ekanligini ko'rishimiz mumkin. Ushbu grafikda turli donor polimerlarning yutilish spektrlari taqdim etilgan, ularning absorbsiya intensivligi (yutilish darajasi) to'liq uzunligiga (nm) bog'liq ravishda o'zgarishda. Yutilish spektrining shakli D18 va uning tarkibli versiyalari (D18-Ch, D18-C6Cp, D18-C6Ch, D18-C6Chp) yutilishning juda shakli o'xshash spektrga ega[4-5].



1-rasm. D18 va D18 tarkibiga ega polimer eritmalarining yutilish spektri

Barcha polimerlar 450–650 nm oralig'ida yuqori yutilish ko'rsatadi, bu esa ularning ushbu to'liq uzunliklarida samarali yorug'lik yutilish xususiyatlarini ko'rsatadi. D18 va boshqa polimerlarning yutilish piki 600 nm atrofida joylashgan. Bu pik polimerlar tomonidan yuqori yorug'lik energiyasini yutilishiga mos kelishini ko'rsatadi, bu esa PQElarda samaradorlik uchun muhim ahamiyatga ega[6-8].

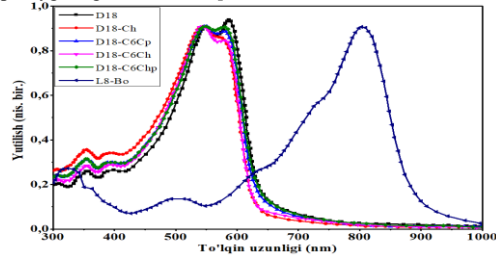
Grafikdagi kichik farqlarni tahlil qiladigan bo'lsa, D18 va uning modifikatsiyalangan shakllari (masalan, D18-C6Ch, D18-C6Cp) orasida kichik farqlar ko'rinadi, bu ularning kimyoviy tuzilishida kichik o'zgarishlar tufayli yutilish spektrlarida ham unchalik sezilarli darajada o'zgarish bo'lmaganligidandir. Shu sababli yorug'likni yutilish spektri grafigidagi shakllarda farqlar katta emasligini 1-jadvalda berilgan donor polimerlarning optik va elektrokimyoviy xossalari bilan ham anglash mumkin.

1-jadval. Donor polimerlarning optik va elektrokimyoviy xossalari.

Polimer nomi	$\lambda_{\text{onset}}$ [nm] qatlam	$\lambda_{\text{onset}}$ [nm] eritma	$^a E_g$ [eV]	HOMO [eV]	LUMO [eV]
D18	547	629	1.97	-5.51	-2.77
D18-Ch	544	623	1.99	-5.53	-2.78
D18-C6Cp	545	627	1.98	-5.52	-2.78
D18-C6Ch	545	625	1.98	-5.53	-2.78
D18-C6Chp	547	629	1.97	-5.53	-2.79

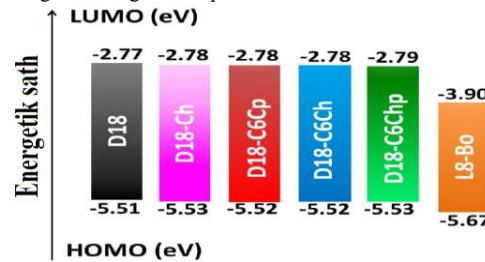
$^a E_{\text{opt}} = 1240/\lambda_{\text{onset}}$  formula yordamida hisoblangan.

Masalan, 2-rasmdagi faqat siklik zanjirli strukturani o'z ichiga olgan D18-Ch polimer qatlarning yutilish spektrida deyarli hech qanday yelka cho'qqisini ko'rsatmaydi, ammo tarmoqlanib yoyilib ketgan zanjirli strukturaga ega D18 uchun esa huddi eritma holatida o'lgan yutilish spektrida sezilarli yelka pislari mavjud, buning sababini esa katta siklik zanjirning sterik ta'siri tufayli agregatsiyani optimal emasligini ko'rsatadi. Gibrid siklik va alkil zanjirlari bo'lgan uchta polimer (ya'ni, D18-C6Cp, D18-C6Ch va D18-C6Chp) o'rtacha yelka pik intensivligini ko'rsatmoqda, bu natijalarni D18-Ch bilan solishtirib tahlil qiladigan bo'lsak, bu uchta polimerda ham sterik ta'sir saqlanib qolgan, ammo D18 polimerning yutilish pikiga nisbatan ancha pasayganligini ko'rsatadi[9-11].



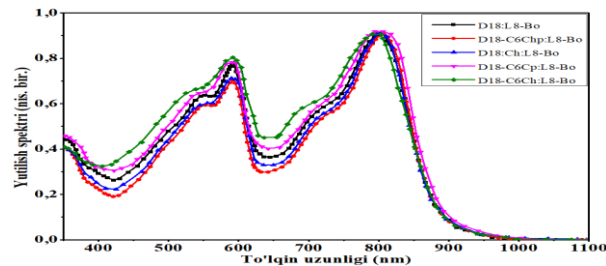
2-rasm. D18 va D18 asosida sintez qilib olingan polimer qatlarning yutilish spektri

Soddaroq qilib tushuntiradigan bo'lsak, turli xil gibrid zanjirli polimerlar, masalan polimer strukturadagi siklik va chiziqli alkil zanjirlarning turli xil tartibga solinishi tufayli, bir-biridan farq qiluvchi agregatsiyalanish holatlarini namoyish etadi. Ammo, har xil yon zanjirli struktura bilan modifikatsiya qilingan ushbu donor polimerlarning yutilish spektrlariga chuqur ta'sir ko'rsatmaydi va barcha polimerlar optik ta'qiqlangan soha kengligi 1,97 eVdan 1,99 eV gacha bo'lgan oraliqda shakllandi.



3-rasm. D18 va D18 tarkibiga ega polimer donorlar va L8-Bo akseptorning energetik sath qiymatlari

3-rasmda D18, D18-Ch, D18-C6Cp, D18-C6Ch va D18-C6Chp ning HOMO/LUMO energetik sathlarining qiymatini ko'rishingiz mumkin. Bunda D18, D18-Ch, D18-C6Cp, D18-C6Ch va D18-C6Chp donor polimerlarning HOMO/LUMO energetik sathlarining qiymati mos ravishda -5,51/-2,77 eV, -5,53/-2,78 eV, -5,5/-2,53/-2,78 eV va -5,53/-2,79 eV ekan. HOMO/LUMO energetik sathlari qiymatlarining natijalariga ko'ra, modifikatsiya qilingan donor polimerlarning yoyilib tarmoqlanib ketgan yon zanjir strukturaning o'rnini bosuvchi gibrid zanjirli strukturaga o'zgartirish natijasida HOMO va LUMO energiya sathlarining biroz chuqurlashishiga olib kelishi mumkin ekan, bu esa PQElarning  $V_{\text{OC}}$  qiymati uchun foydali bo'ladi.



4-rasm. D18 va D18 asosida sintez qilib olingan polimer donorlar asosidagi faol qatlarning yutilish spektrlari

4-rasmdagi grafikda D18 va uning modifikatsiyalangan donor polimerlar bilan fulleren bo'lmagan L8-Bo akseptor arlashmasi asosida olingan faol qatlarning yutilish spektrlari berilgan. Eng avvalo, grafikdagi yutilish spektrining shakliga to'xtaladigan bo'lsak, barcha faol qatamlar uchun 400–900 nm oraliqida yaxshi yutilish intensivligini ko'rsatmoqda. Bunday to'liq uzunligi sohasida yutilish spektrining yaxshi bo'lishi quyosh nurlanishi spektrining katta qismini yutishiga imkon berib PQElarning samaradorligini yanada oshiradi. Har bir faol qatlarning yutilish spektrida to'liq uzunligi 600 nm atrofida va 800 nm atrofida kuchli yutilish pislari mavjud. Bunday piklarning shakllanishiga sabab, D18 va L8-Bo polimerlarning yutilish spektriga qaralsa o'z-o'zidan tushunarli bo'ladi. 4-rasmdagi grafikning 600 nm atrofida yutilish pislari bu D18 polimeriga tegishli bo'lsa, 800 nm atrofida yutilish pislari esa L8-Bo akseptorga tegishli. Endi D18 donor polimerlarning modifikatsiya qilingan versiyalari orasidagi yutilish spektrini tahlil qiladigan bo'lsak, D18-C6Ch:L8-Bo (yashil chiziq) eng kuchli yutilish ko'rsatkichiga ega bo'lib, ayniqsa, 600 nm va 800 nm atrofida boshqa namunalar bilan solishtirganda biroz balandroq yutilish ko'rsatmoqda. Bundan xulosa qilinadiki, D18-C6Ch:L8-Bo faol qatlarning amorf holatdan kristallanish holatiga o'tish strukturasi boshqa faol qatlamlarga nisbatan yorug'likni yutishi samaraliroq ekanini ko'rsatmoqda. D18-C6Chp:L8-Bo (qizil chiziq) faol qatlarning yutilish intensivligi boshqa faol qatlamlarga nisbatan eng past yutilish ko'rsatkichlarini ko'rsatmoqda, ayniqsa katta to'liq uzunliklari (800–900 nm) sohasida buni yaqqol ko'rish mumkin. Barcha faol qatlarning 900 nm dan keyingi to'liq uzunliklarda yutilish intensivligi sezilarli darajada pasayadi. Bundan ushbu faol qatlamlar asosidagi PQElarning uzoq infraqizil to'liq uzunligi sohasida yorug'likni samarali yuta olmasligi sababli samarali elektr energiya ishlash chiqarolmasligini xulosa qilishimiz mumkin[11-13].

4-rasmda berilgan yutilish intensivligi garfiklaridan xulosa qiladigan bo'lsak, D18 donor polimerining va uning turli modifikatsiyalari L8-Bo fulleren bo'lmagan akseptor bilan birgalikda faol qatlam hosil qilib, optimal optik xossalarni ko'rsatmoqda va D18 polimerining modifikatsiyalangan donor polimerlari asosidagi faol qatlarning ham yorug'lik yutish xususiyatlari D18 polimer asosidagi faol qatlarning

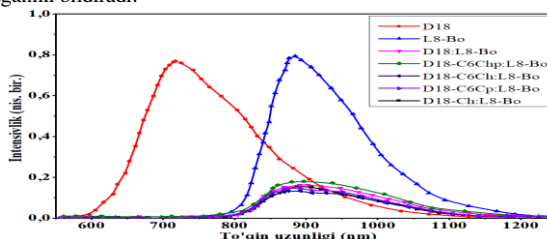
yutilish spektrining shakli va intensivliklari bo'yicha biroq farqni ko'rsatmoqda. Ammo D18-C6Ch:L8-Bo faol qatlamning yutilish spektridan PQElar uchun eng yaxshi natijani D18-C6Ch:L8-Bo faol qatlam ko'rsata olishini xulosa qilish mumkin.

5-rasmdagi grafikda turli modifikatsiyadagi D18 polimeri va L8-Bo akseptorlar asosida faol qatlamlar uchun olingan FL spektrlari ko'rsatilgan bo'lib, bu FL spektrlari D18 donor polimeri va L8-Bo akseptorning FL spektri bilan solishtirilgan. 5-rasmda qizil chiziq bilan berilgan grafik bu sof D18 polimerining FL spektridir. U 700 nm atrofida eng yuqori intensivlikka ega bo'lgan bo'lsa, L8-Bo akseptor faol qatlamning FL spektri (ko'k chiziq) esa yuqori intensivlikni 900 nm atrofida ko'rsatmoqda. Bu spektr grafikidan ko'rishimiz mumkinki, L8-Bo akseptorning FL spektri D18 donor polimerning FL spektriga nisbatan ancha uzoq to'liq uzunliklarida joylashgan. Buning sababini donor va akseptorning optik ta'qiqlangan soha kengligining qiymati turlicha ekanligi bilan izohlaymiz.

D18:L8-Bo (pushti chiziq): Bu faol qatlamning spektri D18 va L8-Bo komponentlari o'rtasidagi birlashuvni aks ettiradi. Intensivlik kamaygan, ammo ikkala to'liq uzunliklarida ham (700 nm va 900 nm) kichik cho'qqilar ko'rinmoqda, bu komponentlar o'rtasida energiya o'tkazilish mavjudligini ko'rsatadi.

D18-C6Chp:L8-Bo (yashil chiziq), D18-C6Ch:L8-Bo (qora chiziq), D18-C6Cp:L8-Bo (binafsha rang chiziq) va D18-Ch:L8-Bo (siyoh rang chiziq) faol qatlamlarning FL spektrlarining intensivligi ancha past bo'lib, D18 polimer va uning turli modifikatsiyalangan strukturali polimerlar bilan L8-Bo akseptor ning turli xil modifikatsiyalari fotoluminesent spektrlarda farq qiladi.

PQE samaradorligi uchun faol qatlamlarning fotoluminesent (FL) intensivligi kamayishi afzal, chunki quyosh elementlari uchun asosiy maqsad tushayotgan fotonlarning elektr toki hosil qilish uchun samarali ravishda foydalanilishi, ya'ni fotonlar nurlanishsiz rekombinatsiya bilan elektronga aylanishidir. FL intensivligi ortganda, bu aksincha, tushayotgan fotonlarning ortiqcha qismini qayta nurlanish shaklida chiqarib yuborilishi mumkinligini anglatadi, bu esa quyosh elementining samaradorligini pasaytiradi. FL intensivligi faol qatlamdagi nurlanishli rekombinatsiya darajasini aks ettiradi. Agar faol qatlamda FL intensivligi yuqori bo'lsa, bu elektronlar va kovaklar birlashganda (rekombinatsiya bo'lganda) ko'proq fotonlar chiqarilayotganini bildiradi.



5-rasm. D18 va D18 asosida sintez qilib olingan polimer donorlar va L8-Bo akseptor aralashmasi asosida tayyorlangan faol qatlamlarning FL spektrlari

PQE samaradorligi uchun esa, fotonlar qayta nurlanish shaklida yo'qolmasdan, o'rniga elektr toki hosil qilishi kerak. Chunki, faol qatlam FL nurlanishiga ko'p energiya sarflasa, bu quyosh elementida energiya yo'qotilishiga olib keladi, chunki bu energiya qayta fotonlar sifatida chiqariladi va foydali elektr energiyasiga aylantirilmaydi. Yuqori FL intensivligi esa elektron-kovak juftlarining samarali ravishda elektr toki hosil qilish o'rniga qayta nurlanish orqali energiyani yo'qotayotganini anglatadi. FL intensivligi past bo'lganda, bu elektron va kovaklar ko'proq ajralib chiqayotganini va ularning qayta birlashishi (rekombinatsiya) kamroq bo'layotganini ko'rsatadi. Bu esa fotonlarning samarali ravishda elektr energiyasiga aylanishini ta'minlaydi. Shuning uchun, FL intensivligi pasayishi energiya yo'qotishlarini kamaytiradi va PQE samaradorligini oshiradi [12-14]. FL intensivligi kamayishi PQElar samaradorligini oshirish uchun afzaldir, chunki bu energiyaning nurlanishsiz rekombinatsiya orqali samarali ravishda elektr energiyasiga aylanishini ta'minlaydi.

**Xulosa.** Xulosa qilib aytganda, D18 polimer sturkturasiga birlashtirilgan qattiq siklopentan, sikloheksan va sikloheptan zanjirlari birlashtirilgan ular orqali yangi polimer donorlari (D18-C6Cp, D18-C6Ch va D18-C6Chp) yaratilgan. Siklik va alkil zanjir strukturalarni birlashtirish orqali yangi gibril yon zanjir muhandisligi asosida olingan yangi donor polimerlarning yuqori samarali PQElarni olishda samarali bo'lishini optik xossalari yordamida tahlil qilib ochib berdik. Yuqoridagi bu xususiyatlar qo'shimcha ravishda samarali g'alayonlanish dissotsiatsiyasini, past zaryad rekombinatsiyasini va muvozanatli zaryadni tashishni keltirib chiqarishi mumkin va shu bilan yuqori samarali PQElar olinishi mumkin. Bunday xulosamizni, D18-C6Ch: L8-Bo asosidagi faol qatlamning yutilish va FL spektrlari ham tasdiqlamoqda va optimallashtirilgan PQElarga to'liq mos keladi.

#### ADABIYOTLAR

- Han, Chenyu, et al. "Over 19% efficiency organic solar cells by regulating multidimensional intermolecular interactions." *Advanced Materials* 35.10 (2023): 2208986. <https://doi.org/10.1002/adma.202208986>
- Liu, Feng, et al. "Nonfullerene Acceptor Featuring Unique Self-Regulation Effect for Organic Solar Cells with 19% Efficiency." *Angewandte Chemie* 136.3 (2024): e202313791. <https://doi.org/10.1002/anie.202313791>
- <https://doi.org/10.1002/anie.202313791>
- S. Feng, C. Zhang, Y. Liu, Z. Bi, Z. Zhang, X. Xu, W. Ma, Z. Bo, *Adv. Mater.* 29 (2017), 1703527. <https://doi.org/10.1002/adma.201703527>
- Y. Lin, F. Zhao, Q. He, L. Huo, Y. Wu, T.C. Parker, W. Ma, Y. Sun, C. Wang, D. Zhu, A.J. Heeger, S.R. Marder, X. Zhan, *J. Am. Chem. Soc.* 138 (2016) 4955. <https://doi.org/10.1021/jacs.6b02004>
- H. Jiang, C. Han, Y. Li, F. Bi, N. Zheng, J. Han, W. Shen, S. Wen, C. Yang, R. Yang, X. Bao, *Adv. Funct. Mater.* 31 (2021), 2007088. <https://doi.org/10.1002/adfm.202007088>
- Y. Li, N. Zheng, L. Yu, S. Wen, C. Gao, M. Sun, R. Yang, *Adv. Mater.* 31 (2019), 1807832. <https://doi.org/10.1002/s11426-019-9670-2>
- D. Xia, C. Li, W. Li, *Chem. Rec.* 19 (2019) 962. <https://doi.org/10.1002/tcr.201800131>
- G. Feng, W. Tan, S. Karthedath, C. Li, X. Jiao, A.C.Y. Liu, H. Venugopal, Z. Tang, L. Ye, F. Laquai, C.R. McNeill, W. Li, *Angew. Chem.* 133 (2021) 25703. <https://doi.org/10.1002/anie.202209316>
- Wang, Weijie, et al. "Nitrogen-bridged star-shaped fused-ring electron acceptors for organic solar cells." *Giant* 10 (2022): 100093. <https://doi.org/10.1016/j.giant.2022.100093>
- L. Han, H. Jiang, D. Ouyang, W. Chen, T. Hu, J. Wang, S. Wen, M. Sun, R. Yang, *Nano Energy* 36 (2017) 110. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2017.04.036>
- L. Zhao, C. Yang, F. Bian, D. Guo, X. Ouyang, *J. Appl. Cryst.* 55 (2022) 195. [58] X. Liu, Z. Liang, S. Du, X. Niu, J. Tong, C. Yang, X. Lu, X. Bao, L. Yan, J. Li, Y. Xia, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 14 (2022) 9386. <https://doi.org/10.1016/j.cjca.2023.100569>
- Z. Li, L.Y.P. Zhu, W. Zhong, N. Li, F. Liu, F. Huang, Y. Cao, *Energy Environ. Sci.* 12 (2019) 157. <https://doi.org/10.1039/C9EE01030K>
- J. Mun, J. Kang, Y. Zheng, S. Luo, H. Wu, N. Matsuhashi, J. Xu, G.N. Wang, Y. Yun, G. Xue, J.B.-H. Tok, Z. Bao, *Adv. Mater.* 31 (2019), 1903912. [62] M. Jeong, J. Oh, Y. Cho, B. Lee, S. Jeong, S.M. Lee, S.H. Kang, C. Yang, *Adv. Funct. Mater.* 31 (2021), 2102371. <https://doi.org/10.1002/adma.202309779>
- P.W.M. Blom, V.D. Mihailetschi, L.J.A. Koster, D.E. Markov, *Adv. Mater.* 19 (2007) 1551. [64] J. Xiao, X. Jia, C. Duan, F. Huang, H.L. Yip, Y. Cao, *Adv. Mater.* 33 (2021), 2008158. <https://doi.org/10.1002/adma.200601093>



UDK: 517. 984

Sa'dulla TASHPULATOV,

O'zbekiston Fanlar akademiyasi yadro fizikasi instituti etakchi ilmiy xodimi, f.m.f.d

E-mail: sadullatashpulatov@yandex.com, toshpul@mail.ru, toshpul@inp.uz

Rukhsat PARMANOVA,

O'zbekiston Fanlar akademiyasi yadro fizikasi institute tayanch doktoranti

F.m.f.n., dotsent R.Eshbo'riev taqrizi asosida

#### FOUR-ELECTRON SINGLET IN THE IMPURITY HUBBARD MODEL

Annotation

We consider the energy operator of four-electron system in the Impurity Hubbard model. The spectrum of the systems in the second singlet state in a lattice are investigated. The investigations show: the essential spectrum of the system consists of the union of no more than sixteen segments, and the discrete spectrum of the system consists of no more than fourteen eigenvalues.

**Key words:** four-electron system, bound state, Impurity Hubbard model, quintet state, singlet state, triplet state, essential spectra, discrete spectra.

#### ЧЕТЫРЕХ ЭЛЕКТРОННЫЕ СИНГЛЕТЫ В ПРИМЕСНОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА

Аннотация

Рассматривается оператор энергии четырехэлектронных систем в примесной модели Хаббарда. Исследуется спектр системы для второго синглетного состояния системы в решетке. Исследование показывает, что: существенный спектр системы состоит из объединений не более чем шестнадцати отрезков, а дискретный спектр системы состоит из не более чем четырнадцати собственных значений.

**Ключевые слово:** четырехэлектронных систем, связанные состояние, примесная модель Хаббарда, квинтетное, синглетное, триплетное состояние, существенный спектр, дискретный спектр.

#### ARALASHMALI XABBARD MODELIDAGI TO'RT ELEKTRONLI SINGLET LAT

Annatsiya

Aralashmali Xabbard modelida to'rt elektronli sistema energiya operatori qaraldi. Panjarada sistemaning spektri ikkinchi singlet holatida tadqiq qilindi. Tadqiqotlar shuni ko'rsatdiki: sistemaning muhim spektri o'n oltitadan ko'p bo'lmagan kesmalarning birlashmasidan, diskret spektri esa o'n to'rttadan ko'p bo'lmagan xos qiymatlardan iborat ekan.

**Kalit so'zlar:** to'rt elektronli sistema, bog'langan holat, aralashmali Xabbard modeli, kvintet, singlet, triplet holatlar, muhim spektr, diskret spektr.

**Introduction.** The use of films in various areas of physics and technology arouses great interest in studying a localized impurity state (LIS) of magnet. Therefore, it is important to study the spectral properties of electron systems in the impurity Hubbard model. The Hubbard model and impurity Hubbard model is currently one of the most extensively studied multielectron models of metals. The study of the structure of the essential spectrum and the discrete spectrum of the energy operator of four electron systems in the impurity Hubbard model is a little-studied field of study. In this paper we give a full description of the structure of the essential spectra and discrete spectrum of four-electron systems in the impurity Hubbard model for second singlet state.

**Literature review.** The Hubbard model first appeared in 1963 in the works [1]. The model proposed in [1] was called the Hubbard model after John Hubbard, who made a fundamental contribution to studying the statistical mechanics of that system, although the local form of Coulomb interaction was first introduced for an impurity model in a metal by Anderson [2]. We also recall that the Hubbard model is a particular case of the Shubin-Wonsowsky polaron model [3], which had appeared 30 years before [1]. In the Shubin-Wonsowsky model, along with the on-site Coulomb interaction, the interaction of electrons on neighboring sites is also taken into account. If the interaction between particles on different sites is taken into account,

then the model is often called the extended Hubbard model. In the review [4], the results obtained on the Hubbard model are summarized. According to the Hubbard model, the more progress that is made in obtaining theoretical solutions, the clearer it becomes that this simple model can exhibit a startling array of phases and regimes, many of which have clear parallels with observed behaviors of a wide variety of complex materials. For instance, there is compelling evidence that ferromagnetism, various forms of antiferromagnetism, unconventional superconductivity, charge-density waves, electronic liquid crystalline phases, and topologically ordered phases (e.g., "spin liquids"), among other phases, occur in specific realizations of the Hubbard model. It is our purpose here to summarize, to the extent possible in a brief article, what is established concerning the quantum phases of the Hubbard model. The role of the Hubbard model, which it played in the study of high-temperature superconductivity in cuprates, is discussed. It is shown that the positive eigenvalues of the Hubbard model (corresponding to repulsive effectual interactions) weaken, and the negative ones grow. The spectrum and wave functions of the system of two and three electrons in a crystal described by the Hubbard Hamiltonian were studied in [5] and [6]. In the three-electron systems are exists quartet state, and two type doublet states. The spectrum of the energy operator of system of four electrons in a crystal described by the Hubbard Hamiltonian in the triplet state were studied in [7]. In the four-electron systems are exists quintet state, and three type triplet states, and two type singlet states. The spectrum of the energy operator of four-electron systems in the Hubbard model in the quintet, and singlet states were studied in [8]. The spectrum and wave functions of the system of two electrons in a crystal described by the impurity Hubbard Hamiltonian were studied in [9] and [10].

Then, using the results obtained from the study of the spectrum of the energy operator of one-electron systems in the impurity Hubbard model, we describe the spectrum of four electron systems in the Impurity Hubbard model for the second singlet state in the lattice.

**Research Methodology.** Using the standard anticommutation relations between electron creation and annihilation operators at lattice site, and also take into account the vacuum vector, we obtain a coordinate representation of the operator's action, and then complete the Fourier transform, we obtain a quasimomentum representation of the operator's action. The spectral properties of four-electron systems in the impurity

Hubbard model in the second singlet state are closely related to those of its one-electron subsystems in the impurity Hubbard model. Taking into account that the function  $f(\lambda, \mu, \gamma, \theta)$  is antisymmetric, and using tensor products of Hilbert spaces and tensor products of operators

in Hilbert spaces and using the Kato-Rellix theorem we described the structure of essential spectrum and discrete spectra of the second singlet state operator.

**Analysis and results. Preliminaries.** We consider of the energy operator of four-electron systems in the impurity Hubbard model and investigate the structure of essential spectra and discrete spectrum of the system for second singlet state of the system in the lattice. Hamiltonian of the considering system has the form

$$H = A \sum_{m,\gamma} a_{m,\gamma}^+ a_{m,\gamma} + B \sum_{m,\tau,\gamma} a_{m,\gamma}^+ a_{m+\tau,\gamma} + U \sum_m a_{m,\uparrow}^+ a_{m,\downarrow}^+ a_{m,\uparrow} a_{m,\downarrow} + (A_0 - A) \times \sum_{\gamma} a_{0,\gamma}^+ a_{0,\gamma} + (B_0 - B) \sum_{\tau,\gamma} (a_{0,\gamma}^+ a_{\tau,\gamma} + a_{\tau,\gamma}^+ a_{0,\gamma}) + (U_0 - U) a_{0,\uparrow}^+ a_{0,\uparrow} a_{0,\downarrow}^+ a_{0,\downarrow}. \quad (1)$$

Here,  $A$  ( $A_0$ ) is the electron energy at a regular (impurity) lattice site;  $B > 0$  ( $B_0 > 0$ ) the transfer integral between electrons (between electron and impurity) in a neighboring sites,  $\tau = \pm e_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, \nu$ , where  $e_j$  are unit mutually orthogonal vectors, which means that summation is taken over the nearest neighbors,  $U$  ( $U_0$ ) is the parameter of the on-site Coulomb interaction of two electrons, correspondingly in the regular (impurity) lattice site;  $\gamma$  is the spin index,

$\gamma = \uparrow$  or  $\gamma = \downarrow$ , and  $a_{m,\gamma}^+$  and  $a_{m,\gamma}$  are the respective electron creation and annihilation operators at a site  $m \in Z^\nu$ . The second singlet state corresponds four electron bound states (or antibound states) to the basis functions:  ${}^2S_{p,q,r,t \in Z^\nu}^0 = a_{p,\uparrow}^+ a_{q,\downarrow}^+ a_{r,\uparrow}^+ a_{t,\downarrow}^+ \varphi_0$ . The subspace  ${}^2\mathcal{H}_s^0$ , corresponding to the second singlet state is the set of all vector's of the form:  ${}^2\psi_s^0 = \sum_{p,q,r,t \in Z^\nu} f(p, q, r, t) {}^2S_{p,q,r,t \in Z^\nu}^0$ ,  $f \in \mathbb{L}_2^{\text{as}}$ , where  $\mathbb{L}_2^{\text{as}}$  is the subspace of antisymmetric functions in  $\mathbb{L}_2((Z^\nu)^4)$ . The Hamiltonian  $H$  acts in the antisymmetric Fock space  $\mathcal{H}_{\text{as}}$ . Let  $\varphi_0$  be the vacuum vector in the space  $\mathcal{H}_{\text{as}}$ . The second singlet state corresponds to the free motion of four electrons over the lattice, and their interactions. We denote by  ${}^2H_s^0$  the restriction of the operator  $H$  to the space  ${}^2\mathcal{H}_s^0$ .

We call the operator  ${}^2H_s^0$  the four-electron second singlet state operator. Let  $\varepsilon_1 = A_0 - A$ ,  $\varepsilon_2 = B_0 - B$ ,  $\varepsilon_3 = U_0 - U$ . Hamiltonian (1) commutes with all components of the total spin operator  $S = (S^+, S^-, S^z)$ , and the structure of eigenfunctions and eigenvalues of the system therefore depends on  $S$ .

Theorem 1. The subspace  ${}^2\mathcal{H}_s^0$  is invariant under the operator  $H$ , and the operator  ${}^2H_s^0$  is a bounded self-adjoint operator. It generates a bounded self-adjoint operator  ${}^2\bar{H}_s^0$ , acting in the space  $\mathbb{L}_2^{\text{as}}$  as

$${}^2\bar{H}_s^0 {}^2\psi_s^0 = 4A f(p, q, r, t) + B \sum_{\tau} [f(p, q, r, t) + f(p, q, r, t + \tau) + f(p, q, r, t - \tau)] + U [\delta_{p,q} + \delta_{p,t} + \delta_{q,r} + \delta_{r,t}] f(p, q, r, t) + \varepsilon_1 [\delta_{p,0} + \delta_{q,0} + \delta_{r,0} + \delta_{t,0}] f(p, q, r, t) + \varepsilon_2 \sum_{\tau} [\delta_{p,0} f(\tau, q, r, t) + \delta_{q,0} f(p, \tau, r, t) + \delta_{r,0} f(p, q, \tau, t) + \delta_{t,0} \times f(p, q, r, t) + \delta_{p,\tau} f(0, q, r, t) + \delta_{q,\tau} f(p, 0, r, t) + \delta_{r,\tau} f(p, q, 0, t) + \delta_{t,\tau} f(p, q, r, 0)] + \varepsilon_3 [\delta_{p,q} \delta_{p,0} + \delta_{p,t} \delta_{p,0} + \delta_{q,r} \delta_{q,0} + \delta_{r,t} \delta_{r,0}] f(p, q, r, t), \quad (2)$$

where  $\delta_{kj}$  is the Kronecker symbol. The operator  ${}^2H_s^0$  acts on vector  ${}^2\psi_s^0 \in {}^2\mathcal{H}_s^0$  as

$${}^2H_s^0 {}^2\psi_s^0 = \sum_{p,q,r,t \in Z^\nu} ({}^2\bar{H}_s^0 f)(p, q, r, t) {}^2S_{p,q,r,t \in Z^\nu}^0. \quad (3)$$

Lemma 1. The spectra of the operators  ${}^2H_s^0$  and  ${}^2\bar{H}_s^0$  coincide.

Let  $\mathcal{F}$  denote the Fourier transform:  $\mathcal{F}: \mathbb{L}_2((Z^\nu)^4) \rightarrow \mathbb{L}_2((\mathbb{T}^\nu)^4) \equiv {}^2\mathcal{H}_s^0$ , where  $\mathbb{T}^\nu$  is the  $\nu$ -dimensional torus endowed with the normalized Lebesgue measure  $d\lambda: \lambda(\mathbb{T}^\nu) = 1$ . We set  ${}^2\bar{H}_s^0 = \mathcal{F} {}^2H_s^0 \mathcal{F}^{-1}$ . In the quasimomentum representation, the operator  ${}^2\bar{H}_s^0$  acts in the Hilbert space  $\mathbb{L}_2^{\text{as}}((\mathbb{T}^\nu)^4)$ , where  $\mathbb{L}_2^{\text{as}}$  is the subspace of antisymmetric functions in  $\mathbb{L}_2((\mathbb{T}^\nu)^4)$ .

Theorem 2. The Fourier transform of operator  ${}^2\bar{H}_s^0$  is an bounded self-adjoint operator  $\mathcal{F} {}^2\bar{H}_s^0 \mathcal{F}^{-1}$ , acting in the space  ${}^2\mathcal{H}_s^0$  by the formula

$$\begin{aligned} ({}^2\bar{H}_s^0 f)(\lambda, \mu, \gamma, \theta) = & \{4A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} [\cos \lambda_i + \cos \mu_i + \cos \gamma_i + \cos \theta_i] f(\lambda, \mu, \gamma, \theta) + U \times \int_{\mathbb{T}^\nu} [f(s, \lambda + \mu - s, \gamma, \theta) ds + \\ & f(\lambda, \mu + \gamma - u, \theta) du + f(v, \mu, \gamma, \lambda + \theta - v) dv] + \varepsilon_1 \times \left[ \int_{\mathbb{T}^\nu} f(s, \mu, \gamma, \theta) ds + \int_{\mathbb{T}^\nu} f(\lambda, u, \gamma, \theta) du + \int_{\mathbb{T}^\nu} f(\lambda, \mu, v, \theta) dv + \right. \\ & \left. + \int_{\mathbb{T}^\nu} \sum_{i=1}^{\nu} [\cos \lambda_i + \cos s_i] f(s, \mu, \gamma, \theta) ds + \int_{\mathbb{T}^\nu} \sum_{i=1}^{\nu} [\cos \mu_i + \cos u_i] f(\lambda, u, \gamma, \theta) du + \int_{\mathbb{T}^\nu} \sum_{i=1}^{\nu} [\cos \gamma_i + \right. \\ & \left. \cos v_i] f(\lambda, \mu, v, \theta) dv + \int_{\mathbb{T}^\nu} \sum_{i=1}^{\nu} [\cos \gamma_i + \cos \xi_i] f(\lambda, \mu, \gamma, \xi) d\xi + \varepsilon_3 \int_{\mathbb{T}^\nu} [f(s, \mu, \gamma, \xi) ds d\xi + f(\lambda, u, \gamma, \xi) du d\xi + f(\lambda, \mu, v, \xi) dv d\xi] \}. \quad (4) \end{aligned}$$

The spectral properties of four-electron systems in the impurity Hubbard model in the second singlet state are closely related to those of its one-electron subsystems in the impurity Hubbard model.

### ONE-ELECTRON IMPURITY SYSTEMS

The Hamiltonian of one-electron impurity system has the form:

$$H = A \sum_{m,\gamma} a_{m,\gamma}^+ a_{m,\gamma} + B \sum_{m,\tau,\gamma} a_{m,\gamma}^+ a_{m+\tau,\gamma} + (A_0 - A) \sum_{\gamma} a_{0,\gamma}^+ a_{0,\gamma} + (B_0 - B) \sum_{\tau,\gamma} (a_{0,\gamma}^+ a_{\tau,\gamma} + a_{\tau,\gamma}^+ a_{0,\gamma}) + (U_0 - U) a_{0,\uparrow}^+ a_{0,\uparrow} a_{0,\downarrow}^+ a_{0,\downarrow}. \quad (5)$$

We let  $\mathcal{H}_1$  denote the Hilbert space spanned by the vectors in the form  $\psi = \sum_p a_{p,\uparrow}^+ \varphi_0$ . It is called the space of one-electron states of the operator  $H$ . The space  $\mathcal{H}_1$  is invariant with respect to action of the operator  $H$ . Denote by  $H_1$  the restriction of operator  $H$  to the subspace  $\mathcal{H}_1$ .

**Theorem 3.** The subspace  $\mathcal{H}_1$  is invariant with respect to the action of the operator  $H$ , and the operator  $H_1$  is a linear bounded self-adjoint operator, acting in  $\mathcal{H}_1$  as (6)

$$(\bar{H}_1 f)(p) = A f(p) + B \sum_{\tau} f(p + \tau) + \varepsilon_1 \delta_{p,0} f(p) + \varepsilon_2 \sum_{\tau} [\delta_{p,0} f(\tau) + \delta_{p,\tau} f(0)],$$

where  $\delta_{k,j}$  is the Kronecker symbol. The  $H_1$  itself acts on a vector  $\psi \in \mathcal{H}_1$  as

$$H_1 \psi = \sum_p (\bar{H}_1 f)(p) a_{p,\uparrow}^+ \varphi_0. \quad (7)$$

**Lemma 2.** The spectra of the operators  $H_1$  and  $\bar{H}_1$  coincide.

In section 2 denote by  $\mathcal{F}: \mathbb{L}_2(Z^\nu) \rightarrow \mathbb{L}_2(\mathbb{T}^\nu) \equiv \bar{\mathcal{H}}_1$  the Fourier transform.

Setting  $\bar{H}_1 = \mathcal{F} \bar{H}_1 \mathcal{F}^{-1}$  we get that the operator  $\bar{H}_1$  acts in the Hilbert space  $\mathbb{L}_2(\mathbb{T}^\nu)$ .

Using the equality (7) and properties of the Fourier transform we have the following

**Theorem 4.** The operator  $\bar{H}_1$  acting in the space  $\bar{\mathcal{H}}_1$  as

$$(\bar{H}_1 f)(\mu) = [A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} \cos \mu_i] f(\mu) + \varepsilon_1 \int_{\mathbb{T}^\nu} f(s) ds + 2\varepsilon_2 \int_{\mathbb{T}^\nu} \sum_{i=1}^{\nu} [\cos s_i + \cos \mu_i] f(s) ds. \quad (8)$$

It is clear that the continuous spectrum of operator  $\bar{H}_1$  is independent of the numbers  $\varepsilon_1$  and  $\varepsilon_2$ , and is equal to segment  $[m_\nu, M_\nu] = [A - 2B\nu, A + 2B\nu]$ , where

$$m_\nu = \min_{x \in \mathbb{T}^\nu} h(x), \quad M_\nu = \max_{x \in \mathbb{T}^\nu} h(x) \quad (\text{here } h(x) = A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} \cos \mu_i).$$

Let  $D_\nu(z) = (b_2 - b_3)^{\nu-1} [a_1 [b_2 + (\nu-1)b_3] - \nu a_2 b_1]$ , where

$$a_1 = 1 + \int_{\mathbb{T}^\nu} \frac{[\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 \sum_{i=1}^{\nu} \cos s_i] ds_1 ds_2 \dots ds_\nu}{A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} \cos s_i - z}, \quad a_2 = \int_{\mathbb{T}^\nu} \frac{\cos s_i [\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 \sum_{i=1}^{\nu} \cos s_i] ds_1 ds_2 \dots ds_\nu}{A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} \cos s_i - z}, \quad b_1 = 2\varepsilon_2 \int_{\mathbb{T}^\nu} \frac{ds_1 ds_2 \dots ds_\nu}{A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} \cos s_i - z}, \quad b_2 = 1 +$$

$$2\varepsilon_2 \int_{\mathbb{T}^\nu} \frac{\cos s_i ds_1 ds_2 \dots ds_\nu}{A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} \cos s_i - z},$$

$$b_3 = 2\varepsilon_2 \int_{\mathbb{T}^\nu} \frac{\cos s_i ds_1 ds_2 \dots ds_\nu}{A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} \cos s_i - z}.$$



**Lemma 3.** A number  $z \in [m_\nu, M_\nu]$  is an eigenvalue of operator  $\tilde{H}_1$  if and only if it is a zero of the function  $D_\nu(z)$ .

In the Theorem 7 in the work [9] is described the exchange of the spectrum of operator  $\tilde{H}_1$  in the case  $\nu=1$ . We use in this results. From obtaining results is obviously, that the spectrum of operator  $\tilde{H}_1$  is consists from continuous spectrum and no more than two eigenvalues. Taking into account that the function  $f(\lambda, \mu, \gamma, \theta)$  is antisymmetric, and using tensor products of Hilbert spaces and tensor products of operators in Hilbert spaces [11], we can verify that the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  can be represented in the form (8)

$${}^2\tilde{H}_s^0 {}^2\psi_s^0 = \{\tilde{H}_1 \otimes I + I \otimes \tilde{H}_1 + K_1\} \otimes I \otimes I + I \otimes I \otimes \{\tilde{H}_1 \otimes I + I \otimes \tilde{H}_1 + K_1\},$$

where  $(\tilde{H}_1 f)(\mu) = [A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} \cos \mu_i] f(\mu) + \varepsilon_1 \int_{T^\nu} f(s) ds + 2\varepsilon_2 \times$

$\times \int_{T^\nu} \sum_{i=1}^{\nu} [\cos s_i + \cos \mu_i] f(s) ds$ ,  $K_{1A}(\lambda) = U \int_{T^\nu} f_\Lambda(s) ds + 2\varepsilon_3 \times$

$\times \int_{T^\nu} \int_{T^\nu} f(s, k) ds dk$ ,  $\Lambda = \lambda + \gamma$ , and  $I$  is the unit operator in the space  $\tilde{\mathcal{H}}_1$ .

### STRUCTURE OF THE ESSENTIAL SPECTRUM AND DISCRETE SPECTRUM OF OPERATOR ${}^2\tilde{H}_s^0$

Consequently, the operator represented of the form

$${}^2\tilde{H}_s^0 = \{\tilde{H}_2^t + K_1\} \otimes I \otimes I + I \otimes I \otimes \{\tilde{H}_2^t + K_1\}, \quad (9)$$

where  $\tilde{H}_2^t = \tilde{H}_1 \otimes I + I \otimes \tilde{H}_1$  are the energy operator of two-electron systems in the impurity Hubbard model in triplet state. Using the Kato-Rellix theorems [11], and the Theorem 7 in the work [9] we can described the spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$ . We denote by  $z_3$  and  $z_4$  the additional eigenvalues of the operator  $K_1$ .

**Theorem 5.** Let  $\nu = 1$ . Then **A).** If  $\varepsilon_2 = -B$  and  $\varepsilon_1 < -2B$  ( $\varepsilon_2 = -B$  and  $\varepsilon_1 > 2B$ ), then the essential spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  is consists of the union of eight segments:  $\sigma_{ess}({}^2\tilde{H}_s^0) = [4A - 8B, 4A + 8B] \cup [3A - 6B + z, 3A + 6B + z] \cup [2A - 4B + 2z, 2A + 4B + 2z] \cup [2A - 4B + z_3, 2A + 4B + z_3] \cup [2A - 4B + z_4, 2A + 4B + z_4] \cup [A - 2B + 3z, A + 2B + 3z] \cup [A - 2B + z + z_3, A + 2B + z + z_3] \cup [A - 2B + z + z_4, A + 2B + z + z_4]$ , and discrete spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  is consists of six eigenvalues:  $\sigma_{disc}({}^2\tilde{H}_s^0) = \{4z, 2z + z_3, 2z + z_4, z_3 + z_4, 2z_3, 2z_4\}$ , where  $z = A + \varepsilon_1$ ,  $z_3$  and  $z_4$  are the additional eigenvalues of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$ .

**B).** If  $\varepsilon_1 = 0$  and  $\varepsilon_2 > 0$  ( $\varepsilon_1 = 0$  и  $\varepsilon_2 < -2B$ ), then the essential spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  is consists of the union of thirteen segments:  $\sigma_{ess}({}^2\tilde{H}_s^0) = [4A - 8B, 4A + 8B] \cup [3A - 6B + z_1, 3A + 6B + z_1] \cup [3A - 6B + z_2, 3A + 6B + z_2] \cup [2A - 4B + 2z_1, 2A + 4B + 2z_1] \cup [2A - 4B + 2z_2, 2A + 4B + 2z_2] \cup [2A - 4B + z_3, 2A + 4B + z_3] \cup [2A - 4B + z_4, 2A + 4B + z_4] \cup [A - 2B + 3z_1, A + 6B + 3z_1] \cup [A - 2B + z_1 + z_3, A + 2B + z_1 + z_3] \cup [A - 2B + z_1 + z_4, A + 2B + z_1 + z_4] \cup [A - 2B + 3z_2, A + 2B + 3z_2] \cup [A - 2B + z_2 + z_3, A + 2B + z_2 + z_3] \cup [A - 2B + z_2 + z_4, A + 2B + z_2 + z_4]$  and discrete spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  is consists of nine eigenvalues:  $\sigma_{disc}({}^2\tilde{H}_s^0) = \{4z_1, 2z_1 + z_3, 2z_1 + z_4, z_3 + z_4, 4z_2, 2z_2 + z_3, 2z_2 + z_4, 2z_3, 2z_4\}$ , where  $z_1 = A - \frac{2BE}{\sqrt{E^2 - 1}}$ ,

$$z_2 = A + \frac{2BE}{\sqrt{E^2 - 1}} \text{ and } E = \frac{(B + \varepsilon_2)^2}{\varepsilon_2^2 + 2B\varepsilon_2}.$$

**C).** If  $\varepsilon_2 > 0$  and  $\varepsilon_1 > \frac{2(\varepsilon_2^2 + 2B\varepsilon_2)}{B}$  ( $\varepsilon_2 < -2B$  и  $\varepsilon_1 > \frac{2(\varepsilon_2^2 + 2B\varepsilon_2)}{B}$ ), then the

essential spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  is consists of the union of eighth segments,

and discrete spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  is consists of six eigenvalues.

**D).** If  $\varepsilon_2 > 0$  and  $\varepsilon_1 < -\frac{2(\varepsilon_2^2 + 2B\varepsilon_2)}{B}$  ( $\varepsilon_2 < -2B$  and  $\varepsilon_1 < -\frac{2(\varepsilon_2^2 + 2B\varepsilon_2)}{B}$ ), then the essential spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  is consists of the union of eighth segments, and discrete spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  is consists of six eigenvalues.

**E).** If  $\varepsilon_2 > 0$  and  $0 < \varepsilon_1 < \frac{2(\varepsilon_2^2 + 2B\varepsilon_2)}{B}$  ( $\varepsilon_2 < -2B$  and  $0 < \varepsilon_1 < \frac{2(\varepsilon_2^2 + 2B\varepsilon_2)}{B}$ ), then the essential spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  is consists of the union of sixteen segments:  $\sigma_{ess}({}^2\tilde{H}_s^0) = [4A - 8B, 4A + 8B] \cup [3A - 6B + z_1, 3A + 6B + z_1] \cup [3A - 6B + z_2, 3A + 6B + z_2] \cup [2A - 4B + 2z_1, 2A + 4B + 2z_1] \cup [2A - 4B + 2z_2, 2A + 4B + 2z_2] \cup [2A - 12B + z_1 + z_2, 2A + 12B + z_1 + z_2] \cup [A - 2B + 3z_1, A + 2B + 3z_1] \cup [A - 2B + 2z_1 + z_2, A + 2B + 2z_1 + z_2] \cup [A - 2B + z_1 + 2z_2, A + 2B + z_1 + 2z_2] \cup [A - 2B + 3z_2, A + 2B + 3z_2] \cup [2A - 4B + z_3, 2A + 4B + z_3] \cup [2A - 4B + z_4, 2A + 4B + z_4] \cup [A - 6B + z_1 + z_3, A + 6B + z_1 + z_3] \cup [A - 2B + z_1 + z_4, A + 2B + z_1 + z_4] \cup [A - 2B + z_2 + z_3, A + 2B + z_2 + z_3] \cup [A - 2B + z_2 + z_4, A + 2B + z_2 + z_4]$ , and discrete spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  is

consists of fourteen eigenvalues:  $\sigma_{disc}({}^2\tilde{H}_s^0) = \{4z_1, 3z_1 + z_2, 2z_1 + 2z_2, z_1 + 3z_2, 4z_2, 2z_1 + z_3, 2z_1 + z_4, z_1 + z_2 + z_3, z_1 + z_2 + z_4, 2z_2 + z_3, 2z_2 + z_4, z_3 + z_4, 2z_3, 2z_4\}$ , where  $z_1$  and  $z_2$  are the eigenvalues of the operator  $\tilde{H}_1$ .

**F).** If  $\varepsilon_2 > 0$  and  $-\frac{2(\varepsilon_2^2 + 2B\varepsilon_2)}{B} < \varepsilon_1 < 0$  ( $\varepsilon_2 < -2B$  and  $-\frac{2(\varepsilon_2^2 + 2B\varepsilon_2)}{B} < \varepsilon_1 < 0$ ), and real number  $0 < \alpha < 1$ , then the essential spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  is consists of the union of sixteen segments, and discrete spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  is consists of fourteen eigenvalues.

**K).** If  $-2B < \varepsilon_2 < 0$ , then the essential spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  is consists of a union of three segments:  $\sigma_{ess}({}^2\tilde{H}_s^0) = [4A - 8B, 4A + 8B] \cup [2A - 4B + z_3, 2A + 4B + z_3] \cup [2A - 4B + z_4, 2A + 4B + z_4]$ , and discrete spectrum of the operator  ${}^2\tilde{H}_s^0$  is consists of three eigenvalue:  $\sigma_{disc}({}^2\tilde{H}_s^0) = \{2z_3, 2z_4, z_3 + z_4\}$ .

**Conclusion.** The study shows that the essential spectrum of the energy operator of four electron systems in the impurity Hubbard model in the second singlet state can by consist of unions of eight segments, or thirteen, or sixteen, or three segments, and the discrete spectrum of the system consists, respectively, of six, or nine, or fourteen, or three eigenvalues. We recommended that continue your research in this area.

### REFERENCES

1. J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. // Proc. Roy. Soc. A. 1963. V. 276. P. 238-257.
2. P. W. Anderson. Localized Magnetic States in Metals. // Phys. Rev. 1961. V. 124. P. 41-53.
3. S. P. Shubin, S. V. Wonsowsky. On the electron theory of metals. // Proc. Roy. Soc. A. 1934. V. 145. P. 159-172.
4. P. Arovas Daniel, Berg Erez, A. Kivelson Steven, and Raghy Srinivas. The Hubbard Model. // Annu. Rev. Condens. Matter Physics. 2022. V. 13: P. 239-274.
5. B. V. Karpenko, V. V. Dyakin, and G. L. Budrina. Two electrons in the Hubbard Model. // Phys. Met. Metallogr. 1986. V. 61. P. 702-706.
6. S. M. Tashpulatov. Spectral Properties of three-electron systems in the Hubbard Model. // Theoretical and Mathematical Physics., 2014. V. 179 (3). P. 712-728.
7. S. M. Tashpulatov. Spectra of the energy operator of four-electron systems in the triplet state in the Hubbard Model. // Journal Phys. Conf. Ser. 2016. V. 697. 012025, P. 1-25.
8. S. M. Tashpulatov. The structure of essential spectra and discrete spectrum of four-electron systems in the Hubbard model in a singlet state. // Lobachevskii Journal of Mathematics. 2017. V. 38 (3). P. 530-541.
9. S. M. Tashpulatov. Spectra of the Energy Operator of Two-Electron System in the Impurity Hubbard Model. // Journal of Applied Mathematics and Physics. 2022. V. 10, P. 2743-2779. <https://doi.org/10.4236/jamp.2022.109184>
10. S. M. Tashpulatov. Spectra of the two-electron System in the Impurity Hubbard Model. LAP LAMBERT Academic Publishing. 2022. ISBN: 978-620-5-51516-7.
11. M. Reed, and B. Simon. Methods of Modern Mathematical Physics, Vol. 4, Operator Analysis. Acad. Press, New York. 1982.



UDK:53.096: 538.91

**Muhriddin TURSUNOV,**  
O'zMU Fizika fakulteti tayanch doktoranti  
E-mail: muhriddintursunov.1995@mail.ru  
**Gulmurza ABDURAXMONOV,**  
O'zMU Fizika fakulteti professori

Fizika-matematika fanlari doktori, professor B.Umirzakov taqrizi asosida

### THE VARIATION OF RESISTANCE WITH TEMPERATURE IN THICK-FILM RESISTORS

Annotation

This article examines the variation of resistance (R) in RuO<sub>2</sub>-based thick-film resistors within the temperature range of 300 - 1125 K. The study provides a detailed analysis of the composition, fabrication technology, as well as structural and physical property changes of thick-film resistors. A sharp change in resistance with increasing temperature was observed, particularly in the temperature range of 800 - 1000 K, with the maximum values linked to structural phase transitions of silicates and the diffusion of conductive phase particles. The research findings, including factors influencing electrical conductivity such as microstructure, temperature, and doping levels are significant for understanding the physical properties of thick-film resistors and can be applied to the development of highly efficient materials.

**Key words:** Thick-film resistor, structural phase transitions, conductive phase diffusion, doped silicate glass.

### ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СОПРОТИВЛЕНИЯ ТОЛСТОПЛЕНОЧНЫХ РЕЗИСТОРОВ

Аннотация

В статье изучено изменение сопротивления (R) толсто пленочных резисторов на основе RuO<sub>2</sub> в диапазоне температур 300 - 1125 K. Проведен детальный анализ состава, технологии изготовления, а также изменений в структуре и физических свойствах толсто пленочных резисторов. Значительные изменения сопротивления наблюдались с повышением температуры, особенно в диапазоне 800 - 1000 K, где максимальные значения были связаны с фазовыми переходами в структурах силикатов и диффузией частиц проводящей фазы. Результаты исследования, включая факторы, влияющие на электропроводимость, такие как микроструктура материала, температура и степень легирования, имеют важное значение для понимания физических свойств толсто пленочных резисторов и могут быть использованы для разработки материалов с высокой производительностью.

**Ключевые слова:** толсто пленочный резистор, структурные фазовые переходы, диффузия проводящей фазы, легированное силикатное стекло.

### QALIN QATLAMLI REZISTORLARDA QARSHILIKNING TEMPERATURA BO'YLAB O'ZGARISHI

Аннотация

Maqolada RuO<sub>2</sub> asosidagi qalin qatlamli rezistorlarning qarshiligi (R) ning 300 -1125 K harorat oralig'ida o'zgarishi o'rganilgan. Tadqiqotda qalin qatlamli rezistorlarning tarkibi, tayyorlash texnologiyasi, shuningdek, ularning struktura va fizikaviy xususiyatlaridagi o'zgarishlar batafsil tahlil qilingan. Harorat oshishi bilan qarshilikdagi keskin o'zgarishlar, ayniqsa, 800 - 1000 K harorat oralig'ida kuzatilgan maksimal qiymatlar silikatlarining struktura faza o'tishlari va o'tkazuvchi faza zarrachalarining diffuziyasi bilan bog'langanligi aniqlandi. Tadqiqot natijalari, jumladan, elektr o'tkazuvchanlikka ta'sir qiluvchi omillar materialning mikrostrukturasini, harorat va legirlash darajasining qalin qatlamli rezistorlarning fizik xususiyatlariga ta'sirini tushunishda muhim bo'lib, yuqori samaradorlikka ega materiallar yaratishda qo'llanishi mumkin.

**Kalit so'zlar:** Qalin qatlamli rezistor, struktura faza o'tishlari, o'tkazuvchi faza diffuziyasi, legirlangan slikt shisha.

**Kirish.** Qalin qatlamli rezistorlar (QQR) tuzilishi rentgen va neytron diffraksiyasi, EXAFS, infraqizil va Raman spektroskopiyasi, elektron mikroskopiya kabi turli usullar yordamida keng o'rganilmoqda [1, 2]. QQR aralash silikat shisha va o'tkazuvchi faza (O'F) materiallaridan tayyorlanadi. O'tkazuvchi faza odatda elektr o'tkazuvchanligi yuqori bo'lgan oksid yoki metall oksidlaridan iborat bo'ladi. Masalan, RuO<sub>2</sub>, Bi<sub>2</sub>Ru<sub>2</sub>O<sub>7</sub>, va SnO<sub>2</sub> kabi materiallar keng qo'llaniladi. Bu materiallar maxsus jarayonda, ya'ni taxminan 1120 K haroratda 10 daqiqada davomida pishiriladi.

Qalin plyonkali rezistorlar (QQR) elektr o'tkazuvchanligini tushuntirish uchun bir nechta nazariy modellar ishlab chiqilgan: masalan, hopping (sakrash), to'siq orqali tunnel effekti, effektiv muhit modeli va perkolatsiya modeli. Dastlab bu modellar tartibsiz materiallar uchun ishlab chiqilgan bo'lib, ular faqat cheklangan sharoitlarda QQR uchun mos keladi.

Boshqa tomondan, eksperimental ma'lumotlarni Mott qonunining umumlashtirilgan shakli bilan yaxshi moslashtirish mumkin [3]:

$$\rho = A \cdot T^a \exp(T_0/T)^{1/b} \quad (1)$$

Bu yerda  $\rho$  QQR ning solishtirma qarshiligi, T namunadagi harorat, A va T<sub>0</sub> esa moslama koeffitsientlari. Parametrlar a va b qiymatlarini keng diapazonda (1 dan 7 gacha) tanlash mumkin. Ushbu yondashuv shuni ko'rsatadiki, ilgari taklif qilingan modellar eksperimental natijalarni tushuntirishda yetarli emas.

Qalin plyonkali rezistorlar (QQR) tayyorlash jarayonida pishirish davrida yuzaga keladigan fizik va kimyoviy jarayonlar, shuningdek silikatlarining tuzilmaviy o'zgarishlari mavjud maqolalarda yetarlicha o'rganilmagan. Xususan, QQR ni tayyorlashda kirishma miqdorining o'zgarishi, materialning bazi xususiyatlari, masalan, qarshilik ( $\rho$ ) va Zeebek koeffitsiyenti (S) kabi xususiyatlarga katta ta'sir ko'rsatadi. Shu sababli, bu jarayonlarni batafsil o'rganish, QQR ning elektr o'tkazuvchanligi va Zeebek koeffitsiyentining haroratga bog'liq ravishda o'zgarishini to'g'ri tushunish uchun juda muhimdir [4, 5, 6].

**Material va metodlar.** Legirlangan slikt shisha (1-jadval) korund tigellarida 1620 K haroratda 1 soat davomida pishirildi. Eritilgan shisha distillangan suvga quyildi. Olingan shisha zarrachalari agat to'plari yordamida tegirmonda maydalandi.

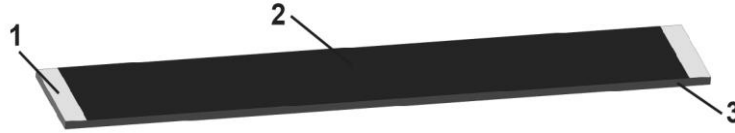
1-jadval. Tadqiq qilingan LSSH namunalarning tarkibi (massaviy %)

Namunalar	Shisha tarkibiy qismlari					T <sub>f</sub> /T <sub>g</sub> , K/h	Ligatura (RuO <sub>2</sub> )	
	SiO <sub>2</sub>	PbO	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CuO	MnO <sub>2</sub>			
1	11.0	61.9	0.7	1.4	10.0	15.0	1623/1	5.0
2	11.0	61.9	0.7	1.4	10.0	15.0	1623/1	10.0
3	11.0	61.9	0.7	1.4	10.0	15.0	1623/1	15.0
4	11.0	61.9	0.7	1.4	10.0	15.0	1623/1	20.0

5	11.0	61.9	0.7	1.4	10.0	15.0	1623/1	25.0
6	11.0	61.9	0.7	1.4	10.0	15.0	1623/1	30.0

Shisha kukunlari distillangan suvda 40 sm balandlikdagi shisha silindrlarda 10 va 30 daqiqa davomida ikki marta fraksiyalash amalga oshirildi, bu shisha kukuni zarrachalarining bir xil o'lcham taqsimotini olish uchun bajarildi. O'rtacha zarracha o'lchami 0,5–2  $\mu\text{m}$  bo'lgan shisha kukuni QQR tayyorlash uchun ishlatildi.

Shisha va o'tkazgich fazasi kukunlari aralastirilib, agat tegirmonda rezistiv pasta tayyorlandi. Pasta tayyorlash jarayoni 1 soat davom etdi. Rezistiv pasta 96%  $\text{Al}_2\text{O}_3$  dan tayyorlangan keramika taglikga trafaret yordamida o'tqazildi. Keyin u 420 K da 1 soat davomida quritildi va 1120 K da 10 daqiqa davomida pishirildi. Kumush kontaktlar keramika plastinka ustiga oldindan o'tqazilgan edi. Tayyorlangan rezistorlar o'lchami  $56 \times 9 \times 0,060$  mm bo'ldi. 1-rasmda legirlangan slikt shishaga  $\text{RuO}_2$  oksidini legirlash natijasida hosil bo'lgan qalin qatlamli rezistorning rasmi keltirilgan.



1-rasm. Qalin qatlamli rezistor. 1-kontakt qatlam, 2- rezistiv qatlam va 3- keramik taglik

Tayyorlangan rezistorga platina kontakt o'rnatilish pechda 300–1125 K harorat oralig'ida qarshilikning temperatura bo'ylab o'zgarishi o'lchandi. Bunda qarshilikni o'lchashda RIGOL DM3058E DIGITAL MULTIMETER dan va temperaturani o'lchashda FLUKE Ti400 PRO THERMAL IMAGER dan foydalanildi.

**Natijalar va tahlillar.** Qo'rg'oshin-silikat shisha hosil bo'lishi jarayonida moddalar o'zaro ta'sirga kirishadi va unda murakkab tarkibli silikatlar hamda o'zgaruvchan polimorf tarkibli kremniy dioksid hosil bo'ladi.

Ko'plab tadqiqotlar shuni ko'rsatdiki, kristobalit, tridimit kristallari va kvarts qoldiqlari shakllanadi hamda ularning kristallanish jarayoni silikatli shishalarda kuzatilgan [7]. Kristallitlarning o'lchami bu tadqiqot natijalariga ko'ra 10 dan 100 Å gacha o'zgaradi. Shuningdek, eng oddiy  $\text{SiO}_2$  –  $\text{PbO}$  tizimida turli p va q qiymatlari bilan (ular 1 dan 4 gacha o'zgaradi)  $\text{PbO} \cdot \text{qSiO}_2$  qo'rg'oshin-silikat kristallitlari shakllanadi. Infraqizil spektr o'rganish natijalari  $[\text{SiO}_4]$  va  $[\text{PbO}_4]$  tuzilmalari eng tipik ekanligini ko'rsatdi.

Shishaning gamogen bo'lmagan mikro tuzilmasini, ayrim moddalar yuqori konsentratsiyaga ega bo'lgan zonalarining o'lchami taxminan 1  $\mu\text{m}$  ekanligini hisobga olib, turli mikroskopik zonalarida shisha xususiyatlarining sezilarli darajada o'zgarishini tushunish mumkin. Masalan, legirlangan QQR dagi kvarts qoldiqlari va ko'p qo'rg'oshin-silikatlar 373 K dan 1040 K gacha haroratda tuzilmaviy o'zgarishlarga uchraydi yoki eriydi [4] (Jadval 2).

$\beta$ -kvartslarning  $\alpha$ -kvartslarga aylanishi ba'zi harorat diapazonida fizik xususiyatlarning asta-sekin o'zgarishi bilan bog'liq va o'tish nuqtasida o'zining ekstremumiga yetadi. Bu jarayon  $\beta$ -kvartslarda tebranishlarning paydo bo'lishi va  $\alpha$ -kvartslar miqdorining asta-sekin ortishi bilan bog'liq (mikroeterogen ikki fazali holatning nuqtasida). Shu nuqtada tebranishlar eng ko'p rivojlanadi va kvartslarning tuzilishi bo'shashadi (elementar hujayra hajmi 6% ga kattalashadi).

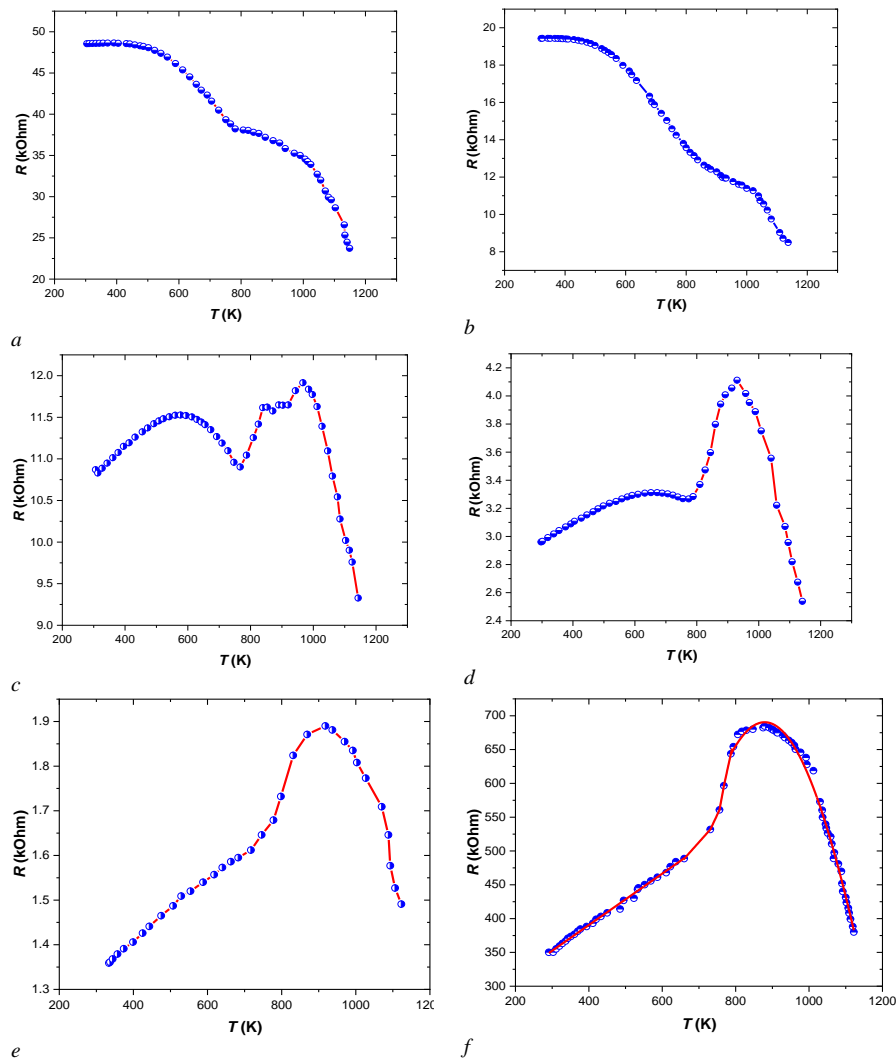
2-jadval. Slikt shishada struktura o'zgarishi

Birikma	Harorat, K	O'tish xarakteri
$\text{SiO}_2$	388	$\beta$ - $\gamma$ -tridimit
$\text{SiO}_2$	435	$\alpha$ - $\beta$ -tridimit
$\text{SiO}_2$	493	$\alpha$ - $\beta$ -kristobalit
$\text{SiO}_2$	847	$\alpha$ - $\beta$ -kvars
$\text{Pb}_2\text{O}_3\text{SiO}_4$	428	$\beta$ - $\gamma$ -o'tish
$\text{Pb}_2\text{O}_3\text{SiO}_4$	993	$\alpha$ - $\beta$ -o'tish
$\text{Pb}_2\text{SiO}_4$	998	eritish (melting)
$\text{Pb}_2\text{SiO}_4$	1016	eritish (melting)
$\text{Pb}_2\text{SiO}_6$	1037	eritish (melting)

Ma'lumki, [5, 6], materialning o'tkazuvchanligi, termoelektrik va galvanomagnit xususiyatlari qisqa masofadagi tartib (ya'ni atomlararo masofa va bog'lanish burchagi) bilan belgilanadi. Shuning uchun biz mazkur birikmalarning tuzilmaviy o'tishlari natijasida qisqa masofadagi tartib parametrlari katta o'zgarishi mumkinligini va bu o'zgarishlar taqiqlangan zonaning kengligini ( $E_g$ ), effektiv massa ( $m^*$ ) va QQR tarkibidagi o'tkazgich fazasi (O'F) zarrachalari orasidagi shisha qatlamlarda zaryad tashuvchilarning o'rtacha yashash vaqti ( $\tau$ ) ni keskin o'zgartirishi mumkin, deb taxmin qilamiz. Legirlash jarayonida Ru atomlarining diffuziyasi shisha tarkibi va tuzilishiga bog'liqdir [9]. Yuqorida aytib o'tilgan birikmalarning asosiy reflekslari  $d = 3\text{--}5$  Å diapazonida joylashgan bo'lib, ular  $2\text{SiO}_2 \cdot \text{PbO}$  shisha uchun keng yoyilgan halqaga mos keladi.

QQR tarkibidagi birikmalarning yuqori haroratlarda yuzaga keladigan tuzilmaviy o'zgarishlari qarshilik ( $\rho$ ) va termoelektrik kuchlanishini ( $S$ ) o'zgartirishi kerak.  $T = 390\text{--}1040$  K oralig'ida biz  $R(T)$  ning tegishli o'zgarishlarini kuzatdik (2-rasm).

2-rasmda turli  $\text{RuO}_2$  konsentratsiyali (5% dan 30% gacha) qalin qatlamli rezistorlarda qarshilikning temperatura bo'ylab o'zgarishi tasvirlangan. Grafiklar turli konsentratsiyalarda harorat oshishi bilan qarshilikning o'zgarishini ko'rsatadi.  $\text{RuO}_2$  konsentratsiyasi qalin qatlamli rezistorlarning qarshiligi va uning haroratga bog'liq o'zgarishini belgilovchi asosiy omildir.



2-rasm. Har xil konsentratsiyali qalin qatlamli rezistorlarda qarshilikning temperatura bo'ylab o'zgarishi. a) 5%, b) 10%, c) 15%, d) 20%, e) 25% va f) 30%

Konsentratsiya ortgan sari o'tkazuvchi faza zarrachalari orasidagi masofa qisqaradi, bu esa zaryad tashuvchilarni bir zarrachadan boshqasiga o'tishini osonlashtiradi. Natijada, yuqori konsentratsiyalarda qarshilikning kamayishi kuzatiladi, past konsentratsiyalarda esa qarshilik yuqoriligicha qoladi. Shisha qatlamlaridagi diffuziya masofasi ham konsentratsiyaga bog'liq bo'lib, past konsentratsiyalarda bu masofa uzoqroq va transport jarayonlari samaradorligi past bo'ladi. Harorat oshishi bilan  $\text{RuO}_2$  zarrachalarining shisha matritsaga diffuziyasi faollashadi, ammo bu jarayon yuqori konsentratsiyalarda yanada samaraliroq kechadi, chunki zaryad tashuvchilar uchun kanal ko'proq va o'tish osonroq bo'ladi. Konsentratsiya, shuningdek, struktura fazaviy o'tishlarining ta'sir kuchini belgilaydi. Yuqori konsentratsiyalarda silikat shishaning kristallik tarkibi o'zgarish jarayonlari kuchayadi, masalan,  $\alpha$ - $\beta$ -kvarts yoki  $\alpha$ - $\beta$ -tridimit o'tishlari haroratning o'sishi bilan yanada sezilarli bo'ladi. Bular kristall tuzilmaning bo'shashishiga olib kelib, elektron o'tkazuvchanligini oshiradi. Bunday struktura o'zgarishlari past konsentratsiyalarda kamroq ta'sir qiladi, natijada qarshilik yuqori bo'lib qoladi.

Shuningdek, R ning keskin oshishi kuzatiladigan harorat shishaning yopishqoqligi, issiqlik kengayish koeffitsienti, dielektrik o'tkazuvchanligi, o'ziga xos issiqlik kabi mikroskopik parametrlar anomalialari bilan mos keladi [7]. Bu anomalialar shisha tarkibidagi kvarts qoldiqlarining tuzilmaviy o'zgarishlari bilan bog'liq.

QQR ning legirlash jarayonida O'F ning shishaga diffuziyasi [8] da o'rganilgan. Ushbu tadqiqotda O'F zarrachalari 0.2–0.5  $\mu\text{m}$  diametrga ega sferik shaklda deb hisoblangan. Legirlash harorati  $T_L$  va QQR ning qarshiligi orasida kuchli korrelyatsiya aniqlangan (eng kichik kvadratlar usuli bilan juft korrelyatsiya koeffitsienti 0.9). Ushbu tajribalar  $\text{RuO}_2$  va  $\text{Bi}_2\text{Ru}_2\text{O}_7$  ning shishaga diffuziya koeffitsientini baholash imkonini bergan.  $C_v = 20\%$  bo'lganda, legirlangan QQRda O'F zarrachalari orasidagi o'rtacha masofa 1–1.5  $\mu\text{m}$  bo'lgan va diffuziya masofasi ham 1–1.5  $\mu\text{m}$  bo'lgan. Shunday qilib, mualliflar shisha biriktiruvchi butun hajmi diffuziya tufayli yetarli darajada bir xil bo'lgan, degan xulosaga kelganlar.

Legirlash atmosferasidagi  $\text{O}_2$  ning qisman bosimining QQR o'tkazuvchanligiga ta'siri [9] da o'rganilgan. Ushbu tadqiqotda qo'rg'oshin-silikatli shisha holatida legirlash jarayonida ikki va uch marta zaryadlangan Pb ionlarining muvozanati o'tkazuvchanlikka sezilarli ta'sir qilishi xulosa qilingan.

QQR ning ba'zi kinetik xususiyatlarini baholashga harakat qilaylik. O'F va shisha zarrachalarini sfera shaklida deb hisoblaymiz. O'F zarrachalarining birining massasi  $M_1 = 4\pi r^3 \gamma_o / 3$  bo'lib, QQR bir birlik hajmidagi O'F massasi  $M_o = C_v \gamma_o$ . Shunga mos ravishda O'F zarrachalarining soni  $N_o = M_o / M_1 = 3C_v / (4\pi r^3)$  bo'lib, QQR dagi O'F zarrachalari orasidagi o'rtacha masofa  $l = N_o^{-1/3} = r \{4\pi(3C_v^{-1})\}^{1/3}$  bilan aniqlanadi.

Masalan,  $C_v = 16\%$   $\text{RuO}_2$  bo'lgan QQR uchun zarrachalar o'rtasidagi masofa  $l = 1.65 \mu\text{m}$  bo'ladi. QQR ning o'tkazuvchanligi  $C_v$  ning kamayishi bilan kamayadi va aktivlangan tushga ega bo'ladi. Bu degani, O'F zarrachalari orasidagi o'rtacha masofa ortishi bilan shisha qatlamlaridagi diffuziya kirishma darajasi kamayadi va Fermi darajasi ( $E_f$ ) o'tkazuvchanlik zonasining pastki qismidan taqiqlangan zona tomon siljiydi.

Biroq, 700–1100 K da boshqa vaziyat yuzaga keladi (2-rasm). Haroratning ortishi bilan o'rtacha atomlararo masofa ortadi. Shunday qilib, QQR ning tuzilmasida yangi silikat polimorflari hosil bo'ladi. Bu esa tashuvchilar konsentratsiyasining kamayishiga va degeneratsiyaning yo'qolishiga olib keladi. Qarshilikning (R) maksimal qiymatidan yuqori haroratda silikatlarining boshqa polimorflari hosil bo'ladi va QQR

tarkibidagi ba'zi birikmalar eriydi (2-jadvalga qarang). Erish jarayonida uzilgan kimyoviy bog'lar akseptor sifatida ishlaydi va elektronlarni ushlab qoladi. Shuning uchun QQR bir qator haroratlarda kovakli o'tkazuvchanlikka ega bo'ladi (ya'ni  $S < 0$ ). Elektronlarning issiqlik bilan aktivlanishi 1100 K da ustunlik qiladi va QQR yana elektron o'tkazuvchanlikka ega bo'ladi ( $S > 0$ ).

QQR yorug'lik, harorat va magnit maydoniga sezgir emas. Demak, u yerda erkin tashuvchilar konsentratsiyasi yuqori ( $n > 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ) va xona haroratida tashuvchilar gazi degeneratsiyaga uchraydi. QQRda uzoq masofali tartib yo'q, shuning uchun zaryad tashuvchilarining o'rtacha erkin yo'li atomlararo masofaga teng deb hisoblash mumkin ( $d \approx 2 \times 10^{-8} \text{ cm}$ ), uning tezligi issiqlik ( $v \approx 10^7 \text{ cm/s}$ ) bilan belgilanadi. Shunday qilib,  $\rho = 2.5 \Omega \text{ cm}$  bo'lgan QQRda zaryad tashuvchilarning harakatchanligi  $\mu = 1/(\text{ne}\rho) = 250 \text{ cm}^2/(\text{V s})$  va zaryad tashuvchilarning effektiv massasi  $m \approx 1.5 \times 10^{-4} m_0^*$  ( $m_0$  – erkin elektron massasi).

Xulosa. Maqolada  $\text{RuO}_2$  asosidagi qalin qatlamli rezistorlarning qarshiligining (R) 300–1125 K harorat oralig'ida haroratga bog'liq o'zgarishlari tahlil qilindi va buni quyidagicha izohlash mumkin:

1. QQR tarkibidagi silikatlarining 673 K dan yuqori haroratlarda yuzaga keladigan tuzilmaviy o'zgarishlari elektron gazi zichligining kamayishiga va degeneratsiyaning yo'qolishiga olib keladi, natijada  $\rho(T)$  o'z maksimal qiymatiga erishadi.

2. 1023 K dan yuqori haroratlarda kovakli o'tkazuvchanlik ustunlik qiladi ( $S < 0$ ). Bu silikat oynasida hosil bo'lgan qo'rg'oshin-silikatlarning erishi bilan izohlanadi.

3. QQRda erkin zaryad tashuvchilarning harakatchanligi  $250 \text{ cm}^2/(\text{V s})$  va samarali massasi  $1.5 \times 10^{-4} m_0$  deb baholandi.

#### ADABIYOTLAR

1. C. Grimaldi, T. Maeder, P. Ryser, and S. Straessler, Appl. Phys. Lett. 83, 189 (2003).
2. C. Meneghini, S. Mabilio, F. Pivetti, I. Selmi, M. Prudenziati, and B. Morten, J. Appl. Phys. 86, 590 (1999).
3. N. F. Mott and E. A. Davis, Electronic Processes in Non-Crystalline Materials, Oxford University Press (Clarendon, London and New York, 1971).
4. A. N. Winchell and H. Winchell, The Microscopical Characters of Artificial Solid Substances: Optical Properties of Artificial Minerals (Academic Press, New York and London, 1964).
5. M. Cutler, Liquid Semiconductors (Academic Press, New York and London, 1977).
6. K. Seeger, Semiconductor Physics. Springer-Verlag, Wien and New York, 1973.
7. W. Eitel, The Physical Chemistry of the Silicates (The University of Chicago Press, 1954).
8. G. Abdurakhmanov and G. S. Vahidova, Zh. Tekh. Fiz. 7, 187 (1995).
9. G. H. Frischat and W. Beier, J. Non-Cryst. Solids 71, 77 (1985).



UDK:539.21

Mohinur CHORIYEVA,

O'zRFA U.Arifov nomidagi Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti tayanch doktoranti

E-mail: Chorievamohinur667@gmail.com

Ikrom UROLOV,

O'zRFA U.Arifov nomidagi Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti tayanch doktoranti, O'zMU o'qituvchisi

Ishmumin YADGAROV,

O'zRFA U.Arifov nomidagi Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti professori, f-m.f.d

E-mail: ishmuminyadgarov@gmail.com

G'aniboy RAXMANOV,

O'zMU "Umumiy fizika" kafedrasida professori v.b

O'zMU dotsenti, PhD G'. Eshonqulov taqrizi asosida

### FULLEREN C<sub>60</sub> MOLEKULASINING ALYUMINIY AL(001) SIRTDA ADSORBSIYASI JARAYONLARINI KOMPYUTERDA MODELLASHTIRISH

Annotatsiya

Mazkur tadqiqot ishida fullerene C<sub>60</sub> molekulasining ideal (defektlar va rekonstruksiyalardan xoli) alyuminiy Al(001) sirtida adsorbsiyasi molekulyar dinamika (MD) usuliga asoslangan holda LAMMPS paket dasturi yordamida simulyatsiya qilinib, fullerene molekulasining uch xil konfiguratsiyali adsorbsiyasi o'rganilgan. Har bir konfiguratsiyaga mos adsorbsiya energiyalari aniqlanib, ularning tahlili natijasi barqaror adsorbsiyalanish holatlarini aniqlangan va ularning sabablari tushuntirilgan. Shuningdek, Al-C bog'lar uzunligi va ularning tabiati haqida aniqlanib xulosalar qilingan.

**Kalit so'zlar:** sirt, fullerene molekulasini, adsorbsiyasi, alyuminiy, modellash, Brenner potentsiali, bog' uzunligi, atom, potentsial energiya, o'zaro ta'sirlar.

### COMPUTER MODELING OF ADSORPTION PROCESSES OF FULLERENE C<sub>60</sub> MOLECULE ON ALUMINUM AL(001) SURFACE

Annotation

In this study, the adsorption of fullerene C<sub>60</sub> molecule on an ideal (defect and reconstruction-free) aluminum Al(001) surface was simulated using the LAMMPS package based on the molecular dynamics (MD) method, and the adsorption of the fullerene molecule in three different configurations was studied. Adsorption energies corresponding to each configuration were determined, the results of their analysis revealed stable adsorption states, and their reasons were explained. Also, clear conclusions were made about the length of Al-C bonds and their nature.

**Key words:** surface, fullerene molecule, adsorption, aluminum, modeling, Brenner potential, bond length, atom, potential energy, interactions.

### КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ АДСОРБЦИИ МОЛЕКУЛЫ ФУЛЛЕРЕНА C<sub>60</sub> НА ПОВЕРХНОСТИ АЛЮМИНИЯ AL(001)

Аннотация

В данной работе с помощью пакета LAMMPS на основе метода молекулярной динамики (МД) моделировалась адсорбция молекулы фуллерена C<sub>60</sub> на идеальной (бездефектной и безреконструкционной) поверхности алюминия Al(001), а также адсорбция молекулы фуллерена в были изучены три различные конфигурации. Определены энергии адсорбции, соответствующие каждой конфигурации, результаты их анализа выявили устойчивые состояния адсорбции и объяснены их причины. Также были сделаны четкие выводы о длине связей Al-C и их природе.

**Ключевые слова:** поверхность, молекула фуллерена, адсорбция, алюминий, моделирование, потенциал Бреннера, длина связи, атом, потенциальная энергия, взаимодействия.

**Kirish.** So'nggi yillarda zamonaviy texnologiyalarning rivojlanishi materiallarning texnik xususiyatlarini sifat jihatidan yaxshilashni talab qiladi, bunga esa faqatgina tubdan yangi strukturaviy va funksional materiallarni yaratish va birlashtirish orqali erishish mumkin. Materiallardan foydalanish shartlari (operativ) yangi konstruktiv materiallarga juda qattiq talablar qo'yadi, ularning asosiy minimal og'irlik xususiyatlariga ega bo'lgan maksimal kuch va qat'iylikni ta'minlashdir. Monolitik an'anaviy materiallarni kompozit materiallar bilan almashirish strukturalarning ishonchiligi va og'irlik ta'sirini oshiradi [1-5].

Sanoat rivojlanishining yo'nalishlaridan biri yangi funksional va konstruktiv kompozit materiallarga o'tishdir. Yadro, aerokosmik, avtomobilsozlik, energetika, yarimo'tkazgichlar, transport va boshqa ko'plab texnologiya sohalaridagi taraqqiyot asosan nanodispers fazasi va yaxshilangan funksional xususiyatlariga ega kompozitsion ishlab chiqarishning yangi usullarini ishlab chiqishga asoslangan [6-12].

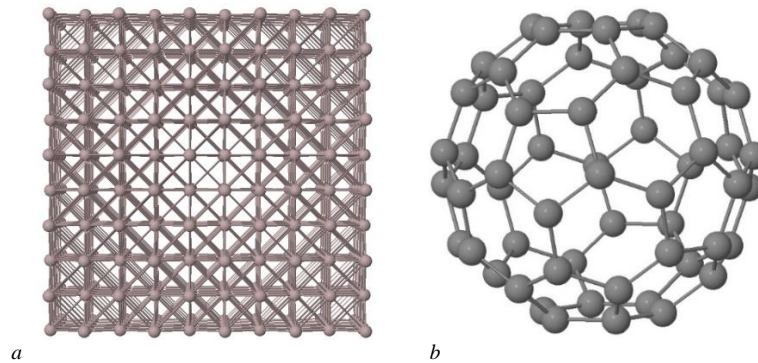
Kompozit materiallar [13-14] ikki yoki undan ortiq turli materiallarni birlashtirib ishlab chiqiladi, ularning asosini matritsa va unga kiritilgan tashqi elementlar tashkil qiladi. Turli materiallarning kombinatsiyasi ishlatiladigan kompozitlar sof materiallarga nisbatan yuqori sifatga ega ekanligi bilan tavsiflanadi. Asosiy matritsaga va ishlatiladigan mustahkamlovchi materialga qarab, kompozitlar ikki toifaga bo'linadi [14]. Asosiy matritsaga asoslanib, ular metall matritsa, keramik matritsa va polimer matritsa materiallariga bo'linadi. Ko'p sonli qulay xususiyatlar tufayli alyuminiy va uning qotishmalari metall matritsa (Al, Cu, Ti, Mg va Fe va boshqalar) uchun mavjud variantlar orasida eng ko'p qo'llaniladi. Alyuminiy kristalining eng muhim xususiyati shundaki, u past zichlik, yuqori quvvat va past qarshilikdan iborat bo'ladi [16,17]. Yuqori quvvatli komponentlar yoki nisbatan past massaga ega mashinalar alyuminiy matritsali kompozitlar yordamida ishlab chiqarilishi mumkin. Bunday mustahkam va yengil kompozit materiallarga aviatsiya va avtomobilsozlik sanoatida talab ortib bormoqda.

Turli tuzilishdagi uglerod zarralari muhim xususiyatlarga ega bo'lgan kompozit materiallarni yaratishda keng qo'llaniladi [18,19]. C<sub>60</sub> fullerene bilan to'ldirilgan alyuminiy-matritsali kompozitlar alohida qiziqish uyg'otadi [19-21]. Kompozit materiallarni yaratishda asosiy masalalardan biri Matritsa va to'ldiruvchi moddalarning o'zaro ta'siri jarayonlarini tadqiq qilishdir. C<sub>60</sub> fullerene turli kristalli alyuminiy yuzalar bilan o'zaro ta'siri avvalroq eksperimental [21-24] va nazariy jihatdan [25] o'rganilgan. Ma'lumki, C<sub>60</sub> alyuminiy sirt bilan o'zaro ta'sirlashganda, Al va C atomlari o'rtasida kovalent kimyoviy bog'lanish paydo bo'ladi [21-23].

Hozirgi vaqtda C<sub>60</sub> fullerene molekullari va Al(100) va Al(110) yuzasi orasidagi o'zaro ta'sir jarayonlari etarlicha o'rganilmagan. atomlar.

Ushbu tadqiqotning maqsadi – yuqoridagilardan kelib chiqqan holda, fulleren  $C_{60}$  molekulasining alyuminiy Al(001) sirtida adsorbsiyasi jarayonini molekulyar dinamika (MD) usuli asosida o'rganish va energiyani minimizatsiyalash usuli orqali fulleren molekulasining taglik sirtida adsorbsiyalanish energiyasi, shuningdek mazkur protsessda yuzaga keluvchi Al-C bog'larning uzunligi aniqlash, aniqlangan energiya va uzunlik qiymatlarini tahlil qilish orqali adsorbsiya turi, bog'lanishlarning tabiati, barqaror adsorbsiya holatlari va konfiguratsiyalari haqida ilmiy xulosalar berish hisoblanadi.

**Tadqiqot metodologiyasi.** Mazkur tadqiqot ishida qarab chiqilgan barcha o'zaro ta'sir jarayonlari molekulyar dinamika usuliga asoslangan ochiq manba LAMMPS paket dasturi yordamida simulyatsiya qilingan [26]. LAMMPS paket dasturi turli atomlararo potentsiallar (kuch maydonlari) va ma'lum chegaraviy shartlardan foydalangan holda turli sistemalarni, masalan, qattiq holatdagi strukturalar (metall, keramika) ni kabi makroskopik tizimlarni ular bir nechta atomdan tortib milliardlab sondagi atomlarga ega bo'lgan 2D yoki 3D strukturaviy holatlarini modellashtirish mumkin [26]. Shunga ko'ra, ushbu tadqiqot ishining ob'ektlari bo'lmish alyuminiy taglik va  $C_{60}$  fulleren molekulasini tashkil qiluvchi atomlar orasidagi Al-Al, C-C va Al-C bog'lanishli o'zaro ta'sirlar Tersoff atomlararo potentsiali yordamida ifoda etilgan [27]. Ushbu potentsial yordamida olingan natijalar taglik va  $C_{60}$  fulleren molekulasining to'liq potentsial energiyalarini o'zaro solishtirish orqali tekshirilgan. Alyuminiy taglik atomlarining koordinatalari LAMMPS paket dasturi yordamida yaratildi. Ushbu taglik o'lchamlari  $18.34 \times 18.34 \times 18.34$  Å ga, atomlari soni 500 ga teng monokristall bo'lib, uning kristall panjara doimiysi 4.05 Å ga teng. Alyuminiy kristall panjarasi yoqlari markazlashgan rombik (fcc) panjara ko'rinishiga ega. Tadqiqot ishining ikkinchi ob'ekti  $C_{60}$  fulleren molekulasini tashkil etuvchi uglerod atomlarining koordinatalari Nanotube Modeller [28] kompyuter dasturi yaratildi. Olingan har ikkala ob'ekt ham JMOL [29] kompyuter dasturi orqali vizualizatsiya qilingan holda, ularga xos xarakteristik parametrlar adabiyotlarda berilgan qiymatlari bilan solishtirildi. Olingan natijalarga taglik o'lchamlarining ta'siri yuqorida aytib o'tilgan alyuminiy monokristall tagligidan o'chamlari bilan farq qiluvchi bir nechta tagliklar bilan olingan natijalar bilan o'zaro solishtirish orqali uning mavjud emasligiga amin bo'lindi.  $C_{60}$  fulleren molekulasining Al(001) sirtida adsorbsiyasi 0K temperaturada o'rganildi. Ushbu temperaturani NVT ansambliida barqaror ushlab turish uchun Noze-Guver termostatidan [30] foydalanildi. Simulatsiya jarayonida ilgari tanilgan harakat effektlarini hisobga olmaslik maqsadida, qaralayotgan tizim massa markazi qo'zg'almas qilib tanlandi.



1- rasm. a) alyuminiy taglik; b) fulleren  $C_{60}$  molekulasini.

1- rasmda yuqorida aytib o'tilgan alyuminiy monokristall tagligi va uning (001) sirtida adsorbsiyasi kuzatilgan fulleren  $C_{60}$  molekulasini tasvirlangan. Alyuminiy monokristali hech qanday defektlarga ega emas, shuningdek, uning sirtlari kuzatilishi mumkin bo'lgan rekonstruksiyalardan xoli qilib tanlangan. Demak, alyuminiy taglikni ideal monokristall deb hisoblash mumkin.

#### Adsorbsiya energiyasini hisoblash.

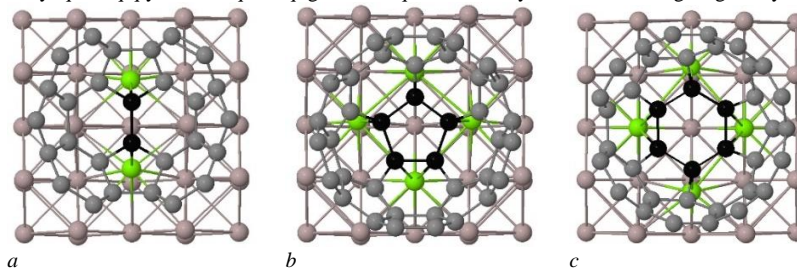
Fulleren  $C_{60}$  molekulasining alyuminiy Al(001) sirtida adsorbsiya energiyasi adsorbsiyaga doir nazariy tadqiqot ishlarida juda ko'p foydalaniladigan ananaviy usulda [31,32] aniqlandi, ya'ni alyuminiy taglik va fulleren molekulasini yakka holatida va muvozanatli holatida atomlarining to'liq potentsial energiyalari yig'indisi bilan  $C_{60}$  fulleren molekulasini taglikka adsorbsiyalangan holatidagi butun sistema atomlarining potentsial energiyasi o'rtasidagi farqni hisoblash orqali aniqlandi. Uning matematik ifodasini quyidagicha:

$$E_{\text{ads}} = E_{\text{tag/mol}} - (E_{\text{tag}} + E_{\text{mol}}).$$

Bunda  $E_{\text{ads}}$  – adsorbsiya energiyasi,  $E_{\text{tag}}$  va  $E_{\text{mol}}$  mos ravishda taglik va fulleren molekulasining yakka holatlaridagi ularga tegishli atomlarning o'zaro ta'sir potentsial energiyalari,  $E_{\text{tag/mol}}$  – molekula taglik sirtida adsorbsiyalangan holatidagi tizim atomlarining to'liq potentsial energiyasi. Ushbu qiymatlar tadqiqot metodologiyasida nazarda tutilgan shartlar va atomlararo potentsialdan foydalangan holda 0K temperaturada energiyani minimizatsiya usuli asoslanib, LAMMPS dasturida aniqlandi.

**Natijalar tavsifi va tahlili.** Tadqiqot davomida fulleren  $C_{60}$  molekulasining alyuminiy Al(001) sirtida uch xil adsorbsiyalanish konfiguratsiyalari simulyatsiya qilindi va har bir konfiguratsiya uchun adsorbsiya energiyasi bilan ushbu jarayonda yuzaga keluvchi Al-C bog'lar uzunligi va soni aniqlandi.  $C_{60}$  fulleren molekulasini alyuminiy taglik sirtida C-C bog'lanishli ko'priklar yordamida ikkilik Al-C bog'lanishli, pentagon va geksagon konturlari yordamida mos ravishda beshlik va oltilik Al-C bog'lanishli konfiguratsiyalar bilan mos ravishda -1.445 eV, -3.101 eV va 2.19 eV energiyalar bilan adsorbsiyalandi. Al-C bog'larning o'rtacha uzunligi ko'priklar (C-C), pentagon va geksagon konfiguratsiyalarida mos ravishda 2.51 Å, 2.46 Å va 2.42 Å qiymatlarga teng bo'ldi.

Ma'lumki, fulleren molekulasidagi C-C bog'lar ikki xil tabiatli: 1.38 Å uzunlikdagi C=C ikkilik bog'lar va 1.45 Å uzunlikdagi C-C birlik bog'lar. Ushbu bog'larning bir-biridan asosiy farqi C-C bog'lanishda ishtirok etuvchi etuvchi valent elektronlar sonida, C=C bog'ida ikkita kovalent bog', C-C bog'ida esa yagona kovalent bog'lanish mavjud va shuningdek, pentagon konturidagi barcha atomlar C=C bog'lanishga ega. Shu sababli, fulleren molekulasining alyuminiy taglik sirtida pentagonli konfiguratsiya bilan adsorbsiyalanish energiyasi qolgan konfiguratsiyalarga nisbatan yuqoriroq qiymatlarni qabul qilgan va barqaror adsorbsiyalanish holatini egallagan deyish mumkin.



2- rasm. Fulleren  $C_{20}$  molekulasining 3 xil konfiguratsiya bilan alyuminiy taglik sirtida adsorbsiyalanishi tasvirlangan.

2- rasmda fulleren molekulasining yuqorida nazarda tutilgani singari C-C, pentagon va geksagon konfiguratsiyalar bilan Al(001) sirtida adsorbsiyasining tasvirlari berilgan bo'lib, qora rangdagi uglerod atomlari och yashil rangdagi alyuminiy atomlari bilan Al-C bog'lanishlar hosil qilgan. Taglik bilan bog'lanishda ishtirok etmagan fulleren molekulasidagi uglerod atomlari kulrang bo'yoqlarda tasvirlangan.

**Xulosa.** Olingan natijalarni adabiyotlardan olingan natijalar bilan birgalikda tahlil qilish natijasida quyidagicha xulosalar qilindi: barcha konfiguratsiyalarda kuzatilgan adsorbsiyalar kimyoviy adsorbsiyadan iborat; pentagon konfiguratsiya bilan kuzatiluvchi adsorbsiya energiya qiymatining yuqoriligiga ko'ra, eng barqaror adsorbsiyalanish konfiguratsiyasi hisoblanadi; barcha konfiguratsiyalarda kovalent bog'lanishlar mavjud, ammo pentagon konfiguratsiyada barcha bog'lar kovalent bog'lardan iborat.

#### ADABIYOTLAR

1. Chawla, K.K. *Composite Materials: Science and Engineering*, 3rd ed.; Springer Science + Business Media: New York, NY, USA, 2013; p. 542. ISBN 978-0-387-74364-6.
2. Kumar, V.M.; Venkatesha, C.V. Effect of ceramic reinforcement on mechanical properties of aluminum matrix composites produced by stir casting process. *Mater. Today Proc.* 2018, 5, 2466–2471. [CrossRef]
3. Kablov, E.N. Innovative developments of FSUE "VIAM" of the State Research Center of the Russian Federation on the implementation of "Strategic directions for the development of materials and technologies of their processing for the period up to 2030. *Aviat. Mater. Technol.* 2015, 34, 3–33.
4. Yufeng, W.; Gap-Yong, K.; Alan, M.R. Mechanical alloying of carbon nanotube and Al6061 powder for metal matrix composites. *Mater. Sci. Eng. A* 2012, 532, 558–566.5. Bakshi, S.R.; Lahiri, D.; Argaval, A. Carbon nanotube reinforced metal matrix composites-a review. *Int.Mater. Rev.* 2013, 55,41–64. [CrossRef]
5. Matthews, F.L.; Rawlings, R.D. *Composite Materials: Engineering and Science*; CRS Press: Boca Raton, FL, USA, 1999; ISBN 0-8493-0621-3.
6. Bayda, S.; Adeel, M.; Tuccinardi, T.; Cordani, M.; Rizzolio, F. The History of Nanoscience and Nanotechnology: From Chemical–Physical Applications to Nanomedicine. *Molecules* 2020, 25, 112. [CrossRef]
7. Rogov, V.A. *Technology of structural materials. Nanotechnologies*, 2nd ed.; Urait: Moscow, Russia, 2022; p.190.
8. Chang, L.; Zhang, Z.; Ye, L.; Friedrich, K. Tribological properties of high temperature resistant polymer composites with fine particles. *Tribol. Int.* 2007, 40, 1170–1178. [CrossRef]
9. Liao, X.Z.; Serquis, A.; Jia, Q.; Peterson, D.; Zhu, Y.; Xu, H. Effect of catalyst composition on carbon nanotube growth. *Appl. Phys.Lett.* 2003, 82, 2694–2696. [CrossRef]
10. Gleiter, H. Nanostructured materials. Basic Concepts and Microstructure. *Acta Mater.* 2000, 48, 1–29. [CrossRef]
11. Suzzdalev, I.P. *Nanotechnology: Physico-Chemistry of Nanoclusters, Nanostructures and Nanomaterials*; ComKniga: Moscow, Russia, 2006; p. 592
12. R. Fasel, P. Aebi, R. G. Agostino et al, *Phys. Rev. Lett.* 76, 4733 (1996).
13. A. V. Hamza, J. Dykes, W. D. Mosley et al, *Surface Sci.* 318, 368 (1994).
14. M. Stengel, A. De Vita, and A. Baldereschi, *Phys. Rev. Lett.* 91, 166101 (2003).
15. Elena G. Zemtsova, Andrey Yu. Arbenin, Yuri V. Sidorov, Nikita F. Morozov, Petr M. Korusenko, Boris N. Semenov and Vladimir M. Smirnov "The Use of Carbon-Containing Compounds to Prepare Functional and Structural Composite Materials": A Review V.V. Reshetniak and O.B. Reshetniak "Interatomic interaction at the aluminum- fullerene C<sub>60</sub> interface ". Lev R. Sizov, Daria V. Revina, Alexander Yu. Rybkin, Alexei V. Kozlov, Anatoliy P. Sadkov, and Nikolay S. Goryacheva "Aluminum Phthalocyanine – Fullerene Supramolecular Dyads: Synthesis, Photophysical Properties and ROS Photogeneration". H. G. P. Kumar and M. A. Xavier, Graphene reinforced metal matrix composite (gmmc): A review, *Procedia Engineering* 97, 1033 (2014).
16. F. A. Khalid, O. Beffort, U. E. Klotz, B. A. Keller, P. Gasser, and S. Vaucher, Study of microstructure and interfaces in an aluminium-C<sub>60</sub> composite material, *Acta Materialia* 51, 4575 (2003).
17. I. Korobov, A. I. Kokshaiskiy, V. M. Prokhorov, I. A. Evdokimov, S. A. Perfilov, and A. D. Volkov, Mechanical and nonlinear elastic characteristics of polycrystalline AlMg6 aluminum alloy and n-AMg6/C<sub>60</sub> nanocomposite, *Physics of the Solid State* 58, 2472 (2016).
18. J. Shin, K. Choi, S. Shiko, H. Choi, and D. Bae, Mechanical damping behavior of Al/C<sub>60</sub> fullerene composites with supersaturated Al-C phases, *Composites Part B: Engineering* (77), 194 (2015).
19. M. K.-J. Johansson, A. J. Maxwell, S. M. Gray et al., *Phys. Rev. B* 54, 13472 (1996).
20. M. K.-J. Johansson, A. J. Maxwell, S. M. Gray et al., *Surface Sci.* 397, 314 (1998)
21. A. J. Maxwell, P. A. Brühwiler, S. Andersson et al., *Phys. Rev. B* 52, R5546 (1995).
22. Sandia National Laboratories, Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS), 2023, <https://www.lammps.org/>
23. G. Plummer and G.J. Tucker, Bond-order potentials for the Ti<sub>3</sub>AlC<sub>2</sub> and Ti<sub>3</sub>SiC<sub>2</sub> MAX phases, *Physical review B*, Vol. 100, pp. 214114, 2019.
24. M. Yoshida, Nanotube Modeler (Nanocoones, Bucky-Ball, Fullerenes, Simulation Software) ([www.jcrystal.com](http://www.jcrystal.com))
25. Java, Jmol, 2023, <http://www.jmol.org/>
26. Hoover, W.G., "Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions", *Physical Review A*, Vol. 31, 1695, 1985, <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.31.1695>
27. Y. S. Al-Hamdani et al, Properties of the water to boron nitride interaction: From zero to two dimensions with benchmark accuracy, *Journal of Chemical Physics*, Vol. 144, 154706, 2016, <https://doi.org/10.1063/1.4985878>
28. Dan C. Sorescu et al, First-principles calculations of the adsorption, diffusion, and dissociation of a CO molecule on the Fe (100) surface, *Physical Review B*, Vol. 66, pp. 035416, 2002, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.035416>