



UDK: 539.6 544.188 004.942

*Shodibek AMINOV,*  
*O'qituvchi, Termiz davlat universiteti*  
*E-mail:shodibek022578@gmail.com*  
*Ishmumin YADGAROV,*  
*Professor, DSc, Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti*  
*Ganiboy RAXMANOV,*  
*F.-m.f.d., professor, O'zbekiston Milliy universiteti*  
*Ikrom UROLOV,*  
*PhD, Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti*

*O'zbekiston Milliy universiteti taqrizi asosida*

### MONO QATLADAGI GRAFEN SIRTIGA TURLI SHAKLDAGI $C_{20}+C_n$ ( $n=1-5$ ) UGLEROD KLASTERLARINING ADSORBSIYASI

Аннотация

Mazkur maqolada molekulyar dinamika usullari yordamida fullerene  $C_{20}$  molekulasining  $C_n$  ( $n=1-5$ ) uglerod klasterlari orqali monoqatlamdagi grafen sirtiga turli konfiguratsiyalarda adsorbsiyasi jarayonlari ko'rib chiqiladi. Adsorbsiyasi jarayonlarini tahlil etish natijasida fullerene  $C_{20}$  ning  $C_{11}$ ,  $C_{44}$  konfiguratsiyalarda eng yuqori boglanish energiyalari aniqlandi.

**Kalit so'zlar:** Uglerod, grafen, bog'lanish, nanoo'lcham, barqarorligi, nuqsonsiz, molekulyar dinamika, adsorbsiya, sirt, modellashtirish.

### АДСОРБЦИЯ УГЛЕРОДНЫХ КЛАСТЕРОВ РАЗЛИЧНОЙ ФОРМЫ $C_{20}+C_n$ ( $n=1-5$ ) НА ПОВЕРХНОСТИ МОНО СЛОЙНОГО ГРАФЕНА

Аннотация

В данной статье с помощью методов молекулярной динамики рассмотрены процессы адсорбции молекулы фуллерена  $C_{20}$  на поверхности монослойного графена в различных конфигурациях через кластеры углерода  $C_n$  ( $n=1-5$ ). В результате анализа процессов адсорбции были определены самые высокие энергии связывания фуллерена  $C_{20}$  в конфигурациях  $C_{11}$  и  $C_{44}$ .

**Ключевые слова:** Углерод, графен, связь, наноразмер, стабильность, бездефектность, молекулярная динамика, адсорбция, поверхность, моделирование.

### ADSORPTION OF VARIOUSLY SHAPED $C_{20}+C_n$ ( $n=1-5$ ) CARBON CLUSTERS ON MONOLAYER GRAPHENE SURFACE

Annotation

In this article, the adsorption processes of the fullerene  $C_{20}$  molecule on the surface of monolayer graphene in various configurations through  $C_n$  ( $n=1-5$ ) carbon clusters are considered using molecular dynamics methods. As a result of the analysis of the adsorption processes, the highest binding energies of fullerene  $C_{20}$  were determined in the  $C_{11}$ ,  $C_{44}$  configurations.

**Key words:** Carbon, graphene, bonding, nanoscale, stability, defect-free, molecular dynamics, adsorption, surface, modeling

**Kirish.** Ko'ndalang kesimi keng o'lchamlarga va juda yupqa qalinlikka ega nanomateriallar (ya'ni, grafen) o'zining noyob fizik-kimyoviy xususiyatlari va elektronika, optoelektronika, energetika va katalizda, qo'llanilishi tufayli muhim ahamiyatga ega [1-4]. Kovalent bog'langan (tekislikda) panjaraga ega nanovaraqlarni (nanolistlar) grafit va grafendan qatlamlarga ajratish orqali olinish mumkin [2]. Bundan tashqari, o'ziga xos elektron, optik va optoelektronik xususiyatlari, ajoyib mexanik mustahkamligi va moslashuvchanligi tufayli grafen nanovaraqlari yaxshilangan xususiyatlar va funktsionallikka ega turli xil nanoqurilmalarni ishlab chiqish uchun katta ahamiyat kasb etadi.

Grafen, juda yuqori elastiklik moduli, cho'zilish kuchi va juda katta o'ziga xos sirt maydoniga (Uglerodli nanotrubkalardan taxminan 3 baravar yoki undan ham kattaroq) ega bo'lgan  $sp^2$  gibridlangan uglerod atomlarining bitta atom qalinlikdagi varag'i bo'lgan grafen, Novoselov va boshqalar tomonidan kashf etilganidan beri tadqiqotchilar va sanoatda katta qiziqish uyg'otmoqda [5]. Ko'pgina eksperimental tadqiqotlarda grafen bilan mustahkamlangan nanokompozitlarning uglerod nanotubali kompozitlarga nisbatan mexanik xususiyatlarida sezilarli yaxshilanishlar kuzatilgani haqida ma'lumotlar keltirilgan [6].

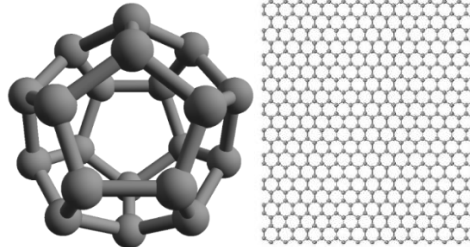
Fullerenlar nanoo'lchamli tizimlarda asosiy elementlarning roli uchun istiqbolli nomzod hisoblanadi. Faqat 12 ta beshburchakdan iborat  $C_{20}$  molekulasini fullerener oilasining eng kichik vakili hisoblanadi [7].  $C_{20}$  turli fazalarda kashf etilgandan so'ng [7-9], bu eng kichik uglerod klasteri bo'yicha ko'plab nazariy va eksperimental tadqiqotlar o'tkazildi [10-11]. Turli simmetriyalarga ega  $C_{20}$  fullerenerlar juda yaqin energiyalarga va o'xshash xususiyatlarga ega [12]. Bundan tashqari,  $C_{20}$  ning termal barqarorligi va yuqori reaktivligi tasdiqlangan [13, 14].

Fulleren molekularining grafen bilan o'zaro ta'siri katta qiziqish uyg'otadi va ko'plab ilmiy ishlar bu ta'sirlashuvlarga bag'ishlangan. Shuni ta'kidlash kerakki, fullerenerlar va grafen o'rtasida faqat kovalent bo'lmagan o'zaro ta'sirning mavjudligi fullerenerning grafen yuzasi bo'ylab harakatlanish qobiliyatiga ega ekanligiga olib keladi [15]. Fullenerlarning grafen sirtida

mustahkam bog'lanishlarini olish uchun  $C_n$  uglerod klasterlari orqali "fulleren +  $C_n$  + grafen" barqaror tuzilishini yaratishi mumkin. Ushbu ishda "fulleren  $C_{20} + C_n$  + grafen ( $1 < n \leq 5$ )" tuzilmalarini modellashtirish uchun atomlar soni 5 gacha bo'lgan turli shakldagi uglerod klasterlarini tanlangan.

Tadqiqotda LAMMPS dasturiy ta'minot paketidan foydalanilgan holda tizimni tashkil qiluvchi atomlar orasidagi o'zaro ta'sirlar Tersoff-Erhard-Albe potentsiali yordamida ifodalangan [16].

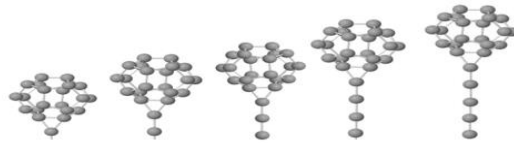
Tadqiqotda  $C_{20}$  fulleren va grafen tuzilmalarini kompyuterda modellashtirishda asosan energiyani minimallashtirish usuli [17] yordamida amalga oshirildi. Modellashtirish jarayonida daslab o'zaro ta'sir qilmaydigan  $C_{20}$  fulleren va 600 atomdan iborat monoqatlamli grafen tuzilmalarining kompyuter modellari qurildi 1-rasmda ko'rsatilgan. Nuqsonsiz  $C_{20}$  fulleren modelida barcha atomlar fulleren markazidan  $R = 1,9 \text{ \AA}$  masofada joylashgan bo'lib, bu nuqsonsiz o'zaro ta'sir qilmaydigan fullerenning radiusi hisoblanadi. Ideal grafenning kompyuter modeli chegara atomlariga davriy shartlar qo'yilgan to'rtburchakdagi 600 atomli monoqatlamdir.



### 1-rasm. Nuqsonsiz $C_{20}$ fulleren modeli va 600 atomdan iborat to'rtburchakli monoqatlamdagi grafen tuzilmasi

Uglerod klasteri atomlarining daslabki joylashuvi quyidagicha ko'rsatildi, barcha klaster atomlari ikkita fulleren atomini va fulleren markazini bog'laydigan o'rta chiziqdan o'tuvchi to'g'ri chiziqda yoki fulleren atomi va grafendagi ikki qo'shni atom urtasidan o'tuvchi to'g'ri chiziqda joylashgan buladi. Bu biz " $C_{20} > C_n$ " deb belgilaydigan strukturaga olib keladi, bu yerda ">" belgisi klasterning eng tashqi atomlaridan biri ikkita fulleren atomiga bitta kovalent bog'lanish orqali bog'langanligini anglatadi. Yagona uglerod atomlari ham yuqorida tavsiflangan tarzda fullereniga birlashtirilgan; natijada hosil bo'lgan tuzilmalar an'anaviy ravishda " $C_{20} > C_1$ " deb belgilanadi. " $C_{20} > C_n$ " ( $1 \leq n \leq 5$ ) tuzilmalarining vizual tasvirlari 2-rasmda ko'rsatilgan.

$C_{20}$  fulleren molekulasini  $C_n$  uglerod klasterlarining turli shakllari bilan grafen sirtidagi (bridge) ga ya'ni grafendagi ikki qo'shni atomlar urtasiga va (hex) ga ya'ni grafendagi olti burchakli geksagonga hamda (peak) ga grafen atomlari tepasiga adsorbsiyalanadi.



### 2-rasm. " $C_{20} > C_n$ " tuzilmalarining vizual tasvirlari ( $1 \leq n \leq 5$ )

1-jadvalda  $C_{20}$  fulleren molekulasining  $C_1, C_2, C_3$  konfiguratsiyalarda grafen sirtiga adsorbsiyasi qarab chiqilgan va  $C_2$  va  $C_3$  konfiguratsiyalarda bog'lanish energiyalari yuqori ekanligi aniqlangan. Shuningdek 2- jadvalda berilgan natijalardan ko'rinadiki,  $C_{20}$  fulleren molekulasining  $C_3(1), C_3(1+2), C_3(2), C(2+1)$  konfiguratsiyalarida  $C_3$  (1) konfiguratsiyali adsorbsiyalarda bog'lanish energiyalari yuqori ekanligi kuzatilgan. Ushbu ishda barcha konfiguratsiyalarda asosan fullerenlar grafen strukturasiidagi (bridge) qushni atomlari urtasi ga va olti burchakli geksagon (hex) ustiga hamda (peak) grafendagi atom ustiga adsorbsiyalanishlar tahlil etilgan. Bog'lanish energiyalari yuqori ekanligi bog'lanishlarda grafen va uglerodli klasteri tizimiga  $C_{20}$  fulleren atomlarining faqat bitta atomi orqali bog'lanishlari holatlarida sodir bo'lmoqda. Shuningdek  $C_3(1+2)$  konfiguratsiyalarida ham bog'lanish energiyalari yuqoriligicha qolmoqda. kursatilgan.  $C_3(2+1)$  konfiguratsiyali bog'lanishlarda esa kuchsiz boglanishlarni kuzatish mumkin bunday boglanishlar ayniqsa bu konfiguratsiyadagi hex1, hex 3, hex 7 holatlarida kurishimiz mumkin

3- jadvalda  $C_{20}$  fulleren molekulasining  $C_4(1+1+2), C_4(1+2+1), C_4(1+3), C_4(2+2)$  konfiguratsiyalarida adsorbsiya jarayonlari keltirilgan. Bu erda  $C_4$  (bridge),  $C_4$  (hex),  $C_4(1+1+2)$  (hex), (hex 1), (hex 3),  $C_4(1+3)$  (bridge), (hex), (hex1),  $C_4(2+2)$  (bridge), (hex 2) holatlarda bog'lanish energiyalari yuqori ekanligi kuzatilgan. Ushbu konfiguratsiyalardagi adsorbsiyalanish kursatilgan.

4- jadvalda  $C_{20}$  fulleren molekulasining  $C_5(1), C_5(2)$  konfiguratsiyalarida adsorbsiya jarayonlari keltirilgan. Bu erda  $C_5$  (bridge),  $C_5(1)$  (bridge),  $C_5(4)$  (hex), (hex 1), holatlarda bog'lanish energiyalari yuqori ekanligi kuzatilgan. Ushbu konfiguratsiyalardagi adsorbsiyalanish kursatilgan.

5- jadvalda  $C_{20}$  fulleren molekulasining  $C_{11}, C_{22}, C_{44}$  konfiguratsiyalarida adsorbsiya energiyalari va bog' uzunliklari keltirilgan. Bu erda  $C_{11}$  (bridge, hex, peak),  $C_{44}$  (bridge, hex, peak) holatlarida adsorbsiya energiyalari yuqori ekanligi kuzatilgan.

1-jadval.  $C_{20}$  fulleren molekulasining  $C_1, C_2, C_3$  konfiguratsiyalarda grafen sirtiga adsorbsiyasi

1	$C_1$	bridge	hex	peak
		-2.272	-1.394	-1.319
		1.66, 1.66	1.67, 1.71, 1.71	1.55
2	$C_2$	bridge	heck	pick
		-3.765	-2.948	-2.947
		1.67, 1.67	1.56	1.55
3	$C_3$	bridge	heck	pick
		-3.155	-1.202	-2.402
		1.66, 1.66	1.70, 1.70	1.55

2-jadval.  $C_{20}$  fulleren molekulasining  $C_3(1), C_3(1+2), C_3(2), C_3(2+1)$  konfiguratsiyalarda grafen sirtiga adsorbsiyasi

4	C3(1)	bridge	hex	hex 1
		-4.442	-4.228	-4.799
		1.61, 1.61	1.56, 1.56	1.54, 1.54
5	C3(1+2)	bridge	hex	hex1
		-3.360	-3.268	-3.619
		1.61, 1.61	1.67, 1.67, 1.69, 1.69	1.58, 1.67, 1.67
6	C3(2)	bridge	bridge1	hex
		-0.443	-3.366	-2.698
		1.67, 1.68, 1.68, 1.71, 1.71	1.57, 1.66	1.66, 1.66, 1.66, 1.66
7	C3(2+1)	bridge	hex	hex1
		-2.624	-1.311	-0.567
		1.57, 1.66	1.60, 1.66, 1.67	1.57, 1.57

3-jadval. C<sub>20</sub> fulleren molekulasining C4, C4(1+1+2), C4(1+2+1), C4(1+3), C4(2+2) konfiguratsiyalarda grafen sirtiga adsorbsiyasi

8	C4	bridge	hex	peak
		-3.195	-3.193	-2.442
		1.66, 1.66	1.66, 1.66	1.55
9	C4(1+1+2)	bridge	bridge1	heck
		-1.393	-3.774	-4.059
		1.68, 1.68, 1.68,	1.61, 1.67, 1.68	1.58, 1.67, 1.67
10	C4(1+2+1)	bridge	hex	peck
		-0.879	-2.658	-2.637
			1.51	1.51
11	C4(1+3)	bridge	heck	heck1
		-3.813	-3.386	-3.018
		1.56, 1.56, 1.56	1.53, 1.53	1.63, 1.65, 1.66, 1.68, 1.70
12	C4(2+2)	bridge	hex	hex1
		-3.143	-2.657	-1.079
		1.58, 1.65	1.52	1.66, 1.68, 1.69, 1.70

4-jadval. C<sub>20</sub> fulleren molekulasining C5, C5(1), C5(2), C5(4) konfiguratsiyalarda grafen sirtiga adsorbsiyasi

13	C5	bridge	hex	hex1
		-3.375	-1.984	-3.376
		1.66, 1.66	1.67, 1.71, 1.71	1.66, 1.66
14	C5(1)	bridge	bridge1	hex
		-4.191	-0.619	0.559
		1.58, 1.58	1.65, 1.65	1.70, 1.70, 1.71, 1.71, 1.71, 1.71
15	C5(2)	bridge	hex	hex1
		-0.574	-1.408	-2.265
		1.59, 1.59	1.57, 1.57	1.67, 1.67, 1.68, 1.68
16	C5(4)	bridge	hex	hex1
		-3.201	-4.388	-3.731
		1.46, 1.46	1.49, 1.65, 1.65	1.46

5-jadval. C<sub>20</sub> fulleren molekulasining C11, C22, C44 konfiguratsiyalarda grafen sirtiga adsorbsiyasi

17	C11	bridge	hex	peak
		-5.652	-4.335	-5.921
		1.65, 1.65	1.63, 1.64	1.52
18	C22	bridge	hex	hex1
		-2.885	-4.009	-3.455
		1.57, 1.66	1.57, 1.58	1.56, 1.57
19	C44	bridge	hex	hex1
		-3.807	-4.800	-4.271
		1.58, 1.65	1.57, 1.58	1.57, 1.56

**Xulosa.** C<sub>20</sub> + C<sub>n</sub> (n=1-5) turli shakllardagi uglerod klasterlarining mono qatlamdagi grafen sirtiga adsorbsiyalanishini o'rganish uchun model tajribalari o'tkazildi. Grafen sirtiga uglerod klasterlarining adsorbsiyasi jarayonida 600 atomdan tashkil topgan tug'ri burchakli grafen strukturasi bridge, hex, peak markazlari tanlab olingan. Adsorbsiyalangan fulleren molekullari uchun bog'lanish energiyalari va adsorbsiya masofalari turli konfiguratsiyalarda hisoblab chiqilgan. Adsorbsiyalanishlarni tahlil

qilish natijalariga kura bog'lanish energiyalari C11 va C44 konfiguratsiyalarda yuqori ekanligi hamda C5(2) konfiguratsiyalarda kuchsiz bog'lanishlar aniqlangan.

#### ADABIYOTLAR

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, Electric field effect in atomically thin carbon films *Science* 2004, Vol. 306, pp. 666-369.
2. K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, A. K. Geim, Two-dimensional atomic crystals *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2005, Vol. 102(30), pp. 10451-3
3. V. Nicolosi, M. Chhowalla, M. G. Kanatzidis, M. S. Strano, J. N. Coleman, *Science* 2013, 340, 1226419.
4. A. K. Geim, K. S. Novoselov, *Nat. Mater.* 2007, 6, 183.
5. Novoselov KS, Geim AK, Morozov SV, Jiang D, Zhang Y, Dubonos SV, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science* 2004;306:666-9.
6. Stankovich S, Dikin DA, Dommett GH, Kohlhaas KM, Zimney EJ, Stach EA, et al. Graphene-based composite materials. *Nature* 2006;442:282-6.
7. H. Prinzbach, A. Weiler, P. Landenberger, F. Wahl, J. Wörth, L. T. Scott, M. Gelmont, D. Olevano, B. V. Issendorff, *Nature*, 407, 60-63 (2000).
8. Z. Wang, X. Ke, Z. Zhu, F. Zhu, M. Ruan, H. Chen, R. Huang, and L. Zheng, *Phys. Lett. A*, 280, 351-356 (2001).
9. Z. Iqbal, Y. Zhang, H. Grebel, S. Vijayalakshmi, A. Lahamer, G. Benedek, M. Bernasconi, J. Cariboni, I. Spagnolatti, and R. Sharma, *Eur. Phys. J. B*, 31, 509-515 (2003).
10. M. Sawtarie, M. Menon, and K. Subbaswamy, *Phys. Rev. B*, 49, 7739 (1994).
11. Y.-P. An, C.-L. Yang, M.-S. Wang, X.-G. Ma, and D.-H. Wang, *J. Cluster Sci.*, 22, 31-39 (2011).
12. M. Saito and Y. Miyamoto, *Phys. Rev. B*, 65, 165434 (2002).
13. M. T. Baei, *Heteroat. Chem.*, 24, 516-523 (2013).
14. R. Ghiasi, M. Z. Fashami, and A. H. Hakimioun, *Theor. Comput. Chem.*, 13, 1450023 (2014).
15. M. Neek-Amal, N. Abedpour, S. N. Rasuli, A. Naji, M. R. Ejtehadi. *Phys. Rev. E*, 82, 051605 (2010). Crossref
16. J. Tersoff, New empirical approach for the structure and energy of covalent systems, *Phys. Rev. B* 37, 6991 (1988).
17. Java, Jmol, 2023, (<http://www.jmol.org> ).