



UDK: 530.12:531.51

Gulniso ABDUQAYUMOVA,
Undergraduate Student at National University of Uzbekistan
E-mail: gulnisaabdukayumova@gmail.com
Husanboy HOSHIMOV,
Fergana State University
Vokhid KHAMIDOV,
Tashkent University of Information Technologies named after Muhammad al Khwarizmi

Based on the review of professor A.Abdujabbarov, Ulugh Beg Astronomical Institute

QUASI-PERIODIC OSCILLATIONS IN SCHWARZSCHILD-LIKE SPACETIME

Annotation

In this work, we have investigated the dynamical aspects of particles moving in the vicinity of GUP-structured Schw. massive astronomical compact object. We have analyzed the ISCO in the vicinity of massive astronomical compact object; explored its implications for different microquasars. Additionally, we have shown that the Kerr black hole mimics the S-GUP black hole after some tuning of parameters. Finally, considering the S-GUP black hole as a microquasar source, we have studied quasi-periodic oscillations (QPOs). Further, utilizing the available observational data of a few microquasars, we have obtained constraints on the GUP parameter ϵ as well.

Key words: Generalized Uncertainty Principle (GUP), Schwarzschild black hole, S-GUP metric, ISCO, quasi-periodic oscillations (QPO), microquasars, Kerr black hole, observational constraints.

КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ В ПРОСТРАНСТВЕ-ВРЕМЕНИ, ПОДОБНОМ ШВАРЦШИЛЬДУ

Аннотация

В данной работе исследованы динамические аспекты движения частиц вокруг черной дыры Шварцшильда с поправками обобщенного принципа неопределенности (S-GUP). Рассчитана внутренняя граница устойчивой круговой орбиты (ISCO) вокруг черной дыры и изучены ее последствия для различных микроквазаров. Кроме того, показано, что черная дыра Керра имитирует черную дыру S-GUP после соответствующей настройки параметров. Наконец, рассматривая черную дыру S-GUP в качестве источника микроквазара, изучены квазипериодические осцилляции (QPO). Также, используя доступные наблюдательные данные некоторых микроквазаров, получены ограничения на параметр GUP ϵ .

Ключевые слова: Обобщенный принцип неопределенности (GUP), черная дыра Шварцшильда, метрика S-GUP, ISCO, квазипериодические колебания (QPO), микроквазары, черная дыра Керра, наблюдательные ограничения.

SCHWARZSCHILD-GA O'XSHASH FAZOVIY-VAQT DAVOMIDA KVAZIPERIODIK TEBRANISHLAR

Annotatsiya

Ushbu ishda GUP bilan tuzatilgan Shvartsild (S-GUP) qora tuynugi atrofiga harakatlanayotgan zarralarning dinamik jihatlarini o'rganildi. Qora tuynuk atrofidagi eng ichki barqaror aylana orbita (ISCO) hisoblanib, uning turli mikrokvazarlar uchun natijalari tahlil qilindi. Bundan tashqari, Kerra qora tuynug'i ba'zi parametrlarning sozlanishidan so'ng S-GUP qora tuynug'ini taqlid qilishi ko'rsatildi. Nihoyat, S-GUP qora tuynug'ini mikrokvazar manbai sifatida ko'rib chiqib, kvaziperiodik tebranishlar (QPO) tadqiq etildi. Shuningdek, ayrim mikrokvazarlarning mavjud kuzatuv ma'lumotlaridan foydalanib, GUP parametri ϵ uchun cheklovlar aniqlandi.

Kalit so'zlar: Umumlashtirilgan noaniqlik prinsipi (GUP), Shvartsild qora tuynugi, S-GUP metrikasi, ISCO, kvaziperiodik tebranishlar (QPO), mikrokvazarlar, Kerra qora tuynugi, kuzatuv cheklovlari.

Introduction. In theoretical physics, unifying quantum mechanics and gravity remains a major challenge. One approach involves black hole (BH) thermodynamics, as BHs have both gravitational and quantum properties. This makes them useful for testing quantum gravity theories.

The Generalized Uncertainty Principle (GUP) helps address the limits of general relativity (GR). It modifies the position-momentum uncertainty relation with nonlinear terms inspired by string theory and loop quantum gravity. GUP suggests a minimum length scale at the Planck level, which removes singularities predicted by GR. Researchers have explored its implications, including its effects on black holes, accretion disks, and exotic objects like wormholes.

We have studied quasi-periodic oscillations (QPOs) around such BHs. Using observational data from quasars, we placed constraints on a free parameter in the S-GUP spacetime.

Particle behavior in Schwarzschild spacetime modified by generalized uncertainty principle (GUP). In this section, we analyze the behavior of test particles near a massive compact astronomical object with GUP structure. In simplified coordinates, the S-GUP metric is expressed as [8]:

$$ds^2 = -f(r)dt^2 + f(r)^{-1}dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2) \quad (1)$$

where

$$f(r) = 1 - \frac{2M}{r} + \epsilon \frac{M^2}{r^2} \quad (2)$$

where ϵ is characteristic parameter of GUP correction. Rather, it is proposed by previous authors to lowest order in ϵ as a test metric to understand the GUP effects in Schwarzschild spacetime. The behavior of these test particles is described by the following Lagrangian:

$$L_p = \frac{1}{2} m g_{\mu\nu} \dot{x}^\mu \dot{x}^\nu \quad (3)$$

where m represents the particle's mass, and dot denotes differentiation with respect to proper time τ . The path of a particle in spacetime is parameterized by its proper time τ , with the four-velocity defined as $u^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau}$. The relation between total energy E and angular momentum L can be expressed as:

$$\mathcal{E} = u_\mu \xi^\mu = -f(r)\dot{t}$$

And now for particle with significant mass:

$$\dot{r}^2 = \mathcal{E} - f(r) \left(1 + \frac{L^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right) \quad (6)$$

For a stationary and spherically symmetric spacetime, the particle begins its movement in the equatorial plane, it will remain confined to that plane throughout its trajectory. By limiting the motion to the plane where $\theta = \pi/2$ and $\dot{\theta} = 0$, the equation of the radial motion can be expressed in the form:

$$\dot{r}^2 = \mathcal{E}^2 - V_{\text{eff}}, \quad (7)$$

Where the effective potential is:

$$V_{\text{eff}} = f(r) \left(1 + \frac{L^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right). \quad (8)$$

A. Innermost stable circular orbits. As stated in the previous paragraphs, the ISCO is the foundation at the point where the specific energy of the angular momentum reaches a minimum. This condition can be expressed as $\mathcal{E}_{,r} = 0$ or $\mathcal{L}_{,r} = 0$ or in the explicit form as:

$$r_{\text{ISCO}} = 2M + \frac{M^2(3\epsilon - 4)}{Z^{1/3}} - Z^{1/3} \quad (11)$$

$$Z = M^3(-8 + 9\epsilon - 2\epsilon^2) + \sqrt{M^6\epsilon^2(5 - 9\epsilon + 4\epsilon^2)}.$$

We illustrate dependency of ISCO radius r_{ISCO} on ϵ . Fig. (1), displays the dependency of ISCO radius on the spin a/M (for Kerr BH) and the GUP parameter ϵ (for the S-GUP BH), respectively.

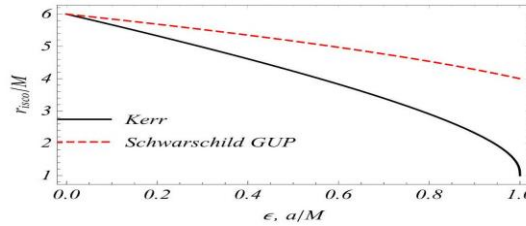


FIG. 1: These graphs depict the relationship between ISCO positions, spin parameter a/M and ϵ , respectively (left panel) and the degeneracy between Kerr and S-GUP metric parameters which provide the same ISCO radius.

Fundamental frequencies around S-GUP spacetime. In this section, we look at the basic frequencies that control the movement of a particle of vicinity of massive compact astrophysical object in given spacetime. We focus on the frequencies related to circular orbits, as well as the radial and vertical swings of the particle's path. These frequencies are important for studying models of quasi-periodic oscillations (QPOs).

A. Keplerian frequencies. The angular velocity of the particles vicinity of the massive object is referred as the orbital frequency Ω_ϕ , defined as $\Omega_\phi = \frac{d\phi}{dt}$. By using this definition, we can get following equation for orbital frequency in this spacetime [9],

$$\Omega_\phi = \sqrt{\frac{-\partial_r g_{tt}}{\partial g_{\phi\phi}}} = \sqrt{\frac{f'(r)}{2r}} \quad (12)$$

Also, to express the frequencies in Hertz (Hz) we use the following equation:

$$\nu_\phi = \frac{c^3}{2\pi GM} \sqrt{\frac{M(r - M\epsilon)}{r^2}} \quad (13)$$

B. Harmonic oscillations. By considering a particle perturbation along the radial, angular, and vertical axes within its stable orbit vicinity of a massive object situated in the equatorial plane, resulting from minor deviations from these orbits as $r_0 + \delta r$ and $\theta_0 + \delta \theta$, where $\theta_0 = \pi/2$. The frequencies of radial and vertical oscillations, observable by a distant observer, rewritten:

$$\frac{d^2 \delta r}{dt^2} + \Omega_r^2 \delta r = 0, \quad \frac{d^2 \delta \theta}{dt^2} + \Omega_\theta^2 \delta \theta = 0 \quad (14)$$

where

$$\Omega_r^2 = -\frac{1}{2g_{rr}t^2} \partial_r^2 V_{\text{eff}}(r, \theta) \Big|_{\theta=\pi/2}, \quad (15)$$

$$\Omega_\theta^2 = -\frac{1}{2g_{\theta\theta}t^2} \partial_\theta^2 V_{\text{eff}}(r, \theta) \Big|_{\theta=\pi/2}, \quad (16)$$

These are the frequencies for the radial and vertical oscillations. Using the equations, we can rewrite the formulas for the frequencies in the spacetime as follows:

$$\nu_r = \frac{c^3}{2\pi GM} \frac{\sqrt{Mr^2(r-6M) - 4\epsilon^2 M^2 + 9\epsilon M^3 r}}{r^3},$$

Astrophysical Applications. This section examines the potential Frequencies of Twin Peak QPOs vicinity of a Schw. BH with modifications from the GUP. We use QPO models to analyze these frequencies, focusing on compact object in microquasars such as **GRO J1655-40, GRS 1915+105, XTE 1550-564, and XTE**.

We study upper and lower frequency values using models of twin-peak High-Frequency QPOs (HF QPOs). These models describe particle motion around compact objects: **Relativistic Precession (RP) Model, Epicyclic Resonance (ER) Model, Warped Disc (WD) Model.**

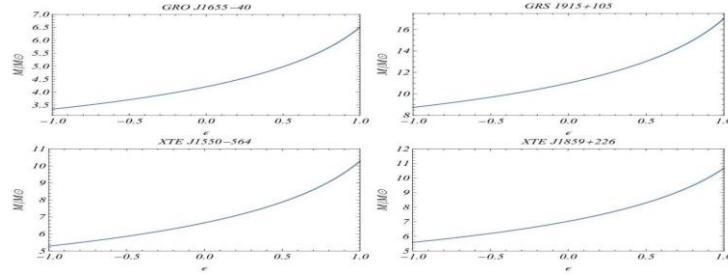


FIG. 2: Estimated Mass of the central BHs in the heart of microquasars through QPOs in RP models as a function of GUP parameter ϵ .

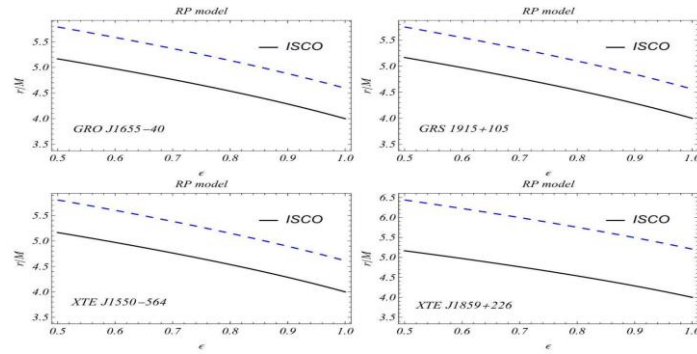


FIG. 3: Dependency of location of radiation on parameter ϵ under RP models for different BHs at the center of different microquasars.

Fig. (2) shows the possible relationship between BH's mass and ϵ for different BH candidates. Conversely, the higher mass prediction is valid for the case of GRS 1915-105.

Conclusion. This work primarily focuses on comparing the gravitational effects on particles motions vicinity of Schw. and GUP astrophysical massive object. We discussed the ISCO, decrease with increasing ϵ . Importantly, it is worth noticing that the behavior of both quantities revert to Schwarzschild case when $\epsilon = 0$. We further discussed the spin parameter a/M of rotating Kerr BH mimics the ϵ of S-GUP BH. The effect of ϵ parameter can be figured out as a Kerr BH with smaller spin coefficient. It is evident that the assumptions of mass for the massive object at the focus of the microquasar, known as GRO J1655-40, can assume smaller values. Conversely, the highest prediction for mass is applicable to the case of GRS 1915-105. Generally, for all BH candidates considered, the mass increases with an increase in ϵ .

REFERENCES

1. L. Susskind and J. Uglum, Nucl. Phys. B Proc. Suppl. 45BC, 115 (1996), arXiv:hep-th/9511227.
2. A. F. Ali, S. Das, and E. C. Vagenas, Phys. Lett. B 678, 497 (2009), arXiv:0906.5396 [hep-th].
3. A. Nasser Tawfik and A. Magied Diab, Rep. Prog. Phys. 78, 126001 (2015), arXiv:1509.02436 [physics.gen-ph].
4. D. Amati, M. Ciafaloni, and G. Veneziano, Phys. Lett. B 197, 81 (1987).
5. M. Moussa, Annals Phys. 453, 169305 (2023).
6. K. Jusufi, P. Channuie, and M. Jamil, Eur. Phys. J. C 80, 127 (2020), arXiv:2002.01341 [gr-qc].
7. C. Bambi, Black Holes: A Laboratory for Testing Strong Gravity (2017).
8. H. Hoshimov, O. Yunusov, F. Atamurotov, M. Jamil, and A. Abdujabbarov, Physics of the Dark Universe 43, 101392 (2024), arXiv:2312.10678 [gr-qc].
9. A. Davlatov, B. Narzilloev, I. Hussain, A. Abdujabbarov, and B. Ahmedov, Physics of the Dark Universe 46, 101569 (2024).
10. L. Stella and M. Vietri, in 19th Texas Symposium on Relativistic Astrophysics and Cosmology, edited by J. Paul, T. Montmerle, and E. Aubourg (1998) p. 315.

11. J. Rayimbaev, S. Shaymatov, and M. Jamil, *European Physical Journal C* 81, 699 (2021), arXiv:2107.13436 [gr-qc].
12. S. Kato, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, Volume 60, Issue 1, 25 February 2008, 60, 111 (2008), arXiv:0709.2467 [astro-ph].
13. S. E. Motta, T. M. Belloni, L. Stella, T. Muñoz-Darias, and R. Fender, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 437, 2554 (2014).
14. R. Remillard, M. Muno, J. McClintock, and J. Orosz, in *APS April Meeting Abstracts*, APS Meeting Abstracts (2002) p. N17.076.
15. S. E. Motta, T. Belloni, L. Stella, G. Pappas, J. Casares, A. T. Muñoz-Darias, M. A. P. Torres, and I. V. Yanes-Rizo, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Volume 517, Issue 1, November 2022 517, 1469 (2022), arXiv:2209.10376 [astro-ph.HE] .



UDK: 530.12:531.51

Asalkhon ALIMOVA,
Tashkent State Technical University
E-mail: asalkhon.alimova@yahoo.com
Gulniso ABDUQAYUMOVA,
Undergraduate Student at National University of Uzbekistan
Nozima JURAEVA,
National Research University TIAME

Based on the review of professor F. Atamurotov, Inha University in Tashkent

SPINNING PARTICLES MOTION AROUND THE REISSNER-NORDSTRÖM-LIKE BLACK HOLE

Annotation

In this study, we examine the motion of a spinning particle around a RN-like massive astronomical object. The dynamics of spinning test particles are analyzed using the Mathisson-Papapetrou-Dixon (MPD) equations. The effective potential is derived, and its dependence on the parameters of the Reissner-Nordström-like black hole is explored. The impact of spin of particle on the innermost stable circular orbit (ISCO), as well as the angular momentum and energy, is analyzed for various configurations of black holes.

Key words: charged black holes, spinning particle, MPD equations, innermost stable circular orbits, effective potential.

ДВИЖЕНИЕ ВРАЩАЮЩИХСЯ ЧАСТИЦ ВОКРУГ ЧЁРНОЙ ДЫРЫ, ПОДОБНОЙ РЕЙССНЕРА-НОРДСТРЁМА

Аннотация

В данном исследовании рассматривается движение вращающейся частицы вокруг черной дыры, подобной черной дыре Рейсснера–Нордстрёма. Динамика вращающихся тестовых частиц анализируется с использованием уравнений Матиссона–Папаетру–Диксона (MPD). Выводится эффективный потенциал и исследуется его зависимость от параметров черной дыры, подобной Рейсснера–Нордстрёму. Изучается влияние спина частицы на внутреннюю границу устойчивой круговой орбиты (ISCO), а также удельный угловой момент и энергия на ISCO для различных параметров «волосатых» черных дыр.

Ключевые слова: заряженные черные дыры, вращающаяся частица, уравнения MPD, внутренняя граница устойчивой круговой орбиты, эффективный потенциал.

REISSNER-NORDSTRÖM-GA O'XSHASH QORA TUYNUK ATROFIDA AYLANUVCHI ZARRALARNING HARAKATI

Аннотация

Ushbu tadqiqotda Reissner-Nordström-ga o'xshash qora tuynuk atrofida aylanayotgan aylanuvchi zarra harakati ko'rib chiqiladi. Aylanuvchi sinov zarralarining dinamikasi Mathisson-Papapetrou-Dixon (MPD) tenglamalari yordamida tahlil qilinadi. Effektiv potensial chiqarilib, uning Reissner-Nordström-ga o'xshash qora tuynuk parametrlarga bog'liqligi o'rganiladi. Zarrachaning aylanish momentining eng ichki barqaror aylana orbitasi (ISCO) ga ta'siri, shuningdek, "sochli" qora tuynuklarning turli parametrlari uchun ISCO dagi maxsus burchak momenti va energiyasi tadqiq etiladi.

Kalit so'zlar: zaryadlangan qora tuynuklar, aylanuvchi zarra, MPD tenglamalari, eng ichki barqaror aylana orbita, effektiv potensial.

Introduction. Testing gravity theory is one of the important issues in exploring the theory as a whole. Particularly, it helps to understand the behavior of the field in different astrophysical scenarios [1-9]. The motivation for exploring modified and alternative theories of gravity stems from the fact that standard general relativity (GR) encounters several key unresolved issues. The existence of the singularity, inconsistency with quantum field theory, issues related to cosmology requiring the presence of dark energy and dark matter are few of them. In order to resolve these issues, one needs to consider the further modifications of the theory or suggest an alternative way of considering the gravitational interaction. One of the possible ways of modifying the standard gravity theory is to consider of breaking some symmetries. In particular, Lorentz symmetry is one of the features of the standard models and it is supported by the current observational and experimental data. In this study, we aim to investigate the dynamics of spinning particles around a charged Reissner-Nordström-like black hole.

Charged Hairy Black Hole. The spacetime metric of the Reissner-Nordström-like (RN-like) black hole in Boyer-Lindquist coordinates is given by

$$ds^2 = -f dt^2 + \frac{1}{f} dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\phi^2 \quad (1)$$

where

$$f = \frac{1}{1-l} - \frac{2M}{r} + \frac{Q^2}{(1-l)^2 r^2} \quad (2)$$

Here, M represents the total mass of the black hole, Q denotes the electric charge, and l is a dimensionless parameter, whose value is constrained to be extremely small based on classical gravitational experiments within the Solar System. Notably, when $l = 0$, the solution reduces to the standard Reissner-Nordström (RN) metric, while setting $Q = 0$ recovers the Schwarzschild spacetime.

Now, let us analyze the characteristics of this RN-like black hole, which can be visualized through a graph illustrating the structure of its horizons. According to the metric (1), the radii of the horizons are determined by the relation:

$$r_{\pm} = (1 - l) \left(M \pm \sqrt{M^2 - \frac{Q^2}{(1 - l)^3}} \right). \quad (3)$$

As the parameter l increases, first panel in Fig. 1 demonstrates that the outer event horizon r_+ shrinks, whereas the inner Cauchy horizon r_h expands.

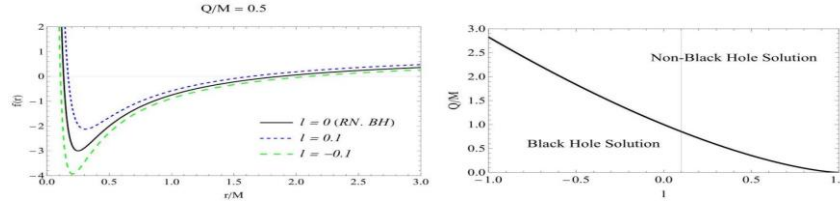


FIG. 1: First panel: Metric function $f(r)$ for the RN-like solution with varying l parameter and charge Q . Second panel: The black hole region for the RN-like solution, where the boundary separates the regions where black holes exist from the empty region, which contains naked singularities.

The dynamics of a particle. Particularly the equation of motion for a spinning particle, are governed by the Mathisson-Papapetrou-Dixon (MPD) equations in curved spacetime. These equations describe the motion of a particle with intrinsic spin and can be expressed as follows:

$$\frac{Dp^\mu}{d\tau} = -\frac{1}{2}R^\mu_{\nu\alpha\beta}u^\nu S^{\alpha\beta}, \quad \frac{DS^{\alpha\beta}}{d\tau} = p^\alpha u^\beta - u^\alpha p^\beta, \quad (4)$$

where p^μ and u^ν are the canonical 4-momentum and the kinematical 4-velocity of the test particle, $R^\alpha_{\beta\delta\sigma}$ is the Riemann tensor, and τ is affine parameter. $S^{\alpha\beta}$ is the spin tensor that represents a quantity that defines the angular momentum of a test particle in terms of its spin. It should be noted that $S^{\alpha\beta}$ in Eq. (4) is an antisymmetric tensor, which means $S^{\alpha\beta} = -S^{\beta\alpha}$.

To solve Eq. (4), we introduce the Tulczyjew spin supplementary condition (SSC). This condition states that the spin of a particle should be measured relative to its center of mass, which given by the relation:

$$S^{\mu\nu}p_\mu = 0. \quad (5)$$

It is evident from Eq. (5) that the spin and the canonical momentum of particles constitute two independent invariants, which are described by the following relations:

$$S^{\mu\nu}S_{\mu\nu} = 2S^2, \quad p^\mu p_\mu = -m^2 \quad (6)$$

Given the existence of a Killing vector k , there exists a conserved quantity in the motion of a spinning particle, which is related by

$$C_\xi = P^\mu k_\mu + \frac{1}{2}S^{\mu\nu}\nabla_\mu k_\nu \quad (7)$$

Due to the symmetry of the metric, it is evident that the line element in Eq. (1) admits two Killing vector fields. One of these vector fields corresponds to time translation, while the other is related to rotational symmetry. These Killing vector fields are expressed as follows:

$$\xi^\alpha = \delta^\alpha_t, \quad \xi^\alpha = \delta^\alpha_\phi. \quad (8)$$

In accordance with the conservation of energy E and angular momentum J ($J = L + S$, $L = \mathcal{L}m$), respectively, for the first of these vectors, we find

$$C_t = E = -p_t + \frac{1}{2}g_{t\alpha\beta}S^{\alpha\beta} = -p_t + \frac{1}{2}g_{tt,r}S^{tr}, \quad (9)$$

$$C_\phi = J = p_\phi - \frac{1}{2}g_{\phi\alpha\beta}S^{\alpha\beta} = p_\phi - \frac{1}{2}g_{\phi\phi,r}S^{\phi r}. \quad (10)$$

In astrophysical studies, it's common to consider test particles moving in the equatorial plane, where $\theta = \pi/2$. In this plane, the metric functions only depend on the radial coordinate, and $p^\theta = 0$. As a result, the components of the spin tensor are:

$$S^{\theta\mu} = 0 \quad (11)$$

Now, employing the Tulczyjew spin supplementary condition (SSC) (5), we determine the non-zero components of the spin tensor:

$$S^{t\phi} = -\frac{p_r}{p_\phi}S^{tr}, \quad (12)$$

$$S^{r\phi} = \frac{p_t}{p_\phi}S^{tr}. \quad (13)$$

From the Eq. (6) we find the radial momentum of the particle:

$$p_r^2 = g_{rr}(-g^{tt}p_t^2 - g^{\phi\phi}p_\phi^2 - m^2) \quad (14)$$

Expressing in terms of Eqs. (12), (13) and (14), in accordance with the law of conservation of spin Eq. (6), we can determine the S_{tr} component of the spin tensor:

$$S^{tr} = \pm \frac{p_\phi s}{\sqrt{-g_{tt}g_{rr}g_{\phi\phi}}} \quad (15)$$

Here, $s = S/m$ denotes the specific angular momentum, or spin, of the particle. This quantity can be positive or negative, depending on the direction of p_ϕ .

Now this expression can be rewritten as follows:

$$p_r^2 = \frac{\beta}{\alpha} (E - V_{eff}^+)(E - V_{eff}^-), \quad (22)$$

from which

$$V_{eff}^\pm = \frac{-\delta J \pm \sqrt{(\delta J)^2 - 4\gamma\beta}}{2\beta} \quad (23)$$

where $\gamma = \sigma J^2 - \rho$, and

$$\begin{aligned} \alpha &= g_{rr} \left[1 - \frac{s^2 g_{tt,r} g_{\phi\phi,r}}{4 g_{tt} g_{rr} g_{\phi\phi}} \right]^2, \\ \beta &= -g^{tt} + \frac{s^2 g^{\phi\phi} (g_{\phi\phi,r})^2}{4 g_{tt} g_{rr} g_{\phi\phi}}, \\ \sigma &= -g^{\phi\phi} + \frac{s^2 g^{tt} (g_{tt,r})^2}{4 g_{tt} g_{rr} g_{\phi\phi}}, \\ \rho &= m^2 \left[1 - \frac{s^2 g_{tt,r} g_{\phi\phi,r}}{4 g_{tt} g_{rr} g_{\phi\phi}} \right]^2. \end{aligned}$$

Before examining the spinning motion of test particles, it is essential to consider another critical factor influenced by the particle's spin: the superluminal bound on its dynamics. The canonical four-momentum p^α and four-velocity u^α of a spinning particle are not necessarily parallel. As a result, the normalization condition $u_\alpha u^\alpha = -1$ does not always hold, although $p_\alpha p^\alpha = -m^2$ remains satisfied. As the spinning particle approaches the center of spacetime, its four-velocity increases. For certain values of spin and radius, some components of the four-velocity may grow without limit, causing $u_\alpha u^\alpha$ to approach $+\infty$. Prior to this divergence, the particle's motion shifts from a time-like to a space-like trajectory. Since space-like (superluminal) motion is physically unattainable, real particles cannot cross into the region where $u_\alpha u^\alpha > 0$. Therefore, an additional constraint, known as the superluminal bound, must be imposed, ensuring that $u_\alpha u^\alpha = 0$. To ensure that the trajectory of spinning test particles retains a time-like nature, the following condition must be imposed (on the equatorial plane):

$$\frac{u^\alpha u_\alpha}{(u^t)^2} = g_{tt} + g_{rr}(u^r)^2 + g_{\phi\phi}(u^\phi)^2 \leq 0 \quad (32)$$

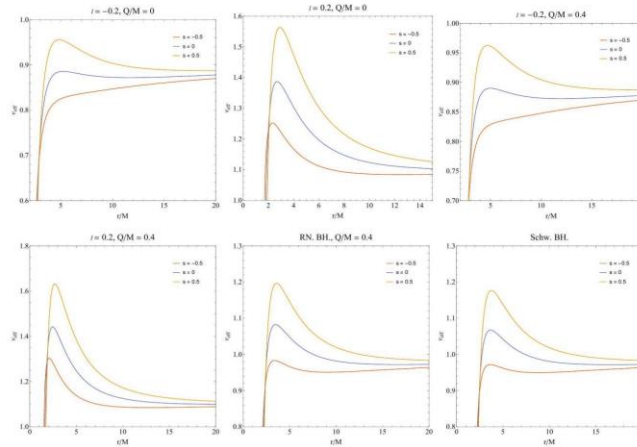


FIG. 2: The radial dependence of the effective potential $\mathcal{V}_{eff}$ for spinning motion is shown for various values of the metric parameter l and charge Q , with the total angular momentum fixed at $\mathcal{L} = 4.5$.

Fig. 2 depicts the radial behavior of the effective potential $\mathcal{V}_{eff}$ for a spinning particle, considering different values of the parameter l , the charge-to-mass ratio Q/M , and the particle's spin s , while maintaining the total angular momentum $\mathcal{L} = 4.5$.

Conclusion. This article investigates the motion of spinning particles around a charged black hole. By employing the Mathisson-Papapetrou-Dixon (MPD) equations and the Tulczyjew condition, we studied how the black hole's properties, charge, and particle spin affect motion. We analyzed the black hole's metric and found the limits of charge and parameters before it becomes a naked singularity. The MPD equations helped determine the effective potential, showing that charge and the metric parameter increase it. The investigate ISCO revealed that increasing charge, spin, or the metric parameter decreases the ISCO radius, angular momentum, and energy. This research highlights the role of spin, charge, and black hole properties in orbital stability and collisions. It has applications in modeling accretion disks, jets, and gravitational waves. Future work could explore dynamic black holes or higher dimensions for a deeper understanding of strong gravitational fields.

REFERENCES

1. F. W. Dyson, A. S. Eddington, and C. Davidson, Phil. Trans. R. Soc. 220, 291 (1920).

2. B. P. Abbott and et al., Phys. Rev. Lett 116, 061102 (2016).
3. K. Akiyama and et al. (Event Horizon Telescope Collaboration), Astrophys. J. 875, L1 (2019), arXiv:1906.11238 [astro-ph.GA].
4. K. Akiyama and et al. (Event Horizon Telescope Collaboration), Astrophys. J. 875, L6 (2019), arXiv:1906.11243 [astro-ph.GA].
5. K. Akiyama and et al. (Event Horizon Telescope Collaboration), Astrophys. J. 930, L12 (2022).
6. K. Akiyama and et al. (Event Horizon Telescope Collaboration), Astrophys. J. 910, L12 (2021).
7. E. Berti and a. et, Class. Quan. Grav. 32, 243001 (2015), arXiv:1501.07274 [gr-qc].
8. C. Bambi, Phys. Rev. D 87, 023007 (2013), arXiv:1211.2513 [gr-qc]
9. J. Casanellas, P. Pani, I. Lopes, and V. Cardoso, Astrophys. J. 745, 15 (2012).



UDK: 57.022.023.577.11.12

Vladimir ARUSTAMOV,
Ion plazmasi va lazer texnologiyalari instituti katta ilmiy xodimi, f.m.f.n
E-mail: v.arustamov@iplt.uz
Boburjon KAXRAMONOV,
Ion plazmasi va lazer texnologiyalari instituti katta ilmiy xodimi, PhD
Ilyos KHUDAYQULOV,
Ion plazmasi va lazer texnologiyalari instituti katta ilmiy xodimi, PhD

F.-m.f.d., k.i.x Sh.Hojiyev taqrizi asosida

MAGNETRON CHANGLATISH VA VAKUUM YOYI USULLARI BILAN OLINGAN QOPLAMALARNING MORFOLOGIK VA STRUKTURAVIY XUSUSIYATLARI

Annotatsiya

Mahsulot yuzalariga ishqalanish va korroziyaga chidamlilik xususiyatlarini berish zamonaviy sanoatning asosiy vazifalaridan biridir. Ushbu ishda magnetron changlatish va vakuum yoyi texnologiyasi bilan qoplangan titan nitrid (TiN) qoplamalarining xususiyatlarini har tomonlama tahlil qilish va qiyosiy taqqoslash amalga oshirildi. Ularning strukturaviy xususiyatlarining o'xshashligiga qaramay, qoplamalarni sirt bir xilligida sezilarli darajada farq qilishi aniqlandi.

Kalit so'zlari: Titan nitrid, magnetronli changlatish, vakuum yoyi usuli, sirt bir xilligi, korroziyaga chidamlilik, sirt morfologiyasi, qoplama qalinligi, rentgen nurlari difraktsiyasi (XRD), g'adir budirlik tahlili, nano o'lchamdagi qoplamalar, elektr o'tkazuvchanligi, gaz plazmasi, gaz, qoplama texnologiyalari, inertlik tozalash usullari, korroziyaga chidamli qoplamalar.

МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА ПОКРЫТИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДАМИ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ И ВАКУУМНО-ДУГОВОГО ОСАЖДЕНИЯ

Аннотация

Придание поверхностям изделий износостойкости и коррозионной стойкости является одной из приоритетных задач современной промышленности. В настоящем исследовании проведен комплексный анализ и сравнительное сопоставление свойств нитрида титана (TiN)-покрытий, осажденных методами магнетронного распыления и вакуумной дуговой технологии. Установлено, что, несмотря на аналогичность их структурных характеристик, покрытия значительно различаются по однородности поверхности.

Ключевые слова: Нитрид титана, магнетронное распыление, метод вакуумной дуги, однородность поверхности, коррозионная стойкость, морфология поверхности, толщина покрытия, рентгеновская дифракция (XRD), анализ шероховатости, наноразмерные покрытия, электрическая проводимость, газовая плазма, технологии нанесения покрытий, инертный газ, монокристаллы, методы очистки, коррозионностойкие покрытия.

MORPHOLOGICAL AND STRUCTURAL PROPERTIES OF COATINGS OBTAINED BY MAGNETRON SPUTTERING AND VACUUM ARC METHODS

Annotation

Imparting wear-resistant and corrosion-resistant properties to the surfaces of products is one of the main tasks of the modern economy. In this work, the properties of titanium nitride coatings applied by magnetron sputtering and vacuum arc methods were studied and compared. The coatings obtained by these two methods are structurally similar; however, their surface uniformity differ significantly.

Key words: Titanium nitride, magnetron sputtering, vacuum arc method, surface uniformity, corrosion resistance, surface morphology, coating thickness, XRD (X-ray Diffraction Analysis), roughness analysis, nanosurface coatings, electrical conductivity, gas plasma, coating technologies, inert gas, single crystals, cleaning methods, corrosion-resistant coatings.

Kirish. Mashina qismlari va mexanizmlarining ishchi yuzalarini mustahkamlash uchun ishlatiladigan karbidlar va nanokarbon zarralari bilan qattiq qoplamalar asosida yuqori iste'mol xossalariga ega bo'lgan mahsulotlarni yaratish hozirgi kundagi iqtisodiy muammolardan biri bo'lib, bu birinchi navbatda mahsulotlarning xizmat qilish muddatini oshiradi [1]. Monokristallarni etishtirish texnologiyasida va boshqa metallurgiya jarayonlarida bunday qoplamalarni olishda qo'shimcha tozalashsiz texnik toza inert gaz ishlatiladi.

Mavzuga oid adabiyotlar tahlili. Fe-Co-Ni-Cu-Al-Ti tizimining magnit qotishmalarining monokristall chidamli qoplamalarda titan bilan o'tga chidamli shakllarda qoplama qoplashda qotishmaning uglerod va azot bilan qo'shimcha to'yinganligi sodir bo'lmaydi. Vakuum-elektr razryad usullari bilan qo'llaniladigan qoplamalarni quyidagi asosiy belgilarga ko'ra tasniflash mumkin:

1. Maqsad bo'yicha: ishqalanishga bardoshli [2, 3], yuqori haroratga chidamli [4], korroziyaga qarshi [5], dekorativ [6] va boshqa qoplamalar.

2. Fizikaviy va kimyoviy xossalari bo'yicha: metall [7], metall bo'lmagan [8], yuqori haroratga chidamli [9], kimyoviy jihatdan chidamli [10], nur qaytaruvchi [11] va boshqalar.

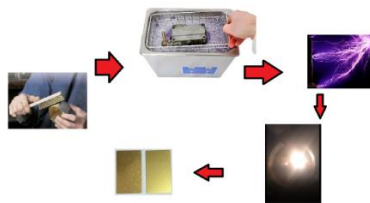
3. Yuzada hosil bo'ladigan qoplamalarning fazaviy xususiyatiga ko'ra: silitsid [12], borid [13], karbid [14] va boshqa [15] qoplamalar.

Ti-Nb tizimiga mansub yupqa metall qoplamalarni ikki magnetron manbadan foydalangan holda metall namunalarni qoplash orqali hosil qilishga e'tibor qaratiladi. Ushbu manbalar qoplamaning qoplash tezligida farq qiladi va namuna aylantirilishi orqali element nisbatlari keng diapazonda bo'lgan, qalinligi bir xil bo'lgan qoplamalar olish imkonini beradi. Asosiy materialni qoplash jarayonida Nb qo'shimchasi α -Ti ning yuqori haroratli fazasini barqarorlashtiruvchi ta'sir ko'rsatadi - niobiy atomlarining qoplama o'sishi paytida Ti kubiksimon markazlashgan kristall panjarasiga integratsiyalanadi. Metall qoplamalarning yuza morfologiyasi qoplama qoplangandan so'ng hosil bo'lgan oksidli tuzilmalarning qalinligida ham sezilarli darajada farq qiladi va dastlabki metall plyonkalaridagi Ti ning atom nisbatiga bog'liq [16]. Eng yaxshi natija Ti (26 at.%), Si (8,5 at.%), N (65 at.%) tarkibiga ega bo'lgan, qattiqligi 29 GPa ni tashkil etuvchi qoplama tomonidan namoyon etildi. Bu qoplama aylanuvchi taglikning sovuq yuzasiga, uning potentsiali erkin holda ushlab turilgan sharoitda cho'ktirilgan. Ishda [17] vakuum yoyi usuli bilan qoplangan qoplamaga Ni, Co, Cu va Ti nanozarralari modifikatsiyasi tadqiq etilgan.

Tadqiqot metodologiyasi. Shuningdek, TiN ning elektron o'tkazuvchanligi titaniumning yarim to'lg'angan d-bandiga bog'liq [18], optik xususiyatlar esa erkin Ti-d elektroni va N-p $\rightarrow$ Ti-d o'tkazuvchilararo o'tishlar ta'sirida hosil bo'ladi [19, 20, 21]. Avvalgi tadqiqotlarda magnetron changlatish va vakuum yoy razryadi usullari yordamida olingan namunalarning xususiyatlari va morfologiyasini birgalikda kompleks o'rganish amalga oshirilmagan. Ushbu ishda esa ushbu ikki usul bilan olingan namunalarning rentgen diffraksiya (XRD) tahlili va yuzaning notekisligi darajasi o'rganildi.

Bundan tashqari, ishlar titan nitridining ayrim xususiyatlarini, masalan, uning optik xususiyatlari [18], elektr o'tkazuvchanligi [22] va boshqalarni o'rganilgan. TiN ning elektr o'tkazuvchanligi titanning yarim bo'sh D-bandiga bog'liq [18], optik xususiyatlar esa erkin o'tkazuvchi elektronlar Ti-d va tarmoqli o'tishlari N-p $\rightarrow$ Ti-d [19 - 21] tufayli hosil bo'ladi. Ko'rib chiqilayotgan ishlarda magnetronli changlatish va vakuum yoyi usullari bilan olingan namunalarning xususiyatlari va morfologiyasi bir vaqtning o'zida har tomonlama o'rganish amalga oshirilmagan. Ushbu ishda esa ushbu ikki usul bilan olingan namunalarning rentgen diffraksiya (XRD) tahlili va yuzaning notekislik darajasi o'rganildi.

Qoplamalarni qo'llash asosiga qalinligi 3 mm bo'lgan shisha olinadi. Namuna avvalo kimyoviy usul va ultratovushli vannada tozalandi (1-rasm).



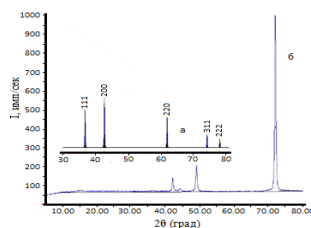
1-rasm. Namunani tayyorlash jarayoni va qatlam o'sishi

Ushbu ishda shisha yuzasi dastlabki kimyoviy va ultratovushli tozalashdan so'ng, qoplamalar magnetron changlatish va vakuum-yoy usullari yordamida qoplandi va ularning taqqoslama tahlili amalga oshirildi. Dastlab namunalar yuzasiga magnetron changlatish usuli yordamida titan nitrid (TiN) qoplami qoplandi. Magnetron changlatish manbaida magnit maydon kuchi 0,8 – 1,0 mTl ni tashkil etdi. Ishchi gaz sifatida argon ishlatildi va 10^{-1} – 10^{-2} Pa oralig'idagi qoldiq bosimda evakuatsiya qilingan ish hajmiga uzatildi. Magnetron changlatish qurilmasidagi kuchlanish 300–400 V oralig'ida bo'ldi. Namunaning ishchi yuzasiga qoplama qoplash jarayoni 20–30 daqiqa davom etdi.

Vakuum-yoy razryadi plazmasidan qoplama qoplash jarayonida namunalarni tozalash va changlatish $5 \cdot 10^{-4}$ Pa bosim ostidagi vakuum muhitida amalga oshirildi. Yoy razryadi toki 150–350 A oralig'ida o'zgarib turgan, yoy oralig'ida kuchlanish esa 30–40 V ni tashkil etgan. Qoplama qo'llashning boshlang'ich bosqichida namunalar yuzasining harorati 473,15–523,15 K diapazonida bo'lgan. Bu harorat namuna yuzasining 350 A tokdagi ion bombardimon qilish orqali hosil qilingan. Qayta ishlangan namunalar yuzasiga qoplama qoplash jarayoni $0,035 \cdot 10^{-6}$ m/s tezlikda olib borilgan va yotqizilgan qoplama qalinligi 1,5–2 mkm ni tashkil etgan.

Olingan qoplamalarning rentgen fazaviy tahlili Shimadzu (Yaponiya) firmasining XRD-6100 qurilmasida CuK α nurlanishi ($\lambda=1,540600$ Å) yordamida amalga oshirildi. Tahlil 2 θ burchak diapazonida 10^0 dan 80^0 cha, 0,05 daraja qadam bilan va detektorning doimiy aylanish tezligi 4 daraja/minut bo'lgan holatda olib borildi. Yuzaning notekislik darajasi esa Agilent 5500 skanerlovchi zondli mikroskop yordamida baholandi.

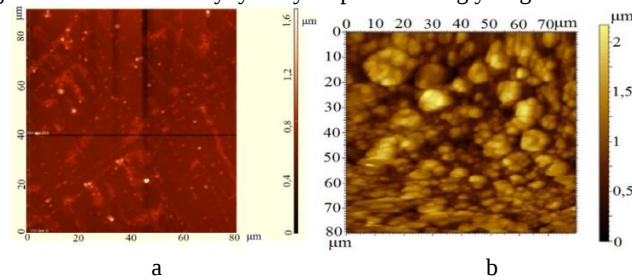
Tahlil va natijalar. 2-rasmda magnetron changlatish manbaida olingan titan nitrid (TiN) qoplamasining diffraktogrammasi keltirilgan.



2-rasm. Magnetron changlatish manbaida olingan titan nitrid (TiN) qoplamasining diffraktogrammasi.

2-rasmda keltirilgan diffraktogrammada TiN ga tegishli uchta asosiy cho'qqi (pik) ko'rinadi, shuningdek, uchta belgilangan burchak qiymatida past intensivlikdagi cho'qqilar ham qayd etilgan: $2\theta = 12,48^0$ TiN (110) tekisliklaridan aks ettirilgan nurlar; $2\theta = 49^0$ TiN (111) tekisliklaridan aks ettirish; va $2\theta = 73,12^0$ TiN (220) tekisliklaridan aks ettirishga mos keladi.

Bundan tashqari, 3a-rasmda metall yuzasiga qoplangan titan nitrid qoplamasining 80×80 mkm o'lchamdagi morfologiyasi ko'rsatilgan. Rasmda ko'rinib turibdiki, yotqizilgan titan nitrid qoplamaning sirt notekisligi 1,6 mkm ni tashkil qiladi. Ushbu tasvirda nitridning o'sib borayotgan yirik agregatlari va ular o'zaro qo'shilib ketgan holatlari kuzatildi. Bu sirtning qo'shilishi va yirik titan nitrid agregatlarining shakllanishi vakuum yoy razryadi plazmasining yuzaga ta'siri natijasida yuz beradi.



3-rasm. Ikki xil usulda olingan namunalarining AKM (Atom-kuch mikroskopiyesi) tasvirlari: a) vakuum yoy usuli; b) magnetron usuli

Ushbu ikki xil usulda olingan namunalar yuzasining tasvirlaridan ko'rinib turibdiki, magnetron changlatish usuli bilan olingan namuna yuzasi bir xil (homogen) tuzilishga ega. 4b-rasmda esa vakuum yoy razryadi usuli bilan olingan namunada nisbatan notekis sirt va murakkab relyefli qatlam shakllanganligi kuzatiladi.

Xulosa va takliflar. Ushbu ishda vakuum yoy razryadi va magnetron usullari bilan qoplangan titan nitrid qoplamalari tahlil qilindi. Olingan qoplamalar qalinligi 1,6-2 mkm ni tashkil qiladi. Magnetron usuli bilan olingan qoplamalar nisbatan bir xil qatlamga ega bo'lsa, vakuum yoy usuli bilan olingan qoplamalarda sirt notekisligi yuqoriroq. Vakuum yoy razryadi plazmasidan qoplama qoplash tezligining yuqoriligi sababli, qoplangan atomlarning sirt bilan o'zaro ta'siri sezilarli darajada kuchayadi, natijada agregatlashish va qoplamaning relyefi ortadi. Aksincha, magnetron usuli bilan qoplangan qoplamalar homogen bo'lib, bir xil yuzaga ega.

ADABIYOTLAR

- Mikhailov B. I. Arc spot scanning of tube electrodes in gas-vortex plasmatorches //Thermophysics and Aeromechanics. – 2008. – T. 15. – №. 2. – PP. 307-320. <https://link.springer.com/content/pdf/10.1134/S0869864308020145.pdf>
- PalDey S., Deevi S. C. Single layer and multilayer wear resistant coatings of (Ti, Al) N: a review //Materials Science and Engineering: A. – 2003. – T. 342. – №. 1-2. – PP. 58-79. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(02\)00259-9](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(02)00259-9)
- Voevodin A. A., Zabinski J. S. Supertough wear-resistant coatings with 'chameleon' surface adaptation //Thin Solid Films. – 2000. – T. 370. – №. 1-2. – PP. 223-231. [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(00\)00917-2](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(00)00917-2)
- Gnedenkov S. V. et al. Production of hard and heat-resistant coatings on aluminium using a plasma micro-discharge //Surface and Coatings Technology. – 2000. – T. 123. – №. 1. – PP. 24-28. [https://doi.org/10.1016/S0257-8972\(99\)00421-1](https://doi.org/10.1016/S0257-8972(99)00421-1)
- Cui G. et al. A comprehensive review on smart anti-corrosive coatings //Progress in Organic Coatings. – 2020. – T. 148. – PP. 105821. <https://doi.org/10.1016/j.porgcoat.2020.105821>
- Budke E. et al. Decorative hard coatings with improved corrosion resistance //Surface and Coatings Technology. – 1999. – T. 112. – №. 1-3. – PP. 108-113. [https://doi.org/10.1016/S0257-8972\(98\)00791-9](https://doi.org/10.1016/S0257-8972(98)00791-9)
- Hill M. T. et al. Lasing in metallic-coated nanocavities //Nature Photonics. – 2007. – T. 1. – №. 10. – PP. 589-594. <https://doi.org/10.1038/nphoton.2007.171>
- Remcho V. T., Tan Z. J. Peer Reviewed: MIPs as Chromatographic Stationary Phases for Molecular Recognition //Analytical chemistry. – 1999. – T. 71. – №. 7. – PP. 248A-255A. <https://doi.org/10.1021/ac990292q>
- Nwaogu U. C. et al. New sol-gel refractory coatings on chemically-bonded sand cores for foundry applications to improve casting surface quality //Surface and Coatings Technology. – 2011. – T. 205. – №. 16. – PP. 4035-4044. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2011.02.042>
- Mullangi D. et al. Super-hydrophobic covalent organic frameworks for chemical resistant coatings and hydrophobic paper and textile composites //Journal of Materials Chemistry A. – 2017. – T. 5. – №. 18. – PP. 8376-8384. <https://doi.org/10.1039/C7TA01302G>
- Prasad K. et al. Highly reflective coatings //Int J Appl Eng Res. – 2018. – T. 13. – №. 22. – PP. 15773-15782. <https://doi.org/10.1007/s42452-019-1169-x>
- Knittel S. et al. Development of silicide coatings to ensure the protection of Nb and silicide composites against high temperature oxidation //Surface and Coatings Technology. – 2013. – T. 235. – PP. 401-406. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2013.07.053>
- Medvedovski E. Formation of Corrosion-Resistant Thermal Diffusion Boride Coatings //Advanced Engineering Materials. – 2016. – T. 18. – №. 1. – PP. 11-33. <https://doi.org/10.1002/adem.201500102>
- Mahade S. et al. Exploiting suspension plasma spraying to deposit wear-resistant carbide coatings //Materials. – 2019. – T. 12. – №. 15. – PP. 2344. <https://doi.org/10.3390/ma12152344>
- Gu Y. et al. Technical characteristics and wear-resistant mechanism of nano coatings: a review //Coatings. – 2020. – T. 10. – №. 3. – p. 233. <https://doi.org/10.3390/coatings10030233>
- Musil J., Jankovcova H., Cibulka V. Formation of Ti_{1-x}Si_x and Ti_{1-x}Si_xN films by magnetron co-sputtering //Czechoslovak journal of physics. – 1999. – T. 49. – №. 3. – PP. 359-372. <https://link.springer.com/content/pdf/10.1023/A:1022853101763.pdf>
- Jiao J., Seraphin S. Carbon encapsulated nanoparticles of ni, co, cu, and ti //Journal of Applied Physics. – 1998. – T. 83. – №. 5. – PP. 2442-2448. <https://doi.org/10.1063/1.367004>

18. Patsalas P., Kalfagiannis N., Kassavetis S. Optical properties and plasmonic performance of titanium nitride //Materials. – 2015. – T. 8. – №. 6. – С. 3128-3154. <https://doi.org/10.3390/ma8063128>
19. Yu C., Jiang S., Lu R. High order harmonic generation in solids: a review on recent numerical methods //Advances in Physics: X. – 2019. – T. 4. – №. 1. – PP. 1562982. <https://doi.org/10.1080/23746149.2018.1562982>
20. Diroll B. T. et al. Broadband ultrafast dynamics of refractory metals: TiN and ZrN //Advanced Optical Materials. – 2020. – T. 8. – №. 19. – PP. 2000652. [10.1109/RAPID54473.2023.10264707](https://doi.org/10.1109/RAPID54473.2023.10264707)
21. Novaković M. et al. Low optical losses in plasmonic TiN thin films implanted with silver and gold //Optical Materials. – 2022. – T. 123. – PP. 111936. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2021.111936>
22. Bolotskaia A. et al. Coatings prepared by electro-spark alloying with SHS electrode materials based on Ti-B-Fe-AlN //Coatings. – 2023. – T. 13. – №. 7. – p. 1264. <https://doi.org/10.3390/coatings13071264>



UDK: 378.147

Erkin BOZOROV,

O'zbekiston Milliy universiteti professori,

O'zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Yadro fizikasi instituti professori, f. – m.f.d.,

E-mail: bakhtiyor@mail.ru;

Baxtiyor POLVONOV,

Farg'ona davlat texnika universiteti professori, PhD

FDU professori, f.-m.f.d. R.Rasulov taqrizlari asosida;

TIBBIYOT UNIVERSITETLARIDA NURLANISHLARINI MODDALAR BILAN O'ZARO TA'SIRI FANINI INNOVATSION TEXNOLOGIYALAR ASOSIDA O'QITISH

Annotatsiya

Maqolada nurlanish qonunlari va ularni amaliyotda qo'llanilishi hamda yadro fizikasi mavzularini o'qitish metodikasini zamonaviy fan va texnologiya yutuqlari bilan boyitilib, IT texnologiyalari dasturlari yordamida takomillashtirilib, mavzularni namoyishli tarzda innovatsion texnologiyalar bilan o'qitilishi talabalar dunyoqarashini zamonga mos holda shakllanishida samarali bo'lishini tajriba sinov natijalari bilan asoslab berilgan.

Kalit so'zlar: Zamonaviy texnologik qurilmalar, massa va energiya, kompyuter texnologiyalari, innovatsion texnologiyalar, elektron dastur, animatsiyali namoyishlar, slaydlar, yadro jarayonlari, reaksiyalar, nurlanish.

ПРЕПОДАВАНИЕ АТОМНОЙ РАДИАЦИИ В ВЫСШЕМ МЕДИЦИНСКОМ ОБРАЗОВАНИИ НА ОСНОВЕ ИННОВАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПОВЫШЕНИЕ АКТИВНОСТИ СТУДЕНТОВ

Аннотация

В статье обоснованы результаты экспериментальной проверки того, что обогащение методики преподавания законов излучения и их практического применения, а также тем ядерной физики современными научно-техническими достижениями, совершенствование их с помощью программ IT-технологий, преподавание тем в наглядной форме с использованием инновационных технологий будет эффективным в формировании мировоззрения учащихся, отвечающего требованиям времени.

Ключевые слова: Современные технологические устройства, масса и энергия, вычислительная техника, инновационные технологии, электронная программа, анимация, слайды, ядерные процессы, реакции, радиация.

TEACHING NUCLEAR RADIATION IN HIGHER MEDICAL EDUCATION BASED ON INNOVATIVE TECHNOLOGIES AND INCREASING STUDENT ACTIVITY

Annotation

The article substantiates the effectiveness of the methods of teaching the laws of radiation and their application in practice, as well as nuclear physics topics, enriched with modern scientific and technological achievements, improved with the help of IT technology programs, and teaching the topics in a demonstrative manner with innovative technologies in shaping students' worldview in line with the times, based on the results of experimental tests.

Key words: Modern technological devices, mass and energy, computer technology, innovative technologies, electronic program, textbook, animation, slides, nuclear processes, reactions, radiation.

Kirish. Tibbiyot sohasining tezkor rivojlanishi va uning zamonaviy ehtiyojlari oliy ta'lim tizimiga yangi talablar qo'yimoqda. Bugungi kunda, tibbiyotda yangi ilmiy yondashuvlar, texnologiyalar va metodologiyalarni joriy etishning muhim ahamiyatga ega bo'lishi, talabalar va mutaxassislarining yuqori malakali va raqobatbardosh bo'lishini ta'minlash uchun zarur. Tibbiyot fanlaridan biri bo'lgan "Nurlanishlarni moddalar bilan o'zaro ta'siri" fani, nazariy bilimlar bilan birga, amaliy ko'nikmalarni ham o'z ichiga olgan, aniq va ilg'or yondashuvlarni talab etadi. Shuning uchun ushbu fanni o'qitishda takomillashgan metodlar va o'qitish modelini yaratish bugungi kunning dolzarb vazifasidir. "Nurlanishlarni moddalar bilan o'zaro ta'siri" fani tibbiyotda keng qo'llaniladi, chunki inson tanasining turli biologik jarayonlari va tibbiy muolajalar nurlanish orqali amalga oshiriladi. Ushbu fanni o'qitish talabalarga radiatsiya, elektromagnit nurlanishlar, ultratovush va boshqa turli xil nurlanishlarni moddalarga ta'sirini tushunishga yordam beradi. Bu jarayonlar tibbiyotning eng ilg'or va zamonaviy usullarini, masalan, diagnostika, radioterapiya, rentgen, kompyuter tomografiyasi kabi texnologiyalarni qo'llashda muhim rol o'ynaydi [1-2]. Shuningdek, bevosita kuzatish tajribalari qurilmalarini yo'qligi va murakkabligi, mavzuni tushunishga oid o'quv materiallari hajmini kengligi xam yadroviy jarayonlarni idrok etishni qiyinlashtiradi. Ayniqsa, AKT yordamida zamon taraqqiyoti bilan bog'liq mavzularni o'qitishga bag'ishlangan ishlar deyarli uchramaydi. Shu ma'noda yadro fizikasi bo'yicha bilimlar sifatini yuqori darajaga ko'tarib, yadroviy jarayonlar haqida zamonaviy tasavvurni shakllantirish zarurati bilan yadro fizikasini o'qitish metodikasini innovatsion axborot texnologiyalari asosida yetarlicha o'rganilmaganligi orasidagi tafovutni bartaraf etish yadro fizikasini o'qitishdagi muammolardan sanaladi.

Asosiy qism. O'quv informatsion texnologiyalari resurslari o'rganilayotgan jarayonlarni modellashtirish va animatsiyali

tasvirlashga, talabalarni fikrlash qobiliyatlarini tasavvurli tarzda rivojlantirishga, o'quv ma'lumotlarini namoyishli ifodalashga, laboratoriya ishlarini komp'yuter eksperimentlari sharoitida o'tkazishga va eng muhimi real vaziyatni monitorda imitatsiyali akslantirib, o'rganishga bo'lgan qiziqishni orttirishga keng imkoniyatlar yaratadi [3]. Bunday imkoniyatlardan foydalanib yadro fizikasini o'qitish metodikasini takomillashtirish uchun dastlab o'quv predmetlari materiallari mazmunini Davlat o'quv standarti bilan zamonaviy fan va texnika yutuqlarini mos kelishini ta'minlashga erishish, yadro fizikasini o'quv mazmunini tanlanishida nazariy bilimlarni asosiy amaliy qo'llanish sohalarini ko'rsatish orqali nazariya va amaliyotni bog'lanishini ta'minlash, fizikaviy ta'limni ekologik tashkil etuvchilarini e'tiborga olish va har bir tushunchalarni fizik mohiyatini idrok etishda, ya'ni fizik hodisa, fizik kattalik, model, g'oya, nazariya, atom yadrosi, massa defekti, bog'lanish energiyasi, radioaktivlik, ionlashtiruvchi nurlar kabi tushunchalarni fundamental qonunlarga mos kelishi va ilmiylikini ta'minlanishi lozim. Bunda yadroning alohida xossalari ifodalaydigan modellardan foydalanib u yoki bu jarayonni tushinishda kerakli modeldan foydalanishni va har bir modelni qo'llanish chegarasi va imkoniyatlarini bevosita komp'yuter dasturlari yordamida namoyishli tarzda ko'rsatilishi yadro xossalari va tuzilishi haqidagi yangilanmay qotib qolgan ma'lumotlarni kengaytirishga va yadroning universal modeli yaratilmagani haqida ma'lumotlarga ega bo'ladi. Aytish kerakki, buncha ma'lumotlarni an'anaviy usulda o'rganish ko'p vaqt talab etsa, AKTdan foydalanish vaqtini tejashdan tashqari obrazli tasavvur bilan mohiyatni idrok etishni yengillashtiradi. Shuningdek, yadro fizikasini muhim savollaridan biri yadro bo'linishi jarayonini energiya manbai sifatida ifodalashdir. Yadroni bo'linish reaksiyalari bilan o'zini o'zi tiklab boradigan bo'linish reaksiyalar jarayonlarini birgalikda matematik modellarni yaratib neytronlarni ortib borish jarayonini va yadro reaksiyalarini rivojlanish yoki so'nish xarakteristiklari variantlarini namoyishi orqali tushunish ham yadro reaksiyalarini boshqarish mohiyatini to'laroq tasavvurini shakllantiradi. Markaziy savollardan yana biri talabalar tasavvurida yadro energetikasini fizik asoslari va radionurlanish xavfi haqida real manzarani shakllantirishdan iborat. Shu o'rinda aytish kerakki, har bir mamlakat o'z tabiiy joylashuviga ko'ra, qanday turdagi energiya manbai yaratish uchun qulay sharoitga egaligini o'rganish orqali o'zining barqaror va yetarlicha energiya ta'minotiga erishishi yo'lida barcha turdagi energiya manba'larini afzal va zaif tomonlarini tahlil qilib, qanday turdagi energiya manba'lari iqtisodiy ijtimoiy rivojlanishda ustivor yo'nalishga egaligini belgilaydi. Shu ma'noda biz adabiyotlarda yoritilgan barcha turdagi energiya manbalarini afzal va zaif tomonlarini tahlil etib, yadro energetikasi xarakteristiklari bilan ularni taqqoslashga imkon beruvchi jadval tavsiya etdik. Ushbu jadval talabalarga yadro energetikasini ijtimoiy hayotdagi o'rni baholashlariga imkon yaratadi [5].

Yadro va boshqa turdagi zangori energiya manba'larini ijtimoiy iqtisodiy hayotdagi muhim xarakteristiklari.

1-jadval.

Nö	Energiya manba'si	Barqaror ta'minot darajasi	Zahira bo'yicha uzoq muddatlilik	Ekologik taathiligi	Quvvati yetariligi	joyi	Egallagan kattaligi	Xavfsizlikni ta'minlanganlik darajasi	Qurilishga xavfsizlik	Mobillik imkoniyati	Foydali ish ko'rsatkichi	Uzoq vaqt ishlay olish darajasi
1	Yadro energetikasi	+	+	∇	+	-	+	+	+	+	+	+
2	Kichik gidrostantsiyalar	∇	+	+	+	-	+	+	+	+	+	+
3	Yirik gidrostantsiyalar	+	+	∇	+	+	+	+	+	+	+	+
4	Quyosh energiyasi	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
5	Shamol energiyasi	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
6	Geotermal issiqlik energiya manba'lar	-	-	+	-	-	+	+	+	-	-	+
7	Bioenergetik qurilmalar	-	-	+	-	-	+	+	+	-	-	-
8	Okeanlar suv satxi oqimi elektrostantsiyalari	-	+	+	-	+	-	+	+	-	-	+
9	Suv to'liqini elektrostantsiyalari	-	+	+	-	+	+	+	+	-	-	+
10	Chiqindilarni qayta ishlashdan olinadigan energiyalar	-	-	+	-	-	+	+	+	-	-	-

Belgilashlar: “+” yuqori; “∇” o'rtachadan yuqori; “-” o'rtacha; “+” o'rtachadan past; “-” past.

1-jadvaldan ko'rinadiki, energiya ta'minoti bo'yicha eng muhim ko'rsatkichlar: barqarorlik, uzoq muddatlilik, yetarli quvvat bilan ta'minlay olish, ekologik xavfsizlik kabilar orasida yadro, gidro, shamol, quyosh energiyalari manba'larini boshqalariga nisbatan afzalligi bor. O'zbekiston sharoitida AESlar nisbatan eng xavfsiz va muxim energetika manba'laridan biri bo'lishini ishonarli tarzda talabalarga ko'rsatib berilishi bugungi yangilangan yadro energetika manba'laridan foydalanish qulay va ishonchli ekanligi haqida zamonaviy tasavvurlarini shakllantirishga katta yordam beradi. Shu bilan birga yadro energetikasi sohasida milliy mutaxassis kadrlarni Rossiyaning yetakchi oliy ta'lim muassasalarida tayyorlanayotgani ham bu ishonchni mustaxkamlaydi. Yuqorida ta'kidlangan, nanotexnologiya yutuqlari yordamida yaratilgan yangi yadroviy energetik qurilmalarni yangi avlodi va fan yutuqlari ilmiy natijalarini etiborga olgan holda o'qitishga samarali yordam beradigan turli xildagi mavjud zamonaviy komp'yuter dasturlari: “TechSmith Camtasia”, “MXSAFlash”, “ActivePresenter”, “EasyQuizzy” va “AutoPlay MediaStudio” kabilardan va biz tomondan ishlab chiqilgan 1-rasmda keltirilgan “Yadro reaksiyalari” [6], “Atom energetikasi” [7], “Zamonaviy atom reaktorlari va ularning ishlash mexanizmlari” kabi elektron darsliklardan foydalanish maqsadga muvofiq bo'ladi. Bunda turli kompyuter dasturlari namoyish taqdimotlaridan unumli foydalanishni tashkil etish, ayniqsa, yadro reaksiyalarini va energetika qurilmalari ishlash mavoyili dinamikasini kuzatishga va ularda kechadigan jarayonlarga aralashish imkonini beruvchi dasturlardan foydalanish mavzuni qiziqib o'zlashtirishga olib keladi.

Bu elektron dasturlar zamonaviy kompyuter imkoniyatlaridan foydalangan holda Delphi, Java, C++, Python dasturlash tillari yordamida yaratildi. Bunda yadro fizikasiga oid termoyadro sintez reaksiyalari animatsiyasi, yadroni bo'linish jarayonlari animatsiyasi, birinchi va zamonaviy atom elektr stantsiyalari - AESlar prezentatsiyasi, ularni xavfsizlik darajasini baholash mezonlari jadvallari, yadro reaktorlari turlari animatsiyasi, yadroning bo'linish reaksiylari prezentatsiyasi va yadroning pronon-neutron modeli kabi namoyishli dasturlar yadro fizikasini o'qitish metodikasiga kiritilib takomillashtirildi va Namangan davlat universitetida o'quv tajriba sinovlari o'tkazildi.

Tajriba natijalari va muhokamalar. Tajriba sinov ishlari tayyorgalik, zlanish, shakllantiruvchi bosqichlarda Toshkent tibbiyot akademiyasi (TTA), Andijon davlat tibbiyot instituti (ADTI), Farg'ona Central Asian Medical University (CAMU) va Samarqand davlat tibbiyot universiteti (SamDTU)larining tanlab olingan talabalari o'rtasida o'tkazildi. Atom yadrosi va elementar

zarralar fizikasini innovatsion texnologiyalardan foydalanib o'qitishga bag'ishlangan mashg'ulotlardan foydalanish holati va dars jarayonlarida innovatsion texnologiyalardan foydalanish metodlarini qo'llanishi bo'yicha mavjud holatni ob'ektiv baholash maqsadida o'tkazilgan tajriba maydonidagi talabalardan jami 393 ta respondent (2-jadvalga qarang) qatnashdi.

Tibbiyot oliy ta'lim muassalarida nurlanishlarni moddalar bilan o'zaro ta'siri fanini o'qitishni innovatsion texnologiyalar asosida takomillashtirish bo'yicha pedagogik tajriba-sinov ishlarining avvalidagi statistik ko'rsatkichlari

2-jadval.

Tajriba va sinov ob'ektlari	Guruhlar	Talabalar soni	O'zlashtirish darajalari			
			A'lo	Yaxshi	O'rta	Past
Toshkent tibbiyot akademiyasi	Tajriba guruhi	51	9	10	14	18
	Nazorat guruhi	53	8	14	21	10
Fergana Central Asian Medical University	Tajriba guruhi	46	5	9	13	19
	Nazorat guruhi	46	5	10	21	10
Andijon davlat tibbiyot instituti	Tajriba guruhi	44	4	10	12	18
	Nazorat guruhi	49	5	11	13	20
Samarqand davlat tibbiyot universiteti	Tajriba guruhi	51	8	14	14	15
	Nazorat guruhi	53	5	13	17	18
Jami:	Tajriba guruhi	192	26	43	53	70
	Nazorat guruhi	201	23	48	72	58

Tajriba guruxlarida jami 192 nafar, nazorat guruxlarida esa 201 nafar talabalar tajriba- sinov ishlarida qatnashdi. Jadvaldagi natijalarni tahlil qilinib, sinov va nazorat guruhlari natijalari taqqoslandi. Jadvaldan ko'rinib turibdiki, tajriba va nazorat guruhlari o'zlashtirish darajalari orasidagi farqlar sezilarli emas. Bu o'z navbatida tadqiqot mavzusini dolzarbligini bildiradi. Tibbiyot oliy ta'lim muassalarida nurlanishlarni moddalar bilan o'zaro ta'siri fanini o'qitish metodikasini innovatsion texnologiyalar asosida takomillashtirish bo'yicha tajriba-sinov ishlari oldindan tuzilgan rejalar asosida olib borildi va tajriba-sinov yakunida statistik ko'rsatkichlar (3- jadvalga qarang) keltirildi:

Tibbiyot oliy ta'lim muassalarida nurlanishlarni moddalar bilan o'zaro ta'siri fanini o'qitishni innovatsion texnologiyalar asosida takomillashtirish bo'yicha pedagogik tajriba-sinov ishlarining so'ngidagi statistik ko'rsatkichlar

3-jadval.

Tajriba va sinov ob'ektlari	Guruhlar	Talabalar soni	O'zlashtirish darajalari			
			A'lo	Yaxshi	O'rta	Past
Toshkent tibbiyot akademiyasi	Tajriba guruhi	51	16	23	7	5
	Nazorat guruhi	53	7	15	22	9
Fergana Central Asian Medical University	Tajriba guruhi	46	15	21	6	4
	Nazorat guruhi	46	5	12	24	5
Andijon davlat tibbiyot instituti	Tajriba guruhi	44	14	23	4	3
	Nazorat guruhi	49	6	13	22	8
Samarqand davlat tibbiyot universiteti	Tajriba guruhi	51	17	21	8	5
	Nazorat guruhi	53	6	16	23	8
Jami:	Tajriba guruhi	192	62	88	25	17
	Nazorat guruhi	201	24	56	91	30

Tibbiyot oliy ta'lim muassalarida nurlanishlarni moddalar bilan o'zaro ta'siri fanini o'qitishni innovatsion texnologiyalar asosida takomillashtirish bo'yicha pedagogik tajriba-sinov ishlarining yakunida statistik ko'rsatkichlar (4-jadvalga qarang) taqqoslandi:

Tibbiyot oliy ta'lim muassalarida nurlanishlarni moddalar bilan o'zaro ta'siri fanini o'qitishni innovatsion texnologiyalar asosida takomillashtirish bo'yicha pedagogik tajriba-sinov ishlarining yakuniy solishtirma jadvali.

4-jadval.

Tajriba guruhi	Tajriba va sinov ob'ektlari	A'lo	Yaxshi	O'rta	Past	Jami
	TTA	16	23	7	5	51
Nazorat guruhi	Tajriba va sinov ob'ektlari	A'lo	Yaxshi	O'rta	Past	Jami
	TTA	7	15	22	9	53
Tajriba guruhi	Tajriba va sinov ob'ektlari	A'lo	Yaxshi	O'rta	Past	Jami
	CAMU	15	21	6	4	46
Nazorat guruhi	Tajriba va sinov ob'ektlari	A'lo	Yaxshi	O'rta	Past	Jami
	ADTI	14	23	4	3	44
Tajriba guruhi	Tajriba va sinov ob'ektlari	A'lo	Yaxshi	O'rta	Past	Jami
	SamDTU	17	21	8	5	51
Nazorat guruhi	Tajriba va sinov ob'ektlari	A'lo	Yaxshi	O'rta	Past	Jami
	SamDTU	6	16	23	8	53
Tajriba guruhi	Tajriba va sinov ob'ektlari	A'lo	Yaxshi	O'rta	Past	Jami
	Jami	62	88	25	17	192
Nazorat guruhi	Tajriba va sinov ob'ektlari	A'lo	Yaxshi	O'rta	Past	Jami
	Jami	24	56	91	30	201

Tajriba-sinov natijalari tahliliga ko'ra, tadqiqot jarayoniga jalb etilgan tajriba guruhidagi talabalarining nazorat guruhi talabalariga nisbatan bilim, ko'nikma va malakalari samarali ekanligi aniqlandi. Bu holatni ob'ektiv baholash uchun statistik tahlil amalga oshiriladi (5-jadvalga qarang), aniqlangan xulosagina tajriba-sinov ishlarining ilmiy, pedagogik, texnologik va metodik jihatdan to'g'ri samarali olib borilganini tasdiqlaydi.

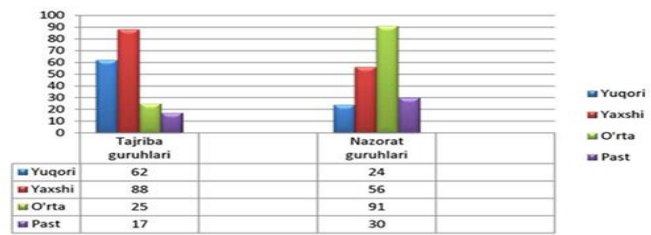
Tibbiyot oliy ta'lim muassalarida nurlanishlarni moddalar bilan o'zaro ta'siri fanini o'qitishni innovatsion texnologiyalar asosida takomillashtirish bo'yicha tajriba-sinov natijalarining yakuniy tahlili (son va foizlarda)

5-jadval

Guruhlar	Talabalar soni	O'zlashtirish natijalari (% da)			
		A'lo	Yaxshi	O'rta	Past
Tajriba guruhlari	192	62/32	88/46	25/13	17/9
Nazorat guruhlari	201	24/12	56/28	91/45	30/15

Ta'kidlovchi tajriba-sinov davrida ham statistik tahlilni amalga oshirish uchun Styudent va Pirson metodlari tanlandi. Mazkur metod ikki guruhda qayd etilgan ko'rsatkichlarni aniqlash va ob'ektiv baholash imkoniga ega. Matematik statistik metodning mohiyatiga ko'ra dastlabki bosqichda tajriba va nazorat guruhlari qayd etilgan statistik ko'rsatkichlarni tanlanmalar sifatida belgilanib, baho ko'rsatkichlari bo'yicha variatsion qatorlarni hosil qilish lozim bo'ldi. Bu diagrammada quyidagi ko'rinishni oldi: Diagrammadan ko'rinib turibdiki, tajriba guruhidagi yuqori va o'rta ko'rsatkichlar nazorat guruhi

ko'rsatkichlaridan yuqori ekan. Yuqoridagi natijalarga asoslangan holda tajriba yakunida statistik ko'rsatkichlarning o'rta qiymati, tanlanma dispersiya, variatsiya ko'rsatkichlari,



1-rasm. Tibbiyot oliy ta'lim muassalarida nurlanishlarni moddalar bilan o'zaro ta'siri fanini o'qitishni innovatsion texnologiyalar asosida takomillashtirish bo'yicha pedagogik tajriba-sinov ishlarining yakuniy diagrammasi

Styudentning tanlanma mezoni, Styudent mezoni asosida erkinlik darajasi, Pirsonning muvofiqlik mezoni va ishonchli chetlanishlari quyidagi jadvalda aks ettirildi (6-jadvalga qarang).

Tibbiyot oliy ta'lim muassalarida nurlanishlarni moddalar bilan o'zaro ta'siri fanini o'qitishni innovatsion texnologiyalar asosida takomillashtirish bo'yicha tajriba-sinov natijalarining statistik ko'rsatkichlari

6-jadval.

$\bar{X}$	$\bar{Y}$	S_x^2	S_y^2	C_x	C_y	$T_{x,y}$	K	$X_{n,m}^2$	Δ_x	Δ_y
4,01	3,37	0,8099	0,7731	1,60	1,84	7,11	391	64,88	0,13	0,12

Yuqoridagi natijalarga asosanib tajriba-sinov ishlarining sifat ko'rsatkichlari

$$K_{\text{seg}} = \frac{(\bar{X} - \Delta_x)}{(\bar{Y} + \Delta_y)} = \frac{4,01 - 0,13}{3,37 + 0,12} = \frac{3,88}{3,49} \approx 1,11 > 1;$$

Bilish darajasini ko'rsatkichi esa:

$$K_{\text{seg}} = (\bar{X} - \Delta_x) - (\bar{Y} - \Delta_y) = (4,01 - 0,13) - (3,37 - 0,12) = 3,88 - 3,25 = 0,63 > 0;$$

Olingan natijalardan o'qitish samaradorligini baholash mezonini birdan kattaligi bilan va bilish darajasini esa baholash mezonini noldan kattaligi bilan ko'rish mumkin. Bundan ma'lumki, tibbiyot oliy ta'limida atom nurlanishlarini innovatsion texnologiyalar asosida o'qitish va talabalar faolligini oshirish bo'yicha tajriba guruhlaridagi o'zlashtirish nazorat guruhlaridagi o'zlashtirishdan yuqori ekan.

Xulosa. Yuqoridagi statistik tahlillar asosida tajriba-sinov ishlari samarador ekanligini va nurlanishlarni moddalar bilan ta'siri fanini o'qitishda IT texnologiyalarini tatbiq etish orqali talabalar faolligini oshirishda yuqori samaradorlikka erishish mumkinligini aytishimiz mumkin.

ADABIYOTLAR

1. O'zbekiston Respublikasi Prezidentining farmoni. O'zbekiston Respublikasi oliy ta'lim tizimini 2030 yilgacha rivojlantirish kontsepsiyasini tasdiqlash to'g'risida. PF-5847-son. 2019 yil 8 oktyabr. Qonunchilik ma'lumotlari milliy bazasi, 18.03.2022 y., 06/22/89/0227- son.
2. Е.С.Полат, М.Ю.Бухаркина, М.В. Моисеева: А.Е. Петров; Новые педагогические и информационные технологии в системе образования: Учебное пособие /—М.: Издательский центр «Академиа», 2018, с.269.
3. Полвонов Б.З. Курс физики, учебник. Фергана -2022 (стр.638).
4. Mamatkarimov O.O., Qo'chqarov X.O., Yusupov D.A. Atom yadrosi va elementar zarralar fizikasi. O'quv qo'llanma. Namangan nashryoti. 2022. 256 b.
5. Umarov S.X, Bozorov Э.Х, Jabborova O.I. Tibbiy texnika va yangi tibbiy texnologiyalar. – Toshkent. Iqtisod-Moliya, 2019. –216 b.
6. Hakimova M.F. Pedagogik texnologiyalar. O'quv qullanma. –Toshkent. – TDIU. – 2013. –119 b.
7. Юлдашев Б.С., Артемов С.В., Бозоров Э.Х. ва бошқалар. Ядерные технологии V том Ядерная медицина. –Toshkent, 2022. – 650 с.



UDK: 621.383.51:548.5+620.187+66.095.26

Zavkiddin JULLIEV,
UzAS, Institute of Polymer Chemistry and Physics, Phd student
Ahmad OBLAKULOV,
UzAS, Institute of Polymer Chemistry and Physics, senior researcher
Doston TOSHMAMATOV,
UzAS, Institute of Polymer Chemistry and Physics, Phd student
Rahimbergan RAKHIMOV,
UzAS, Institute of Polymer Chemistry and Physics, senior researcher
Nigmat ASHUROV,
UzAS, Institute of Polymer Chemistry and Physics, Prof

Based on PhD, D.D Nematov's review. S.U.Umarov Physical-Technical Institute of the National Academy of Sciences of Tajikistan.

ANTI-SOLVENT AND GAS-QUENCHING METHODS FOR CONTROL CRYSTALLISATION OF ACTIVE LAYER IN PEROVSKITE SOLAR CELLS

Annotation

Perovskite solar cells (PSCs) have emerged as a promising photovoltaic technology due to their high power conversion efficiencies and low-cost fabrication. The crystallisation of the perovskite active layer plays a crucial role in determining the device's efficiency and stability. This paper comprehensively examines two widely adopted techniques for controlling perovskite crystallisation: anti-solvent treatment and gas-quenching by checking optic properties. A crucial factor in PSC fabrication is the deposition of the perovskite absorber layer, as its quality directly influences device performance. Traditionally, antisolvent quenching has been the primary method for inducing crystallization in perovskite films. However, gas quenching-an alternative approach that utilizes pressurized gases (typically N₂) to supersaturate the perovskite precursor solution has demonstrated substantial advantages. We explore the advantages in gas quenching for high-quality perovskite film formation, offering a comparative analysis with antisolvent quenching.

Key words: Anti-solvent, gas-quenching, perovskite solar cell.

МЕТОДЫ ОХЛАЖДЕНИЯ АНТИРАСТВОРИТЕЛЕМ И ГАЗОМ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИЕЙ АКТИВНОГО СЛОЯ В ПЕРОВСКИТНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ

Аннотация

Перовскитные солнечные элементы (PSC) стали перспективной фотоэлектрической технологией благодаря высокой эффективности преобразования энергии и низкой стоимости изготовления. Кристаллизация активного слоя перовскита играет решающую роль в определении эффективности и стабильности устройства. В этой статье всесторонне рассматриваются два широко распространенных метода контроля кристаллизации перовскита: обработка антирастворителем и газовое гашение путем проверки оптических свойств. Решающим фактором в изготовлении PSC является нанесение слоя перовскитного поглотителя, поскольку его качество напрямую влияет на производительность устройства. Традиционно, гашение антирастворителем было основным методом для индукции кристаллизации в перовскитных пленках. Однако газовое гашение-альтернативный подход, который использует сжатые газы (обычно N₂) для пересыщения раствора-предшественника перовскита продемонстрировало существенные преимущества. Мы изучаем преимущества газового гашения для формирования высококачественной пленки перовскита, предлагая сравнительный анализ с гашением антирастворителем.

Ключевые слова: антирастворитель, газовое - гашение, перовскитный солнечный элемент.

PEROVSKIT QUYOSH ELEMENTLARIDAGI AKTIVE QATLAMNING KRISTALLANISHINI NAZORAT QILISH UCHUN ANTISOLVENT VA GAZ BILAN SOVUTISH USULLARI

Annotatsiya

Perovskit quyosh elementlari (PSCs) o'zlarining yuqori quvvat aylanish samaradorligi (PCE) va arzon ishlab chiqarish imkoniyati sababli so'nggi yillarda eng istiqbolli fotovoltaiik texnologiyalardan biri sifatida tanilgan. Qurilma samaradorligi va barqarorligi asosan perovskitning faol qatlamining kristallanish sifatiga bog'liq. Ushbu maqolada perovskit kristallanish jarayonini boshqarish uchun keng qo'llaniladigan ikkita asosiy texnika: anti-solvent usuli va gaz bilan sovutish (gas-quenching) metodlari optik xossalari asosida batafsil tahlil qilinadi.

Kalit so'zlar: erituvchiga-qarshi, gazli-so'ndirish, perovskit quyosh elementi.

Introduction. Perovskite solar cells (PSCs) have emerged as a transformative photovoltaic technology, achieving remarkable advancements in power conversion efficiency (PCE), scalability, and economic viability. Over the past decade, lab-scale PSC efficiencies have soared from approximately 3.8% to over 26.7% [1]. This remarkable progress stems from the

exceptional optoelectronic properties of perovskite materials, including high absorption coefficients, long carrier diffusion lengths, and tunable bandgaps, combined with cost-effective fabrication techniques [2-7]. However, achieving both high efficiency and long-term stability in PSCs critically depends on the formation of high-quality perovskite films with precise control over crystallization and morphology. Persistent challenges such as phase segregation and light-induced degradation remain key concerns [8]. Moreover, the advancement of scalable, large-area fabrication methods is crucial for the successful commercialization of PSC technology. A major challenge in perovskite film fabrication lies in achieving precise control over crystallization during deposition. Most PSC research has relied on spin coating and anti-solvent treatment techniques, which have been widely applied to traditional lead-based perovskites as well as lead-tin mixed and tin-based, lead-free compositions [9-17]. However, the manual nature of these methods introduces variability due to factors such as deposition height, angle, and speed, compromising reproducibility. Additionally, scaling these techniques for large-area, environmentally sustainable production remains difficult and often impractical [15, 16, 18, 19]. To address these limitations, researchers are actively exploring alternative strategies to enhance control over perovskite film formation and improve scalability. Among these emerging techniques, gas quenching has demonstrated significant potential for optimizing perovskite crystallization and morphology, offering a more reliable and scalable solution for the fabrication of high-quality films. Gas quenching, initially introduced during spin coating [20], employs an inert gas (such as nitrogen or argon) during the wet film deposition stage to rapidly remove residual solvents, facilitating controlled crystallization of the perovskite layer. As a result, gas quenching produces smooth, pinhole-free films with large grain sizes and enhanced crystallinity while minimizing solvent consumption. Gas quenching, initially implemented during spin coating [20], employs an inert gas (such as nitrogen or argon) during the wet film deposition stage to accelerate solvent removal, thereby facilitating controlled crystallization of the perovskite layer. While highly promising, gas quenching in PSC research remains in its early stages, with many aspects still requiring thorough investigation. Key areas of ongoing research include optimizing quenching conditions, elucidating the relationship between gas dynamics and film formation, and assessing its impact on different perovskite compositions and device architectures. In this study, we precisely engineered the perovskite active layers using gas quenching (GQ) and anti-solvent (AS) techniques, aiming to evaluate their impact on film quality. Comprehensive characterization was conducted using X-ray diffraction (XRD), UV-Vis spectroscopy, SEM imaging, photoluminescence (PL), and time-resolved PL (TRPL) to assess structural, optical, and morphological properties.

Research Methodology. Precursor and Device Preparation. In this structure, ITO (Indium Tin Oxide) glass was cleaned by an ultrasonic with Distilled water, acetone, Toluol and IPA (Isopropyl alcohol) and drayed Nitrogen gas. Simple is glass/indium tin oxide (ITO)/PTAA/MAPbI₃. All device preparation steps were performed in a nitrogen-filled glovebox. PTAA solution (Sigma-Aldrich, 5 mg mL⁻¹ in toluene) was spin-coated dynamically at 6000 rpm for 30 s and afterward annealed at 120 °C for 30 min. As substrate, a 15 × 20 mm ITO-coated glass is used. For MAPbI₃ perovskite, a 1 M solution of PbI₂ and MAI with 5% excessive PbI₂ (for passivation) was prepared with a solvent mixed by NMP/DMF with 3/7 volume ratios. The solutions were spincoated at 3000 (2000) rpm for 120 s with an acceleration speed of 300 rpm s⁻¹ (for anti-solvent, 5000 rpm for 30 s, Xlorbenzole dropping time -9s, 14s, 20 s). After various delay times, a continuous nitrogen gas flow with a pressure of 5,5 bars (filtered with 0,6 µm PTFE filter) was aimed (incident angle-90°) at the substrate with a distance of approximately 10 cm to form the intermediate. Afterward, substrates were immediately transferred to a hotplate and annealed at 100°C for 10 min.

Analysis and results. From Fig-1, Scanning electron microscopy (SEM) analysis revealed that the gas quenching method produced perovskite grains of significantly larger size compared to those formed via the anti-solvent approach. This observation underscores fundamental differences in crystallization kinetics, thin-film morphology, and defect formation between the two methods. Below, we synthesize the implications of these findings, discuss their broader impact on perovskite photovoltaic technology, and outline future research directions to optimize these fabrication techniques.

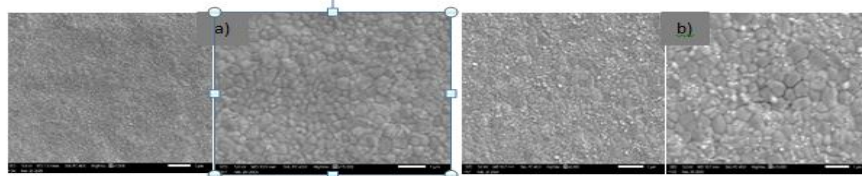


Figure-1: SEM of ITO glass/PTAA/ MAPbI₃, a) AS-20s b) GQ-2000rpm (120s)
Gas quenching (GQ) and Anti-solvent (AS).

While this study compared the gas quenching (GQ) and anti-solvent (AS) methods, the XRD results showed that the perovskite films formed via gas quenching exhibited significantly higher diffraction intensity at the characteristic 2θ angle of ~14.01°, corresponding to the (110) crystallographic plane of the tetragonal MAPbI₃ phase, compared to those produced by the anti-solvent method. This finding underscores the critical role of crystallization kinetics in determining perovskite film quality and provides insights into the mechanistic advantages of gas quenching (Fig-2).

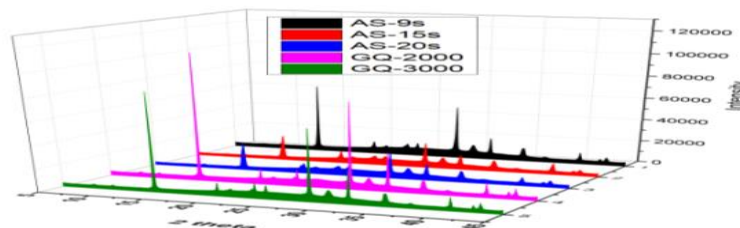


Figure-2: Xray of ITO glass/PTAA/MAPbI₃. Gas quenching (GQ) and Anti-solvent (AS).

With a focus on UV-vis spectroscopy analysis (Fig-3). The experimental results revealed that perovskite films fabricated via gas quenching (GQ) exhibit significantly enhanced light absorption across the UV-visible spectral range when compared to films processed using the anti-solvent (AS) method. Notably, at a wavelength of 550 nm, the absorption coefficient for GQ films exceeds 1.5, indicating a more efficient light-harvesting capability. In contrast, the AS-processed films display a comparatively lower absorption coefficient, falling below 1.5 at the same wavelength. This suggests that gas quenching promotes improved film morphology and optical properties, likely due to more uniform crystal formation and reduced defect densities, making GQ a promising technique for optimizing the performance of perovskite-based optoelectronic devices.

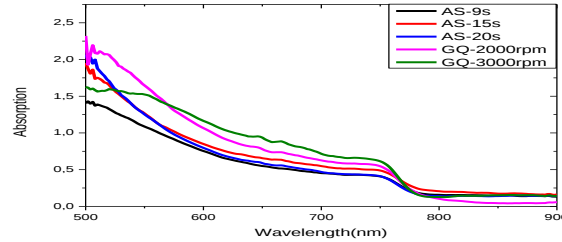


Figure-3: Absorption of ITO glass/PTAA/perovskite. Gas quenching (GQ) and Anti-solvent (AS).

In Fig-4 the PL measurements shown that the perovskite films formed by gas quenching exhibited significantly lower PL intensity at the corresponding emission wavelength compared to those prepared via the anti-solvent method. This observed reduction in steady-state PL intensity for the gas quenched (GQ) perovskite films carries important implications regarding the material's optoelectronic properties and potential device performance. In the context of photovoltaic applications, a lower PL intensity generally suggests a more efficient charge extraction process or reduced non-radiative recombination losses. It implies that photo-generated carriers (electrons and holes) are more effectively separated and collected, rather than recombining radiatively within the perovskite layer. The gas quenching method, which involves the rapid removal of solvent during the perovskite film formation by an inert gas flow, appears to facilitate the formation of films with improved crystallinity, fewer defect states, and enhanced interfacial contact with the underlying PTAA layer. These factors contribute to a reduced probability of radiative recombination events, hence the observed lower PL signal. On the other hand, the higher PL intensity observed in the anti-solvent (AS) processed films indicates that a significant fraction of the photo-generated carriers recombine radiatively without being extracted. This could be due to the presence of a higher density of defects, grain boundaries, and/or sub-optimal contact between the perovskite and the underlying transport layers, all of which can trap charge carriers and promote radiative recombination.

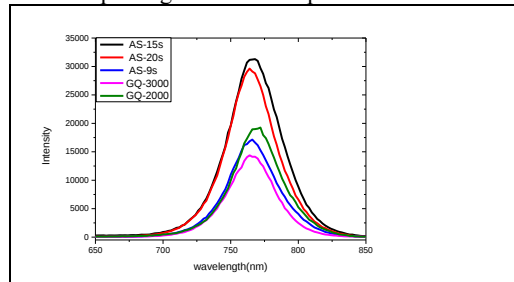


Figure-4: Steady-state photoluminescence (PL) of ITO glass/PTAA/MAPbI3. Gas quenching (GQ) and Anti-solvent (AS).

TRPL data was obtained (Fig-5). This data was fitted and the values of τ_1 , τ_2 were gained. In this model, the faster decay component τ_1 is attributed to charge carrier trapping involving defects, and slower decay components τ_2 is assigned to the bimolecular radiative recombination in the bulk of the perovskite layer.

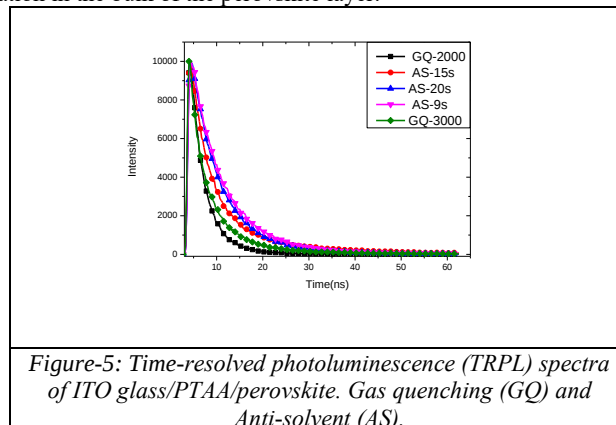


Figure-5: Time-resolved photoluminescence (TRPL) spectra of ITO glass/PTAA/perovskite. Gas quenching (GQ) and Anti-solvent (AS).

The obtained fitted parameters according to the model used are presented in Table 1. The fast decay component for GQ (3000, 2000 rpm) and AS (9s, 15s, 20s) is τ_1 (12.91, 5.81 and 4.93, 4.59, 5.645 ns, respectively) as compared to the bare perovskite

film (16.6 ns), which indicates the reduced defect density in the perovskite layers. The slower decay component τ_2 was also significantly enhanced from 10.95, 19.29, 11.69 ns for AS (9s, 15s, 20s) to 46.14, 42.45 ns for GQ(3000, 2000 rpm), suggesting that optimized active layer by gas quenching method reduced recombination losses in the perovskite bulk, which could be attributed to the enhanced film morphology and increased grain sizes.

Table-1

	τ_1 [ns]	τ_2 [ns]
AS-15s	4.594	19.29
AS-20s	5.645	11.69
AS-9s	4.93	10.95
GQ-3000	12.91	46.14
GQ-2000	5.81	42.45

Recommendations. This study showed that gas quenching promotes improved film morphology and enhanced optical properties, likely due to more uniform crystal formation, larger grain sizes, and reduced defect densities within the perovskite layer. Such improvements contribute to more efficient photon absorption and charge carrier transport, which are critical parameters for the overall performance of optoelectronic devices. The higher absorption coefficient observed in gas-quenched films at 550 nm further underscores their superior light-harvesting capability, which can directly translate into enhanced power conversion efficiencies in photovoltaic applications. Therefore, gas quenching stands out as a scalable and effective approach for fabricating high-quality perovskite films, paving the way for the development of next-generation, high-performance solar cells, photodetectors, and other optoelectronic devices.

REFERENCES

1. NREL, Best Research-Cell Efficiencies. Available online: <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html> (accessed on January 2025).
2. Chiang, C.H.; Wu, C.G. Bulk heterojunction perovskite-PCBM solar cells with high fill factor. *Nat. Photonics* 2016, 10, 196–200.
3. Ergen, O.; Gilbert, S.M.; Pham, T.; et al. Graded bandgap perovskite solar cells. *Nat. Mater.* 2017, 16, 522–525.
4. Ouedraogo, N.A.N.; Chen, Y.; Xiao, Y.Y.; et al. Stability of all-inorganic perovskite solar cells. *Nano Energy* 2020, 67, 104249.
5. Qin, K.; Dong, B.; Wang, S. Improving the stability of metal halide perovskite solar cells from material to structure. *J. Energy Chem.* 2019, 33, 90–99.
6. Wang, K.; Zheng, L.; Zhu, T.; et al. Efficient perovskite solar cells by hybrid perovskites incorporated with heterovalent neodymium cations. *Nano Energy* 2019, 61, 352–360.
7. Zhang, W.; Eperon, G.E.; Snaith, H.J. Metal halide perovskites for energy applications. *Nature Energy* 2016, 1, 1–8.
8. Azhar, M.; Mubeen, M.; Mukhtar, M.; et al. Damping the phase segregation in mixed halide perovskites: Influence of X-site anion. *Mater. Chem. Phys.* 2022, 287, 126335.
9. Tavakoli, M.M.; Yadav, P.; Prochowicz, D.; et al. Controllable perovskite crystallization via antisolvent technique using chloride additives for highly efficient planar perovskite solar cells. *Adv. Energy Mater.* 2019, 9, 1803587.
10. Zhang, W.; Zhang, T.; Qin, L.; et al. Anti-solvent engineering to rapid purify PbI₂ for efficient perovskite solar cells. *Chem. Eng. J.* 2024, 479, 147838.
11. Zhao, P.; Kim, B.J.; Ren, X.; et al. Antisolvent with an ultrawide processing window for the one-step fabrication of efficient and large-area perovskite solar cells. *Adv. Mater.* 2018, 30, 1802763.
12. Jin, S.; Wei, Y.; Huang, F.; et al. Enhancing the perovskite solar cell performance by the treatment with mixed anti-solvent. *J. Power Sources* 2018, 404, 64–72.
13. Subhani, W.S.; Wang, K.; et al. Anti-solvent engineering for efficient semitransparent CH₃NH₃PbBr₃ perovskite solar cells for greenhouse applications. *J. Energy Chem.* 2019, 34, 12–19.
14. Taylor, A.D.; Sun, Q.; Goetz, K.P.; et al. A general approach to high-efficiency perovskite solar cells by any antisolvent. *Nat. Commun.* 2021, 12, 1878.
15. Paek, S.; Schouwink, P.; Athanasopoulou, E.N.; et al. From nano-to micrometer scale: The role of antisolvent treatment on high performance perovskite solar cells. *Chem. Mater.* 2017, 29, 3490–3498.
16. Ghosh, S.; Mishra, S.; Singh, T. Antisolvents in perovskite solar cells: Importance, issues, and alternatives. *Adv. Mater. Interfaces* 2020, 7, 2000950.
17. Cuzzupe, D.T.; Oz, S.D.; Ling, J.; et al. Understanding the Methylammonium Chloride-Assisted Crystallization for Improved Performance of Lead-Free Tin Perovskite Solar Cells. *Solar RRL* 2023, 7, 2300770.
18. Kaczaral, S.C.; Morales, D.A.; Schreiber, S.W.; et al. Improved reproducibility of metal halide perovskite solar cells via automated gas quenching. *APL Energy* 2023, 1, 036112.
19. Gou, Y.; Tang, S.; Yun, C.; et al. Research progress of green antisolvent for perovskite solar cells. *Mater. Horiz.* 2024, 11, 3465–3481.
20. Huang, F.; Dkhissi, Y.; Huang, W.; et al. Gas-assisted preparation of lead iodide perovskite films consisting of a monolayer of single crystalline grains for high efficiency planar solar cells. *Nano Energy* 2014, 10, 10–18.



UDK: 535.012

Abduvakhid JUMABAEV,
DSc, professor of SamSU
E-mail: jumabaev2@rambler.ru
Bekzod KHUDAYKULOV,
PhD, Associate Professor of SamSU
Utkirjon HOLIKULOV,
PhD, Associate Professor of SamSU
Asliddin NORKULOV,
PhD student of SamSU
Solikhboy MAKHAMMADIEV,
Master student of SamSU
Shakhboz BOZOROV,
Master student of SamSU

Based on the review by Eshonkulov G', the Dean of the Faculty of Physics, NUUz

STUDY OF INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN ANILINE-CHLOROFORM SOLUTIONS

Annotation

In this work, when analyzing the vibrational bands of aniline in chloroform solutions using experiment (Raman spectroscopy) and calculations, a partial red shift was observed in the N-H stretching vibration band and a blue shift in the remaining bands. AIM, NCI and RDG analyses were performed to determine non-covalent interactions in molecular systems, and accordingly, it was confirmed that a partial red shift was formed due to the presence of weak H-bonds through the N-H group in aniline-chloroform complexes. It was determined that mainly Van der Waals bonds were formed through the C-H group, and therefore blue shifts were observed. Also, molecular electrostatic potentials surface (MEPS) and frontier molecular orbitals (FMO) analyses were performed for the complexes to characterize chemical bonds in molecular systems and determine the zones where electrons are located.

Key words: aniline, Raman, H-bonding, DFT calculation, topological analyses.

ИЗУЧЕНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В РАСТВОРАХ АНИЛИН-ХЛОРОФОРМ

Аннотация

В данной работе при анализе колебательных полос анилина в растворах хлороформа с использованием эксперимента (рамановская спектроскопия) и расчетов наблюдалось частичное красное смещение в полосе валентных колебаний N-H и синее смещение в остальных полосах. Были проведены анализы AIM, NCI и RDG для определения нековалентных взаимодействий в молекулярных системах, и соответственно было подтверждено, что частичное красное смещение образовалось из-за наличия слабых водородных связей через группу N-H в комплексах анилин-хлороформ. Было определено, что в основном связи Ван-дер-Ваальса образовались через группу C-H, и поэтому наблюдались синие смещение. Также были проведены анализы поверхности молекулярных электростатических потенциалов (MEPS), анализ граничных молекулярных орбиталей (FMO) для комплексов для характеристики химических связей в молекулярных системах и определения зон, где находятся электроны.

Ключевые слова: анилин, Раман, водородные связи, расчет DFT, топологический анализ.

ANILIN-XLOROFORM ERITMALARIDA MOLEKULARARO TA'SIRLARNI O'RGANISH

Annotatsiya

Ushbu ishda tajriba (Raman spektroskopiyasi) va hisoblashlar yordamida anilinning chloroform eritmalaridagi tebranish polosalarini tahlil qilganda N-H valent tebranish polosasida qisman qizil va qolgan polosalarida ko'k siljish kuzatildi. Molekulyar sistemalaridagi nokovalent o'zaro ta'sirlarni, aniqlash uchun AIM, NCI va RDG analizlari o'tkazildi, shunga ko'ra anilin-chloroform komplekslarida N-H guruhi orqali kuchsiz H-bog'lanishlar mavjudligi tufayli qisman qizil siljish hosil bo'lishi tasdiqlandi. C-H guruhi orqali esa asosan Van der Waals bog'lanishlar hosil bo'lishi va shu tufayli ko'k siljishlar kuzatilishi aniqlandi. Shuningdek keltirilgan komplekslar uchun molecular electrostatic potentials surface (MEPS), chegara molekulyar orbitalari (FMO) analizlari o'tkazildi.

Kalit so'zlar: anilin, Raman, H-bog'lanish, DFT hisoblash, topologik analizlar.

Introduction. The study of intermolecular interactions and their effect on solutions is of practical importance [1-3]. In addition to hydrogen bonding, it is also important to study weak van der Waals, NH- π , OH- π , CH- π and cation- π interactions [4]. Hydrogen bonding through NH vibrations is important in chemistry, biology and materials science. Aniline is a simple amine representative of aromatic ring substances and is a good module for studying hydrogen bonding using NH vibrations and spectroscopic methods [5-6]. Also, this substance is of interest to many researchers because it is one of the substances widely used in materials science, industry and production. The structure of aniline has been studied using three different semi-empirical, ab-

initio and DFT methods [7]. In [8-10], the eigen vibrational frequencies of aniline have been studied using NIR-FT Raman spectra. Among other non-covalent bonds, there is also a sticking bond, which is said to be important in the formation of aggregations in aromatic substances.

In this work, the vibrations of aniline in chloroform solution were analyzed using Raman spectroscopy. Using calculations, interactions in aniline-chloroform complexes, molecular electrostatic potential surface (MEPS) surface, frontier molecular orbital (FMO) analysis, atoms in molecules (AIM), quantum chemical parameters such as reduced density gradient (RDG) and non-covalent interaction (NCI) analysis were performed.

Methods. Raman spectra of aniline and its chloroform solutions were recorded at room temperature on a Renishaw Invia Raman spectrometer with a diffraction grating with a period of 1200 lines/mm. A laser with a wavelength of 532 nm and a power of 50 mW was used as the excitation light source. A standard Renishaw CCD Camera detector was used to record the scattered light. Quantum-chemical calculations were performed using the density functional theory (DFT) method in the Gaussian 09W program [11]. B3LYP/6-311++G(d,p) was used for the partial complement. The geometric structure of the molecule was described by MEPS and VMD tools [12]. The topological parameters of AIM and RDG were calculated by the Multiwfn 3.8 bin (Win 64) program [13].

Results and Discussion

Vibrational analysis

Figure 1 shows the Raman spectra of pure aniline and its chloroform solution. The solutions are given in mole fraction (m. f.). The maximum of the N-H vibration band involved in hydrogen bonding corresponds to 3359 cm^{-1} , and at 0.9 m. f. this maximum (3357 cm^{-1}) shifted by 2 cm^{-1} . However, when the concentration was reduced to 0.7 m. f. and experiments were conducted, a blue-shift to a higher frequency occurred at 3364 cm^{-1} . This indicates that this aniline is bound to chloroform through N-H through weak H-bonding or van der Waals interaction. In the C-H and CC+NHN vibration bands, a blue-shift to a higher frequency occurred by 2 cm^{-1} with a decrease in the concentration of aniline.

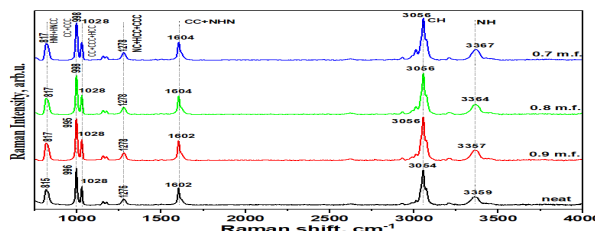


Figure 1. Raman spectra of aniline-chloroform complexes (m.f.=mole fraction).

Similarly, the maximum of the NC+HCC+CCC vibration system corresponds to pure aniline at 1276 cm^{-1} and a blue shift of up to 2 cm^{-1} (1278 cm^{-1}) was observed at a concentration of 0.7 m. f. As the concentration decreased, the CC+CCC+HCC (1028 cm^{-1}) bands did not change, and the CC+CCC (996 cm^{-1}) and HNH+HNCC (817 cm^{-1}) bands showed a blue shift of 2 cm^{-1} . This suggests that the aniline-chloroform interaction is weak or due to van der Waals interactions, with blue shift or no shift at all. Quantum-chemical calculations were performed to confirm these results.

Molecular electrostatic potential surface (MEPS) analysis

Molecular electrostatic potential surface analysis plays an important role in visualizing charge distribution and studying charge-dependent parameters, electrophilic, nucleophilic reactions, and noncovalent interactions. Electrostatic potential is also used to identify reactive parts of a molecule. According to the MEPS color code for aniline (PhNH_2)+chloroform (TCM)_n ($n=1-4$) shown in Figure 2, the electrostatic potential increases from red to violet [14]. According to the figure, the MEPS electrostatic potentials for PhNH_2+TCM , $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_2$, $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_3$ and $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_4$ are given in the range of $-4.900\text{e}^{-2}\sim 4.900\text{e}^{-2}\text{ eV}$, $-4.952\text{e}^{-2}\sim 4.952\text{e}^{-2}\text{ eV}$, $-4.735\text{e}^{-2}\sim 4.735\text{e}^{-2}\text{ eV}$ and $-4.942\text{e}^{-2}\sim 4.942\text{e}^{-2}\text{ eV}$, respectively. It can be seen from the figure that the energy value decreases as the number of TCM molecules increases, and it increases again in $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_4$. This is because in complexes with up to three TCMs, the TCM molecules are only bonded through N-H, while in complexes with four TCMs, the TCM molecules are close to the ring on both sides. Also, according to the figure, no red and yellow areas were observed, and all were green and blue areas, which mean that all the complexes are bound to each other by weak or van der Waals interactions.

PhNH₂+TCM -4.900e^{-2} 4.900e^{-2}	PhNH₂+(TCM)₂ -4.952e^{-2} 4.952e^{-2}
PhNH₂+(TCM)₃ -4.735e^{-2} 4.735e^{-2}	PhNH₂+(TCM)₄ -4.942e^{-2} 4.942e^{-2}

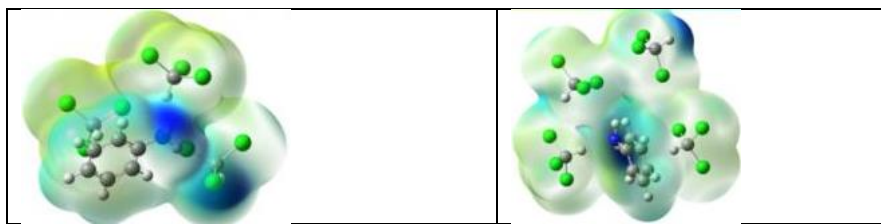


Figure 2. MEP diagram of $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_m$ ($m=1-4$) complexes

Frontier molecular orbital (FMO) analysis

The electronic properties and reactivity of molecules can be explained by examining the highest occupied molecular orbital (HOMO) and the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO). The HOMO is important for electron-donating or nucleophilic reactions, and a molecule with a high energy HOMO is a good electron donor and can easily participate in oxidation or nucleophilic reactions. The LUMO represents the next orbital that electrons can occupy, which is an electron-occupied or empty molecular orbital. Molecules with a low LUMO energy are generally good electron acceptors and can participate in electrophilic reactions [15]. The energy difference between HOMO-LUMO is an important characteristic of molecular reactivity. A smaller HOMO-LUMO energy difference (ΔE) means that the molecule is easily excited and more reactive. Figure 3 shows the HOMO-LUMO visualization and the bond energy (ΔE). Table 1 lists the parameters determined by the dipole moment, ΔE , in $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_n$ ($n=1-4$) complexes. According to Table 1, the dipole moment of $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_3$ is larger than the others. As the TCM number increases, ΔE also increases, reaching the maximum value for $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_2$ and then decreasing. The global hardness is 2.488555 eV (PhNH_2+TCM), 2.500935 eV ($\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_2$), 2.250735 eV ($\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_3$) and 2.397805 eV ($\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_4$), and is the largest for $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_2$. The ionization potential and electrophilicity are the largest for the $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_2$ complex in the same order.

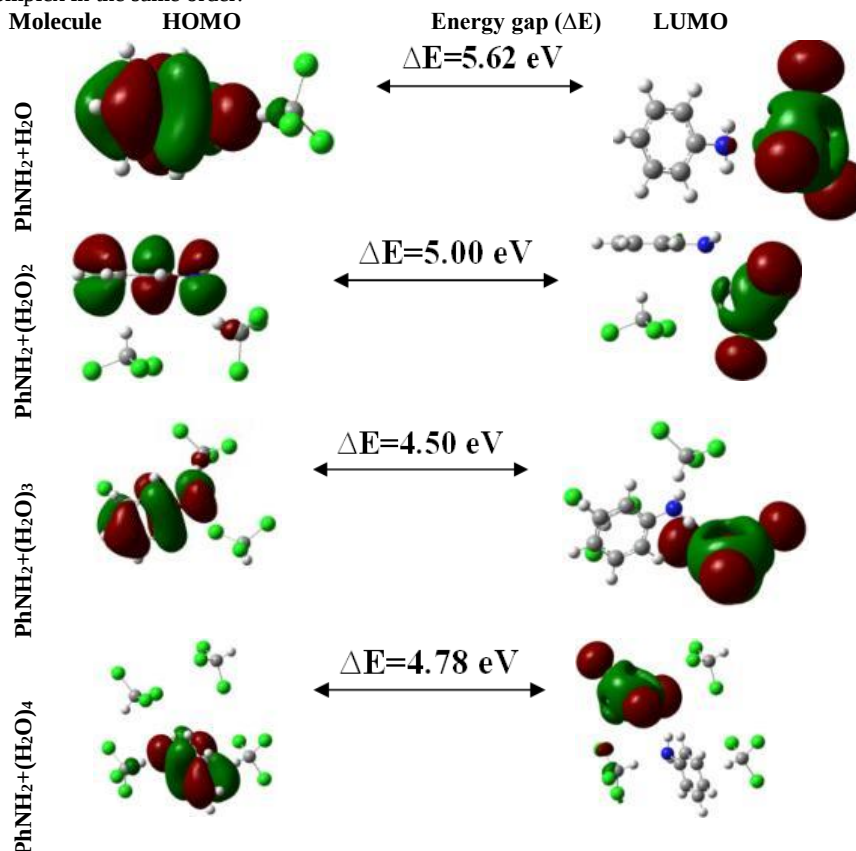


Figure.3. FMO diagrams of $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_n$ ($n=1-4$) complexes

Table 1. Thermodynamical and chemical parameters of title complexes.

Parameters	PhNH_2+TCM	$\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_2$	$\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_3$	$\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_4$
Dipole moment (Debye)	2.805420	3.459178	3.823264	1.201417
E_{HOMO} (eV)	-6.24458	-6.40458	-6.31207	-6.45138
E_{LUMO} (eV)	-1.26747	-1.40271	-1.8106	-1.65577
$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$	4.97711	5.00187	4.50147	4.79561
Global hardness $\eta = \Delta E / 2$	2.488555	2.500935	2.250735	2.397805
Chemical potential $\mu = (E_{\text{LUMO}} + E_{\text{HOMO}}) / 2$	-3.75603	-3.90365	-4.06134	-4.05358
Global electrophilic index $\omega = \mu^2 / 2\eta$	2.834521	3.046549	3.664235	3.426357
$IE = -E_{\text{HOMO}}$	6.24458	6.40458	6.31207	6.45138
$EA = -E_{\text{LUMO}}$	1.26747	1.40271	1.8106	1.65577

Atoms in molecules (AIM) analysis

AIM is used to determine non-covalent interactions in molecular systems, in particular intra- and intermolecular hydrogen bonds. The formation of critical points (CPs) in the electron density due to the bond path between two interacting atoms means that

the gradient of its electron density disappears at these points [16]. Figure 4 shows the electron density $\rho(r)$, the electron density Laplacian $\nabla^2\rho(r)$, the energy density $H(r)$, and the Lagrangian kinetic energy density $G(r)$ and potential energy density $V(r)$ for $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_n$ ($n=1-4$) complexes in BCPs (Table 2).

Table 2. Topological parameters of $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_n$ ($n=1-4$) complexes

Complex	H-bonds	Bond length $r, \text{\AA}$	Density of all electrons $\rho(r)$	Lagrangian kinetic energy $G(r)$	Potential energy density $V(r)$	Energy density $H(r)$	Laplacian of electron density $\nabla^2\rho(r)$	Hydrogen bond energy E_{HB} , kcal/mol
PhNH_2+TCM	2(H)...17(N)	2.2508	0.01772	0.01086	-0.00944	0.00141	0.04907	5.92
$\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_2$	2(H)...22(N)	2.3966	0.01363	0.00823	-0.00700	0.00123	0.03784	4.39
$\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_3$	27(H)...7(H)	2.3612	0.01435	0.00860	-0.00733	0.00126	0.03945	4.60
$\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_4$	7(H)...32(N)	2.2441	0.01794	0.01096	-0.00956	0.00140	0.04947	6.00

According to Table 2, the electron density Laplacian ($\nabla^2\rho(r)$) for the $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_n$ ($n=1-4$) complexes takes positive values in the range of 0.03784-0.04907 au. Similarly, the energy densities ($H(r)$) indicate the presence of weak H-bonds at all points.

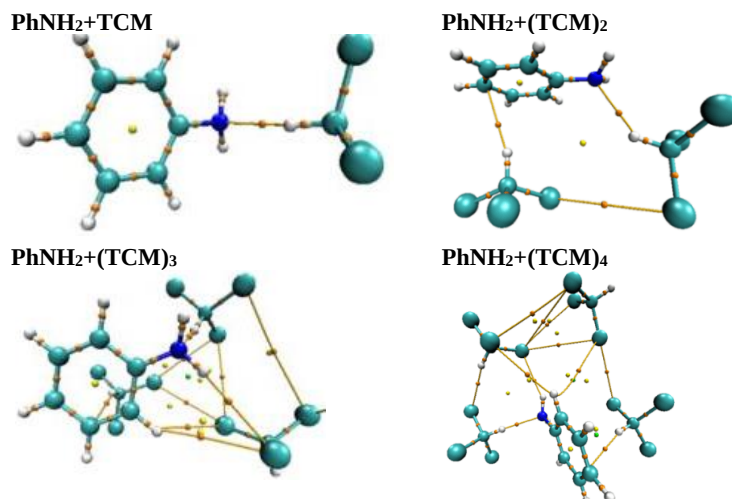


Figure 4. The molecular diagrams of $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_n$ ($n=1-4$) complexes

The formula $E_{\text{HB}}=-V(r)/2$ was used to calculate the hydrogen bond energy. At critical points $H_{\text{BCPs}}<0$, the hydrogen bond has a covalent nature, while $H_{\text{BCPs}}>0$ has an electrostatic nature. According to the table, all bonds are weak hydrogen bonds and are characteristic of the electrostatic effect. If we look at the bond lengths, all of them have a length of 2.1 Å and more, which confirms the presence of weak mutual H-bonding in all complexes, and such bonds can also be called Van der Waals interactions.

Reduced density gradient (RDG) and non-covalent interaction (NCI) analyses

RDG and NCI analyses are used to characterize weak intermolecular interactions. The NCI index is used to characterize intermolecular interactions and assess the nature of weak interactions. RDG is a fundamental dimensionless quantity consisting of the density and its first derivative, and is expressed by formula (1):

$$RDG(r) = \frac{1}{2(3\pi^2)^{1/3}} \frac{|\nabla\rho(r)|}{\rho(r)^{4/3}} \quad (1)$$

Determining the electron density $\text{sign}(\lambda_2)\rho$ relative to the RDG provides information about the nature of intermolecular interactions and the magnitude of these interactions. In molecular systems, blue indicates mutual attraction, while red indicates repulsion. $\text{sign}(\lambda_2)\rho<0$ indicates repulsion between bonded atoms, while $\text{sign}(\lambda_2)\rho>0$ indicates repulsion between non-bonded atoms.

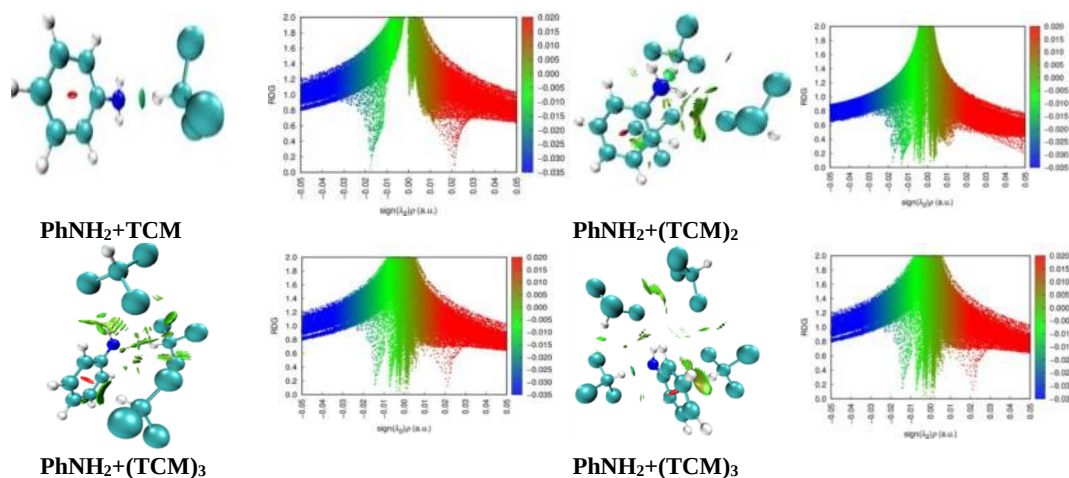


Figure 5. NCI and RDG analyses for $\text{PhNH}_2+(\text{TCM})_n$ ($n=1-4$) complexes

The RDG scattering plot of the complexes is shown on the right side of Figure 5. According to the figure, red color represents strong repulsive forces (steric or cyclic effect), blue color represents H-bonding, and green color represents the presence of Van der Waals interactions. According to the results, the red marks between the PhNH₂ rings indicate the presence of cyclic effect (Figure 5 a). It can also be seen from the RDG scattering plot on the right side of Figure 5 a) that the scattering mainly occurs in the range of $sign(\lambda_2)\rho$, and the value of -0.01-0.00 represents Van der Waals interactions. According to the left part of Figure 5, all complexes have Van der Waals interactions of the Cl-H...N type between the NH₂ group of PhNH₂ and the atoms in the Cl-H group of TCM, which corresponds to the range of $sign(\lambda_2)\rho$ in the RDG scattering plot of -0.02-0.01. Accordingly, a blue shift of PhNH₂ was observed. In general, Van der Waals interactions play a dominant role in these complexes.

Conclusion. In this work, vibrational bands were studied using vibrational spectroscopy (Raman) to study the interactions of aniline and its compounds with chloroform. In this case, a partial red shift and a mainly blue shift were observed in the vibrational bands in aniline solutions. It was predicted that the cause of such shifts was the formation of mainly Van der Waals bonds between aniline and the solvent. This was confirmed when MEPS, FMO, AIM, NCI and RDG analyses were performed to determine the non-covalent interactions.

REFERENCES

1. Mrazkova, E., & Hobza, P. (2003). J. Phys. Chem. A, 107, 1032-1039.
2. Jumabaev, A., Khudaykulov, B., Holikulov, U., Norkulov, A., Subbiah, J., Al-Dossary, O. M., ... Issaoui, N. (2025). Optical Materials, 159, 116683.
3. Khudaykulov, B., Norkulov, A., Holikulov, U., Absanov, A., Doroshenko, I., Jumabaev, A. (2025). Low Temperature Physics, 51(2), 220-230.
4. Chen, Y., Sun, C., Li, Z., Zhou, M. (2014). Eur. Phys. J. D, 68, 70.
5. Alcolea, M. P., Nunez, J. L., & Gil, M. (2002). Journal of Molecular Structure (Theochem), 593, 101-113.
6. Mrazkova, E., & Hobza, P. (2003). J. Phys. Chem. A, 107, 1032-1039.
7. Jumabaev, A., Khudaykulov, B., Holikulov, U., Norkulov, A., Subbiah, J., Al-Dossary, O. M., ... Issaoui, N. (2025). Optical Materials, 159, 116683.
8. Khudaykulov, B., Norkulov, A., Holikulov, U., Absanov, A., Doroshenko, I., Jumabaev, A. (2025). Low Temperature Physics, 51(2), 220-230.
9. Chen, Y., Sun, C., Li, Z., Zhou, M. (2014). Eur. Phys. J. D, 68, 70.
10. Chen, Y., Sun, C., Li, Z., Zhou, M. (2014). Eur. Phys. J. D, 68, 70.
11. Alcolea, M. P., Nunez, J. L., Gil, M. (2002). Journal of Molecular Structure (Theochem), 593, 101-113.
12. Nobrega, M. M., Marcia, L. A., Temperini, R. B. (2016). J. Phys. Chem. C.
13. Alcolea, M. P., Gill, M., Nunez, J. L., Rastogi, V. K., Lalit, M., Sharma, R. (2005). International Journal of Quantum Chemistry, 103, 394-421.
14. Ilic, M., Koglin, E., Pohlmeier, A., Narres, H. D., & Schwuger, M. J. (2000). Langmuir, 16, 8946-8951.
15. Amareshwar, K. R., Sanjay, K., Anita, R. (2006). Vibrational Spectroscopy, 42, 397-402.
16. Qi, Y., Hu, Y., Min, X., Xing, D., Gu, H. (2011). J. Raman Spectrosc., 42, 1287-1293.



УДК: 538.975

Жасурбек ЖУМАЕВ,
Базовый докторант ТауГТУ
E-mail: jumayevjasurbek9999@gmail.com

На основании рецензии доктора физико-математических наук А. Абдувайитова

ВЛИЯНИЕ МОНОСЛОЙНОЙ АДСОРБЦИИ АТОМОВ CS НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ, ЭМИССИОННЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА GaP (111)

Аннотация

В работе изучено влияние монослойного осаждения атомов Cs на электронную структуру (плотность состояния электронов, параметры зон и оптические свойства) монокристаллического GaP(111). Исследования проводились методами спектроскопии фотоэлектронов и упруго отраженных электронов. Показано, что работа выхода электронов уменьшается на 1,94 эВ, а квантовый выход электронов увеличивается в 5 и более раз.

Ключевые слова: Поверхность, толщина, работа выхода, монослой, структура, монокристалл, осаждение.

EFFECTS OF MONOLAYER ADSORPTION OF CS ATOMS ON THE ELECTRONIC STRUCTURE, EMISSION AND OPTICAL PROPERTIES OF GaP (111)

Annotation

Using the methods of ultraviolet photoelectron spectroscopy, light absorption spectroscopy and true secondary electrons, the effect of deposition of Cs atoms with a thickness of 1 monolayer on the density of states of electrons in the valence and conduction bands, the parameters of the energy band, and the quantum yield of photoelectrons were studied. It was found that when cesium is deposited on the surface of GaP (111) single crystals with a thickness of 1 monolayer, the value of E_g and the position of the maxima of the density of states of valence electrons remain virtually unchanged, the work function of photoelectrons decreases to 1.94 eV, and the quantum yield of photoelectrons increases by 5 or more times. Key words: Surface, thickness, work function, monolayer, structure, single crystal, deposition.

Key words: Surface, thickness, work function, monolayer, structure, single crystal, deposition.

GAP (111) NING ELEKTRON TUZILISHI, EMISSIYASI VA OPTIK XUSUSIYATLARIGA MONOQATLAMLI CS ATOMLARI ADSORBSIYASINING TA'SIRI

Annotatsiya

Ultrabinafsha fotoelektron spektroskopiyasi, yorug'lik yutilish spektroskopiyasi va haqiqiy ikkilamchi elektronlar spektroskopiyasi usullaridan foydalangan holda, 1 monoqatlam qalinligidagi Cs atomlarining changlatilishining valentlik va o'tkazuvchanlik zonalaridagi elektronlar holat zichligiga, energiya zona parametrlariga va fotoelektronlarning kvant chiqishga ta'siri o'rganildi. Aniqlanishicha, seziy 1 monoqatlamli GaP(111) monokristallari yuzasiga changlatilganda E_g ning qiymati va valent elektronlarining holat zichligi maksimumlarining o'rni amalda o'zgarmaydi, ammo fotoelektronlarning chiqish ishi 1,94 eV gacha kamayadi va fotoelektronlarning kvant chiqishi 5 marta yoki undan ko'proq oshadi.

Kalit so'zlar: Sirt, qalinlik, chiqish ishi, monoqatlam, tuzilish, monokristall, changlatish.

Введение. В последние годы много работ посвящено получению кристаллических тонких пленок полупроводниковых материалов, особенно GaP, и изучению их состава, структуры и свойств [1-6]. Результаты этих исследований представляют большой интерес при разработке новых оптоэлектронных устройств, в частности солнечных элементов, а также связан с его широким использованием при создании [7-13]. При покрытии поверхности материалов различной природы происходит резкое изменение их состава и физико-химических свойств [14-17]. В частности, путем имплантации ионов In в GaP были сформированы нанопленки $Ga_{0.6}In_{0.4}P/GaP$ (111) [15], определены их эмиссионные и оптические параметры, а также параметры энергетических зон. В данной работе впервые изучены влияние монослойной адсорбции атомов Cs на элементный химический состав и электронную структуру GaP (111).

Методика эксперимента. Эксперименты проводились на универсальной СВВ установке УСУ-2. Монокристаллы GaP(111) обезгаживались при вакууме $P = 10^{-7}$ Па, температуре $T = 900$ К примерно 4 часа. Перед напылением Cs на поверхность монокристаллов GaP(111) создавали однородные зародыши бомбардировкой ионами Ag^+ с $E_0 = 1$ кэВ. Нами установлено, что при дозе $D = 5 \cdot 10^{13}$ см⁻² кристалличность поверхности заметно не меняется, образуются зародыши (дефектные центры) с поверхностными диаметрами 1-1,5 нм. Для получения атомов Cs использовали кристаллы соли хлорида цезия. После прогрева CsCl при $T = 1000$ К атомы Cs выделялись из источника и попадали на поверхность GaP(111). Исследования проводились с использованием методов фотоэлектронной спектроскопии с $h\nu = 10,8$ эВ, спектроскопии Оже - электронов. Зависимость коэффициента пропускания света T от $h\nu$ снималась на спектрофотометре UV-1280.

Результаты и их обсуждение. На рис. 1 приведены начальные части оже- спектров чистого GaP и GaP с пленкой Cs толщиной 1 монослой. Здесь за 1 монослой принята толщина Cs при котором фотоэлектронная работа выхода Φ

уменьшается до минимума. В оже спектре чистого GaP обнаруживаются пики Ga с энергиями 54 эВ (M_1M_3V) и 79 эВ (M_3M_5V), а также пик P с энергией 121 эВ ($L_3M_{23}V$). После напыления Cs с $\theta = 1$ мс амплитуда пиков Ga уменьшается и изменяются их положения. Положение пика фосфора при $E=121$ эВ не меняется, однако его интенсивность резко уменьшается, появляется слабый пик Cs при $E=49$ эВ. Опираясь на результаты работы [18] можно показать, что Cs в основном осаждается на атомы Ga и образуются поверхностные квазимолекулы Cs+Ga, при этом атомы Cs отдают свои электроны атомам Ga, следовательно, на поверхности формируются диполи, которые облегчают выход электронов в вакуум.

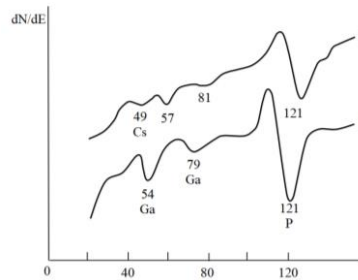


Рисунок. 1. Начальные части оже-спектров: GaP (111) до (кривая 1) и после адсорбции Cs с $\theta=1$ монослой (2)

На рис.2 приведены фотоэлектронные спектры чистого и покрытого монослоем цезия GaP(111), снятые при $h\nu = 10,8$ эВ. На спектре GaP(111) имеются 3 максимума при $E_{св} \approx 0,8$; 2 и 4,1 эВ. Их наличие объясняется возбуждением электронов из валентной зоны. Вследствие возбуждения поверхностных состояний ПС появляется особенность при 0,3 эВ. Адсорбция Cs с $\theta = 1$ монослой приводит к заметному росту площади под кривой $N(E)$, увеличению квантового выхода фотоэлектронов, интенсивности пиков, некоторому изменению их энергетических положений и увеличению ширины спектра ΔE . Все эти изменения объясняются образованием на поверхности соединения типа Cs+Ga и уменьшением работы выхода фотоэлектронов. В начальной части спектра появляется новая особенность, характерная для 6s состояния Cs.

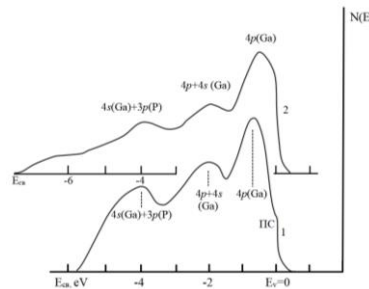


Рисунок. 2. Фотоэлектронные спектры: 1- GaP (111); 2- GaP (111) с монослойным покрытием Cs.

На рис. 3 приведены спектры прохождения света через образец GaP(111), полученные до и после осаждения Cs с толщиной $\theta=1$ монослой. Видно, что в обоих случаях значения коэффициентов прохождения света K в интервале $h\nu \approx 0,5-1,8$ эВ. не меняются и составляют $\sim 0,78$ для чистого GaP и $0,74$ эВ для GaP с пленкой Cs. В этой области $h\nu$ можно полагать, что коэффициент отражения R составляет $0,22$ и $0,26$, соответственно. Начиная с $h\nu \approx 2-2,1$ эВ K резко уменьшается, т.е. происходит интенсивное поглощение света и при $h\nu \approx 2,3-2,4$ эВ K приближается к нулю. Экстраполяция кривой $K(h\nu)$ к оси $h\nu$ при $h\nu \geq 2,1$ эВ дает значение E_g исследуемых образцов. Видно, что значение E_g для GaP (111) составляет $\sim 2,36$ эВ и после напыления Cs с $\theta=1$ монослой, практически, не изменяется. По зависимости $K(h\nu)$ можно оценить значения K , R и T (коэффициент поглощения) при разных $h\nu$ для исследуемых образцов. По данным рис.2 и 3 оценены зонно-энергетические параметры чистого и покрытого монослоем цезия GaP. В таблице приведены также значение δ_m и Y .

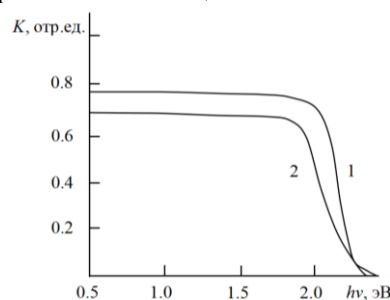


Рисунок 3. Зависимости $K(h\nu)$ для пленки GaP (111) толщиной θ (монослой): 1- $\theta=0$ (чистый GaP (111)); 2- $\theta=1$.

Таблица

Параметры энергетических зон, значения δ_m и Y пленки GaP(111) до и после осаждения Cs с $\theta = 1$ монослой

Исследуемый объект	Φ , эВ	E_g , эВ	χ , эВ	δ_m^*	$Y^{**}(h\nu=10,8 \text{ эВ})$
GaP (111)	5,3	2,36	3,04	1,95	$6 \cdot 10^{-3}$
Cs- GaP(111)	3,36	2,36	1,1 эВ	11	$29 \cdot 10^{-3}$

*-максимальное значение коэффициента вторичной эмиссии.

******-квантовый выход фотоэлектронов.

Из таблицы видно, что при напылении Cs с $\theta=1$ монослой значения фотоэлектронной работы выхода Φ и сродство к электрону χ уменьшаются на $\sim 1,94$ эВ, значение E_g практически не меняется. При этом значения δ_m и γ увеличиваются ~ 5 и более раз.

Заключение. Изучено влияние адсорбции Cs толщиной 1 монослой на параметры энергетических зон и на значения коэффициента вторичной эмиссии δ_m и квантового выхода фотоэлектронов монокристаллического GaP.

Показано, что адсорбция Cs с $\theta=1$ монослой практически не приводит к изменению значения E_g , значения Φ и χ уменьшаются на 1,94 эВ. При этом происходит изменение плотности состояния валентных электронов и резкое увеличение значений δ_m и γ .

ЛИТЕРАТУРА

1. Mudar Ahmed Abdulsattar, Bahjat B. Kadhim and Huda M. Jawad. Electronic, Structural and Vibrational Properties of GaP Diamondoids and Nanocrystals: A Density Functional Theory Study. *Nanomater Nanotechnol*, 2015, 5:15 | doi: 10.5772/60577.
2. Lorenz M R, Pettit G D, Taylor R C (1968) Band Gap of Gallium Phosphide from 0 to 900K and Light Emission from Diodes at High Temperatures. *Phys. Rev.* 171:876.
3. Assali S, Zardo I, Plissard S, Kriegner D, Verheijen M A, Bauer G, Meijerink A, Belabbes A, Bechstedt F, Haverkort J E M, Bakkers E P A M (2013) Direct Band Gap Wurtzite Gallium Phosphide Nanowires. *Nano Lett.* 13:1559.
4. NSM Archive, Physical Properties of Semiconductors, Available: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/>. Accessed 2014 June 1.
5. Fedorchenko I. V., Kushkov A. R., Gaev D. S., et al., Growth method for AlInBV and AlVbVI heterostructures, *J. Cryst. Growth.* 483 (1 February) (2018) 245–250.
6. Spirina A. A., Nastovjak A. G., Usenkov S. V., Shvarts N. L., Lattice Monte Carlo model of Langmuir evaporation of AlInBV semiconductors, *J. Comput. Technol.* 23 (6) (2018) 81–94.
7. Alexander S. Gudovskikh, Ivan A. Morozov, Alexander V. Uvarov, Dmitriy A. Kudryashov, Ekaterina V. Nikitina, and Anton S. Bukatin. Low temperature plasma enhanced deposition of GaP films on Si substrate. *J. Vac. Sci. Technol. A*, Vol. 36, No. 2, Mar/Apr 2018
8. S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, 2nd ed. (Wiley, New York, 1981).
9. H. Wagner, T. Ohrdes, A. Dastgheib-Shirazi, B. Puthen Veetil, D. K€onig, and P. P. Altermatt, *J. Appl. Phys.* 115, 044508 (2014).
10. M. Feifel, T. Rachow, J. Benick, and J. Ohlmann, *IEEE J. Photovoltaics* 6, 384 (2016). M. Sadeghi and S. Wang, *J. Cryst. Growth* 227–228, 279 (2001).
11. M. S. Sobolev, A. A. Lazarenko, E. V. Nikitina, E. V. Pirogov, A. S. Gudovskikh, and A. Yu. Egorov, *Semicond.* 49, 559 (2015).
12. J. F. Geisz, J. M. Olson, D. J. Friedman, K. M. Jones, R. C. Reedy, and M. J. Romero, 31th IEEE PVSC (2005), p. 695.
13. A. S. Gudovskikh, K. S. Zelentsov, A. I. Baranov, D. A. Kudryashov, I. A. Morozov, E. V. Nikitina, and J.-P. Kleider, *Energy Procedia* 102, 56 (2016).
14. B.E. Umirzakov, I.R. Bekpulatov, I.Kh. Turapov, B.D. Igamov. Effect of Deposition of Submonolayer Cs Coatings on the Density of Electronic States and Energy Band Parameters of CoSi₂/Si(111). *J. NANO- ELECTRON. PHYS.* 14, 02026 (2022)
15. G. M. Shirinov, S. B. Donaev, B. Y. Umirzakov, V. V. Loboda. Emission, optical and electrical properties of GaInP/GaP nanofilms. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics.* 2023. Vol. 16. No. 2. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16208>.
16. Umirzakov B.E., Pugacheva T.S., Tashatov A.T., Tashmukhamedova D.A. Electronic structure and optical properties of CaF₂ films under low energy Ba⁺ ion-implantation combined with annealing. // *Nuclear instruments & Methods in physics research section b-beam interactions with materials and atoms.* DOI: 10.1016/S0168-583X(99)01151-9 2000, Vol. 166, № 2, Page 572-576.
17. Donaev S. B., Tashatov A. K., Umirzakov B. E. Effect of Ar⁺ Ion Bombardment on the Composition and Structure of the Surface of CoSi₂/Si(111) Nanofilms. // *Journal of surface investigation.* DOI: 10.1134/S1027451015020263. 2015, Vol. 9, № 2, Page 406-409.
18. Кораблев В.В., Кудинов Ю.А., Сысоев С.Н. Проявление зонной структуры твердого тела в спектрах вторичных электронов с угловым разрешением // *Физика твердого тела*, 1986, том 28, выпуск 9, с. 2648-2654.



UDK: 539.23

Davron ISMOILOV,
Qarshi davlat texnika universiteti dotsenti, PhD
E-mail: ismoilovd903@gmail.com,
Jamoliddin SHOHIMARDONOV,
Qarshi davlat texnika universiteti assistenti

QDU professori A.Tashatov taqrizi asosida

MNE USULI BILAN *Si* YUZASIDA NANOPLYONKALAR HOSIL QILISH VA ULARNING FIZIK XUSUSIYATLARINI O'RGANISH

Annotatsiya

Ushbu maqolada ko'p qatlamli geterotizimlarni taglikning struktura (morfologiya) sini saqlab qolgan holatda epitaksial o'stirish va nanoplyonkalar olish usuli ko'rib o'tiladi. O'ta yupqa va noyob xususiyatli plyonkalar asosan yuqori vakuum sharoitida olinadi. Shuning uchun ushbu maqolaning asosiy maqsadi yupqa plyonkalarni o'ta yuqori vakuumda olish usullari va qurilmalari bilan tanishish hamda tadqiqotlar o'tkazish orqali *Si* yuzasida nanoplyonkalar hosil qilish.

Kalit so'zlar: MNE, qattiq fazali epitaksiya, kichik energiyali ionlar, implantatsiya, *Si*, *CoSi₂*, *GaAs*, *CaF₂* plyonkalari.

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОПЛЕНОК НА ПОВЕРХНОСТИ *Si* МЕТОДОМ МЛЭ И ИЗУЧЕНИЕ ИХ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

Аннотация

В данной статье рассматривается метод эпитаксиального культивирования и получения нанопленок многослойных гетерос в состоянии, сохраняющем структуру (морфологию) основания. Сверхтонкие пленки с уникальными свойствами в основном получают в условиях высокого вакуума. Поэтому основная цель этой статьи-познакомиться с методами и устройствами получения тонких пленок в сверхвысоком вакууме, а также создать нанопленки на поверхности *Si* путем проведения исследований.

Ключевые слова: MNE, твердофазная эпитаксия, малая энергия ионы, имплантация, *Si*, *CoSi₂*, *GaAs*, *CaF* слои.

FORMATION OF NANOFILMS ON THE SURFACE OF SILICON BY THE METHOD OF MBE AND STUDY OF THEIR PHYSICAL PROPERTIES

Annotation

This article examines the method of epitaxial cultivation and nanoplyonka acquisition of multilayer heteroisms in a state that preserves the structure (morphology) of the base. Extremely thin and uniquely characteristic films are mainly obtained under high vacuum conditions. Therefore, the main purpose of this article is to get acquainted with the methods and devices for obtaining thin films in an extremely high vacuum, as well as to form nanoplanes on the surface of *Si* by conducting research.

Key words: MBE, solid phase epitaxy, small energy ions, implantation, *Si*, *Si*, *CoSi₂*, *GaAs*, *CaF₂* layers

Kirish. Mikroelektronikaning asosiy yutuqlari, nanoelektronikaning paydo bo'lishi va rivojlanishi tarkibi, tuzilishi va xususiyatlari jihatdan mukammal yupqa va o'ta yupqa ko'p komponentli va ko'p qatlamli plyonkalar tizimlarini hosil qilish bilan chambarchas bog'liqdir.

Plyonkali materiallarning elektronika sohasida ishlatilishida eng asosiy o'rinni epitaksial plyonkalar egallaydi. Bunday plyonkalar katta va o'ta katta integral sxemalar ishlab chiqarishda, umuman eng zamonaviy va eng noyob mikroelektron asboblari ishlab chiqarishda alohida rol o'ynaydi. U kelajak elektronikasi, ya'ni nanoelektronikaning ham asosini tashkil etishi tabiiy.

Kristall panjarasining tuzilishi asosning kristall panjarasi tuzilishi bilan bir xil bo'lgan monokristall plyonkalar epitaksial plyonkalar deyiladi.

MNE da hosil bo'layotgan plyonka berilgan asosning yuzasida o'sadi va bu yuza bilan plyonka atomlari aralashib ketmaydi. MNE da kerakli atomlar asosning yuzasiga kelib o'tiradi va yuzada qatlam-qatlam o'sib boraveradi.

Mavzuga oid adabiyotlar tahlili. Kremniyning yuzasiga kobalt kremniy (*CoSi₂*) plyonkasini MNE yo'li bilan hosil qilish jarayoni: yuqori vakuum sharoitida yuzasi juda yaxshi tozalangan kremniy monokristalining sirtiga kobalt (*Co*) va kremniy (*Si*) manbalaridan ularning atomlari kelib o'tira boshlaydi. Bunda har bir momentda bitta kobalt atomi kelib o'tirganda, ikkita kremniy atomi tushadi. Asosning harorati shunday tanlanadiki, yuzaga kelib o'tiradigan atomlar *CoSi₂* birikmasini hosil qiladi va ularning plyonkasi epitaksial o'sa boshlaydi[1].

Boshqa usullarga nisbatan, avval qayd qilganimizdek, MNE usuli quyidagi asosiy afzalliklarga ega:

- asos va atom (molekula) lar manbalarini yuqori darajada tozalash va eksperimentni juda yuqori vakuumda o'tkazish hisobiga epitaksiya haroratini juda pastga tushirish mumkin (500 ÷ 600 K);

- har xil turdagi (metall, yarim o'tkazgich, dielektrik) materiallarni bir-birining ustiga qatlam-qatlam kerakli qalinlikda o'tkazib mumkin;

- bunday qatlamlarni (masalan: metall–dielektrik–yarim o'tkazgich, metall–oksid–yarim o'tkazgich, yarim o'tkazgich–dielektrik–yarim o'tkazgich) davriy ravishda bir xil ustma-ust o'tkazib borish mumkin, ya'ni hajmiy strukturalar olish mumkin;

- bunday o'stirishda bitta turdagi qatlam ikkinchi turdagi qatlam bilan keskin chegara hosil qilishi mumkin;

- plyonkalar hosil qilish jarayonida uni legirlash uchun legirlovchi moddaning tarkibini va kontsentratsiyasini o'zgartirish yo'li bilan xususiyati o'zgarib boruvchi tizimlarni hosil qilish mumkin[2].

Yuqorida ko'rsatilgan afzalliklar tufayli MNE plyonkalar mikroelektronikaning rivojlanishida asosiy rolni o'ynagan bo'lsa, nanoelektronikaning paydo bo'lishiga sabab bo'ldi.

Umuman yuqqa epitaksial plyonkalar alohida o'ziga xos bo'lgan xususiyatlarga ega bo'ladi. Bunday xususiyatlarning paydo bo'lishida asosning ta'siri ham, plyonka o'sish davomida legirlanish darajasi ham, plyonkaga tushgan, undan o'tayotgan va chiqayotgan elektronlar va fotonlarning ta'sirlari ham massiv plyonkalardan ko'ra farq qilishi asosiy rolni o'ynaydi[3].

Tadqiqot metodlogiyasi. Shunday qilib, kristall panjara parametrlari bir xil bo'lgan MNE qatlam va asos chegarasida, nazariy jihatdan atomlarning o'zaro aralashib ketishi ro'y bermaydi[4]. Ammo amaliyotda har qanday ideal sharoitda, masalan, avtoepitaksial (*Si* monokristalli yuzasida *Si* qatlam, *Ge* da *Ge* va h.k.) usuli bilan hosil qilingan plyonkalarda ham asos va plyonka chegarasida atomlarning o'zaro aralashib ketishi ro'y beradi. Ya'ni ular chegarasida yangi qatlam hosil bo'ladi. Bunday qatlam chegaraviy qatlam deb ataladi[5]. O'ta yuqori vakuum ($R \leq 10^{-8} Pa$) sharoitida yuqori darajada silliqlangan va tozalangan asos yuzasida avtoepitaksial qatlam hosil qilinsa, chegaraviy qatlamning kengligi $10 \div 20 \text{ \AA}$ bo'ladi. Shunday sharoitda asosning yuzasida boshqa tarkibli plyonka o'stirilsa va ularning panjara doimiylari o'zaro juda kam farq qilsa ($< 0,7\%$), chegaraviy qatlamning qalinligini $20 \div 50 \text{ \AA}$ gacha kamaytirish mumkin. Agar plyonka va asosning panjara parametrlari katta farq qilsa ($3 \div 4\%$), chegaraviy qatlamning qalinligi $400 \div 500 \text{ \AA}$ gacha borishi mumkin.

Chegaraviy qatlamning kengligi yana plyonka va asosning sirti energiyalariga bog'liq bo'ladi. Ularning sirti energiyalari keskin farq qilishi plyonkaning orolchalib bo'lib o'sishiga va natijada notekis qatlamlar hosil bo'lishiga olib keladi. Natijada chegaraviy qatlamning kengligi ham o'zgaruvchan bo'ladi[6].

Epitaksial plyonkalar hosil qilish qizdirish va keyin sovitish jarayonlari bilan uzviy bog'liqdir. Shuning uchun ham hosil qilinayotgan plyonkaning mukammalligi ham chegaraviy qatlamning kengligi va sifati hamda plyonka va asosning kristall panjaralarining kengayish harorat koeffitsientlari kattaliklariga bog'liq bo'ladi. Agar ularning harorat koeffitsientlari sezilarli farq qilsa, qizdirish yoki sovitish jarayonida plyonka va asos orasida qo'shimcha kuchlanish vujudga keladi va u plyonkaning ham, chegaraviy qatlamning ham sifatiga salbiy ta'sir qiladi[7].

Tahlil va natijalar. Shunday qilib, mukammal plyonkalar va chegaraviy qatlamlar hosil qilish uchun o'ta yuqori vakuum, asosning o'ta yuqori darajada silliqlanishi va tozalanishi, molekulyar va atomar manbalarini yuqori tozalash, o'tkazish rejimlarini juda aniq olib borish bilan bir qatorda quyidagilar ham katta rol o'ynar ekan:

- asos va plyonka panjara parametrlari bir-biriga juda yaqin bo'lishi ($\leq 0,7\%$);
- asos va plyonka sirti solishtirma erkin energiyalarining (SSEE) mumkin qadar keskin farq qilmasligi;
- kristall panjara chiziqli kengayish harorat koeffitsientlari (ChkHK) ning o'zaro yaqin bo'lishi[8].

Hozirgi zamon elektronikasida *Si*, *GaAs*, *CoSi₂*, *CaF₂* lar va ularning birikmalari *YaDYa* va *MDYa* tizimlari hosil qilishda keng qo'llaniladi. Quyidagi 1-jadvalda ularning ayrim kattaliklari keltirilgan.

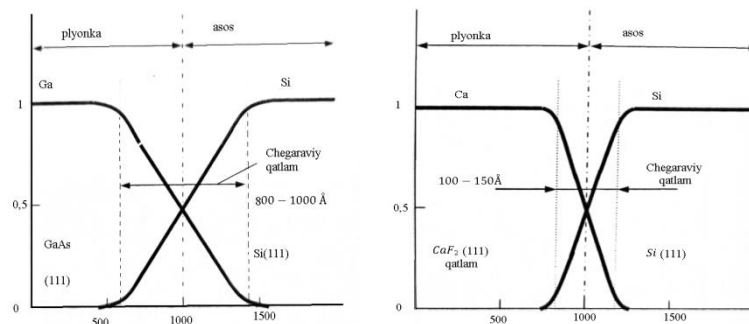
Si, *GaAs*, *CoSi₂*, *CaF₂* larining fizikaviy va strukturaviy xususiyatlari

1-jadval

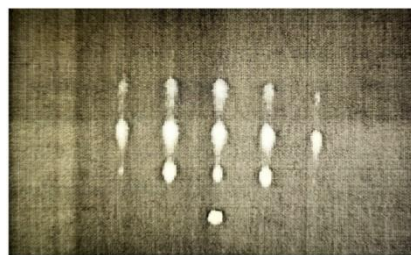
Material	Kristall tuzilish	Panjara doimiysi	ChKHK, $\text{\AA}/^\circ\text{C}$	Erish harorati $T, ^\circ\text{C}$	Fizik xususiyatlari	SSEE, erg/sm^2		
						100	110	111
<i>Si</i>	Kubik (olmos)	5,431	$2,5 \cdot 10^{-6}$	1415	yarimo'tkazgich	1710	1690	1360
<i>CaF</i>	Kubik (flyurit)	5,464	$19,1 \cdot 10^{-6}$	1360	dielektrik	—	1082	540
<i>CoSi₂</i>	Kubik (flyurit)	5,365	$15,4 \cdot 10^{-6}$	1320	metall	4130	2960	2380
<i>GaAs</i>	Kubik (aldamchi ruh panjarasi)	5,653			yarimo'tkazgich			

Jadvaldan ko'rinadiki, *CoSi₂–Si–CaF₂* tizimini hosil qilish har tomonlama nisbatan qulayliklarga ega. Chunki ularning panjaralari bir xil tipda va doimiysi katta farq qilmaydi. Ammo ChKHK farq qilingani tufayli chegaraviy qatlam kengroq bo'ladi. Plyonka hosil qilishda yuza tomon qaysi kristallografik tomonga to'g'ri kelishi ham muhim rol o'ynaydi. Masalan, (100) yo'nalishida *CaF₂* uchun SSEE juda katta. Shuning uchun bunday sirtlarda o'ta mukammal plyonkalar olish deyarli mumkin emas[9].

GaAs ning panjara doimiysi keskin farq qilganligi uchun *Si–GaAs*, *CaF₂–GaAs*, *CoSi₂–GaAs* tizimlarida o'tish qatlamlari juda keng bo'ladi. 1-rasmda har xil "plyonka-asos" tizimlari uchun chegaraviy qatlam qalinliklari keltirilgan. Rasmdan ko'rinadiki, panjara doimiysi katta farq qilsa, chegaraviy qatlam ham juda keng bo'lar ekan[10].



1-rasm. *CaF₂/Si* va *GaAs/Si* chegaralarida atomlar konsentratsiyalarining chuqurlik profili bo'yich o'zgarishi

 CaF_2/Si  $GaAs/Si$

2-rasm. $Si(111)$ yuzasida hosil qilingan $GaAs$ va CaF_2 plyonkalarining elektronogrammalari

Xulosa va takliflar. Xulosa qilib aytganda, molekulyar nurli epitaksiya usuli bilan olingan $CoSi_2-Si$ tizimning chegaraviy qatlami kristall tuzilishini o'rganish natijasida chegaraviy qatlam kubik panjaraga ega ekanligi aniqlandi. Co 30 at. % dan 1 at. % gacha kamayishi kuzatildi.

Shuningdek, panjara doimiylarining mos kelmasligi o'stirilayotgan plyonkaning kristall tuzilishida nuqsonlarni vujudga keltiradi. Bu ayniqsa yupqa plyonkalarda ($\leq 200 \div 300 \text{ \AA}$) yaqqol seziladi. 2-rasmda Si yuzasida o'stirilgan CaF_2 va $GaAs$ plyonkalarining elektronogrammalari (katta energiyali difraktsiya tasvirlari) keltirilgan. Ikkala holda ham plyonka qalinligi $300 \text{ \AA}$. Rasmdan ko'rinadiki, $GaAs/Si$ uchun tasvir CaF_2/Si ga nisbatan ancha chaplangan va ikkilamchi reflekslar mavjud. Buning asosiy sababi $GaAs$ va Si panjara doimiylarining bir-biridan sezilarli farq qilishidir (1-jadvalga qarang)[11].

ADABIYOTLAR

1. Normurodov M.T., Umirzakov B.E., Parmankulov I.P., Elektron texnika materiallari texnologiyasi. Toshkent "Mehnat" nashriyoti. 2010 yil. 362 b.
2. Барьбин А.А. Электроника и микроэлектроника. Физико-технологические основы. Учебное пособие. Физматлит, 2016. 589 с.
3. Галкин Н.Г., Горошко Д.Л., Чусовитин Е.А., Полярный В.О., Гутаковский А.К., Латышев А.В., Khang У. Формирование, кристаллическая структура и свойства кремния со встроенными нанокристаллами дисилицида железа на подложках $Si(100)$ // Физика нанокристаллитами дисилицида железа на подложках $Si(100)$ // Физика и техника полупроводников, - Санкт-Петербург, 2017. –т.41. –вып.9.-С.1085-1092.
4. Нормуродов М.Т, Умирзаков Б.Е, "Электронная структура и физические свойства наноразмерных гетероструктур" Qarshi 2021 yil, "Intellekt", 43 bet.
5. Бугерко Л.Н, Борисова Н.В, Суровая В.Э, Еремеева Г.О, Закономерности фотостимулированных превращений в наноразмерных пленках MoO_3 // Журнал физической химии, 2013. Т.87, №12. –С 2105-2109.
6. В.Миронов. Основы сканирующей зондовой микроскопии. Физика техника. Техносфера. Москва 2009 г.
7. БолтаевХ.Х, Ташмухаммедова Д.А, Умирзаков Б.Е.// Поверхность рентген синхротронейтрон исслед. 2014 №4ю С24.
8. Умирзаков Б.Е, ТашмухаммедоваД.А, Гулямов С.Т, Аллаярова Г.Х, Влияние имплантации ионов Ba^+ на состав и электронные свойства пленок $MoO_3/(111)$ УФЖ.2020.том.90вып.5.С.831-834.
9. Аллаярова Г.Х. Получения и изучение электронной структуры нанопленок MoO_3/Mo . Поверхность.2020 №11.Ст74-78.
10. А.И.Гусев. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии –М: Физматгиз, 2017.
11. Гусев О.Б, Излучение кремниевых нанокристаллов //ФТП. -2013. –Т.47,В.2.-С 147-167.



UDK: 537.9 (575.1)

Oblokul KUVANDIKOV,
Samarqand davlat universiteti professori, f.-m.f.d
Zokir SHODIYEV,
Samarqand davlat universiteti dotsenti
Jushqin AXTAMOV,
Samarqand davlat universiteti tayanch doktranti

SamDAQI professori, f.-m.f.d O'.O'sarov taqrizi asosida

INVESTIGATION OF THE ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF THE ALABANDITE MINERAL USING DFT AND DFT+U METHODS

Annotation

In this theoretical study, the electronic structure, charge distribution, magnetic moment, and types of chemical bonding present in the alabandite mineral were investigated using Density Functional Theory (DFT) and the Hubbard-corrected DFT+U method. A comparative analysis of the DFT and DFT+U methods revealed that α -MnS exhibits antiferromagnetic behavior, with the resulting magnetic moment - i.e., spontaneous magnetization - equal to 0 μ_B . The analysis of the Electron Localization Function (ELF) indicated the presence of both covalent and ionic bonds in the sample.

Key words: DFT, DFT+U, Quantum ESPRESSO, ELF map, electronic structure, magnetic properties, chemical bonding, magnetic moment.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ МИНЕРАЛА АЛБАНДИТА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ DFT И DFT+U

Аннотация

В данной теоретической работе с использованием методов теории функционала плотности (DFT – Density Functional Theory) и DFT+U (с учетом поправки Хаббарда U) были изучены электронная структура, распределение зарядов, магнитный момент, а также типы химических связей в минерале алабандит. При сравнении методов DFT и DFT+U было установлено, что α -MnS обладает антиферромагнитной природой, а результирующий магнитный момент, то есть спонтанное намагничивание, равен 0 μ_B . Анализ функции локализованных электронов (ELF) показал наличие как ковалентных, так и ионных связей в структуре.

Ключевые слова: DFT, DFT+U, Quantum ESPRESSO, карта ELF, электронная структура, магнитные свойства, химическая связь, магнитный момент.

ALABANDIT MINERALINING ELEKTRON VA MAGNIT XOSSALARINI DFT VA DFT+U USULLARI ORQALI TADQIQ QILISH

Annotatsiya

Ushbu nazariy hisoblash va tadqiqod ishida alabandit mineralining elektron tuzilishi, zaryadlar taqsimoti, magnit momenti va namunada amal qiladigan kimyoviy bog'lanish turlari, zichlik funksional nazariyasi DFT (*Density Functional Theory*) va DFT+U (*Density Functional Theory plus Hubbard U correction*) usullari yordamida o'rganildi. DFT va DFT+U usullarini bir-biriga nisbatan taqqoslash yordamida DOS (*DOS - Density of states*) hisoblanganda α -MnS antiferromagnit tabiatga egaligi ma'lum bo'lib natijaviy magnit momenti ya'ni spontan magnitlanish 0 μ_B ga tengligi aniqlandi. Lokallashgan elektronlar funksiyasi (ELF) tahlili yordamida namunada kovalent va ion bog'lanishlar mavjudligi kuzatildi.

Kalit so'zlar: DFT, DFT+U, Quantum ESPRESSO, ELF map, elektron tuzilish, magnit xossa, kimyoviy bog'lanish, magnit moment.

Kirish. Alabandit minerali tarkibi α -MnS (marganets(II) sulfidi) dan iborat bo'lib, nafaqat tabiiy mineral sifatida, balki uning elektron va magnit xossalari bilan ham ilmiy jamoatchilikda katta qiziqish uyg'otadi. $Fe_xMn_{1-x}S$ qattiq eritmalarida gigant magnit qarshilik effektining aniqlanishi [1] natijasida ushbu moddalar asosida olingan marganets monosulfidining fizik xususiyatlarini, jumladan, magnit xossasini tadqiq qilishga bo'lgan qiziqish tobora ortib bormoqda [2]. Marganes(II) sulfidi - MnS ning polimorfizmi tufayli, bu mineral polimorfizmni boshqarish va sintez strategiyalarini ishlab chiqish uchun noyob mineral hisoblanadi [3]. Nanometrik marganes(II) sulfidi juda foydali optik, elektr va magnit xossalarga ega bo'lib, bu xususiyatlar nanometrik o'lcham tartibidagi domenlarda, ya'ni 100 nm dan kichik o'lchamlarda o'zgaradi [4].

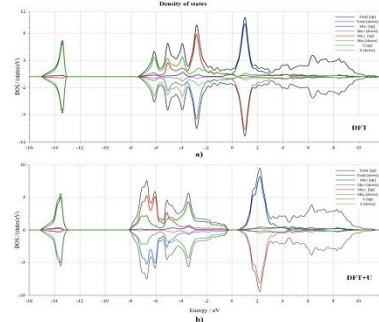
Mavzuga oid adabiyotlar tahlili. Marganes sulfidi (MnS) p-tipli yarim o'tkazgich bo'lib, uchta polimorf fazalari mavjud va ular α , β , γ dan iborat [5]. Ular α -MnS kubik (rock salt) tuzilishida mavjud bo'lib, barqaror hisoblanadi, β shakli kubik sink blende tuzilishiga ega va metastabil holatda bo'ladi, γ fazasi esa metastabil geksagonal vyurtsit mineralining kristall strukturasi tuzilishiga ega. Ikkala β -MnS va γ -MnS fazalar yuqori harorat yoki yuqori bosim ostida metastabil holatdan α -MnS yoki, NaCl tipidagi yoqlari markazlashgan kubik (FCC) panjaraga ega bo'lgan fazaga o'tishi kuzatilgan [6]. Bunday tipdagi minerallar (MnS) yorug'lik chiqaruvchi va optoelektron qurilmalarda, quyosh batareyalari qoplamalarida oynali buffer to'siq materiallari sifatida, magnitoptik qurilmalarda va litij ionli batareyalarida elektrod sifatida qo'llaniladi [7].

α -MnS NaCl tipidagi yoqlari markazlashgan kubik (FCC) panjaraga ega bo'lib unda strukturaviy ya'ni polimorf fazaviy o'tish ($T_s=162\pm 2K$) kuzatiladi[8]. Namunada yuz beradigan antiferromagnit-paramagnit ikkinchi tur fazaviy o'tish esa $T_N=150 K$ da yuz beradi [9]. Alabandit - MnS mineralining elektron tuzilishi va magnit xossalarini olingan tajribaviy natijalar bilan bir qatorda nazariy hisoblash usullarini ham ishlab chiqish muhimdir. Bunday hisoblash usuliga eng so'nggi hisoblash usullaridan **Density Functional Theory (DFT)** va uning kengaytirilgan versiyasi **Density Functional Theory + Hubbard U (DFT+U)** usullari tanlab olindi. Bu hisoblash usuli 1965 yilda nemis fizigi Walter Kohn va uning hamkasbi Lu Jeu Sham tomonidan kashf etilgan bo'lib, Kohn-Sham equations DFT bir elektronli tizimlarning energiya va elektron strukturasi hisoblashda muhim rol o'ynaydi [10,11]. DFT va DFT+U metodlarini qo'llash orqali α -MnS mineralining elektron strukturasi, zaryadlar taqsimoti va magnit xossalari (magnit momenti) haqida yanada yetarli ma'lumotlar olish imkoniyatiga ega bo'lish mumkin. Ushbu tadqiqot ishida alabandit minerali α -MnS ni DFT va DFT+U metodlari orqali elektron strukturasi, zaryadlar taqsimoti va magnit xossalari o'rganilib natijalar qiyosiy tahlil qilinadi.

Tadqiqot metodologiyasi va hisoblash parametrlari. Yuqorida bayon qilinganidek alabandit minerali α -MnS faza ega bo'lib eng barqaror kristall strukturani namoyon qiladi. Uning kristall panjara ma'lumotlari (MnS ID:mp-2065 Fm3m) ochiq va ishonchli manba materialsproject.org [12,13] bazasidan olindi va hisoblash amallarini bajarish jarayonida bevosita ushbu ma'lumotlardan foydalanildi. DFT va DFT+U hisoblashlari **Quantum ESPRESSO dasturida amalga oshirildi** [14]. Bu dastur yordamida **alabandit minerali** uchun DFT va DFT+U metodlarini qo'llash jarayonida ikkala holat uchun ham hisoblash parametrlari bir xil tanlandi faqat DFT+U hisoblashda Hubbart parametri $U_{Mn}= 4, 5, 6 eV$, $U_S= 0 eV$ qiymatlar kiritildi. *K-point mesh SCF (Self-Consistent Field)* uchun $8\times 8\times 8$, DOS (Density of States) uchun esa tur zichligi $12\times 12\times 12$ tanlandi. Marganets uchun Mn.pbe-spn-kjpaw_psl.1.0.0.UPF, Oltingugurt uchun esa S.pbe-n-kjpaw_psl.1.0.0.UPF psevdopotensiallari qo'lanildi.

α -MnS ni yanada chuqurroq tahlil qilish maqsadida uning elektron zichlikning fazoda taqsimlanishini aniqlash uchun **ELF (Electron Localization Function)** xaritasi yaratildi. ELF xaritani yaratishda dastlab **Quantum ESPRESSO da self-consistent field (SCF)** hisoblashi bajarildi va yaratilgan *MnS.cube ELF* xaritasi Vesta dasturida [15, 16] simulyatsiya qilindi.

Natijalar va ularning muhokamasi. DOS tahlili. 1-rasmda α -MnS ning DFT va DFT+U usullari bo'yicha hisoblangan elektronlarning holat zichliklari (DOS) grafigi keltirilgan. DFT natijalari Fermi energiyasi atrofida (0 eV da) elektronlarning holat zichliklari mavjud ya'ni band gap $E_g=0 eV$ ga teng bo'lib α -MnS ning metallik xossasiga ega ekanligini ko'rsatmoqda.



1-rasm. Alabandit (α -MnS) mineralining elektronlar holat zichliklari (DOS) DFT-(a), DFT+U-(b) ning energiyadan bog'lanish grafigi.

DFT+U natijalari (rasm-1 b.) ni tahlil qilish shuni ko'rsatdiki, marganets sulfidning Fermi energiyasi atrofida kichik energik bo'shliq (*band gap*) hosil bo'lib bu esa o'z navbatida namunada yarimo'tkazgichlik tabiatining mavjudligidan dalolat bermoqda. DFT+U usulidagi Hubbard (U) modeli Mn atomlarining 3d-qobig'ida joylashgan elektronlarning o'troqlashish darajasini oshiradi natijada taqiqlangan zona kengligi hosil bo'ladi. DFT natijalariga ko'ra Mn1 va Mn2 atomlari individual holatlari uchun *spin-up* (spini yuqoriga yo'nalgan holat) va *spin-down* (spini pastga yo'nalgan holat) komponentlari assimetrik bo'lib (rasm-1 a), bu esa o'z navbatida marganets atomida magnit moment mavjudligini ko'rsatadi. Shuningdek Mn1 atomining *spin-up* magnit mometiga miqdor jihatdan teng ammo yo'nalishi bo'yicha esa qarama-qarshi bo'lgan Mn2 atomining magnit mometlari bir birini to'la kompensatsiya qilib antiferromagnit tartiblanishni hosil qilmoqda. DFT+U natijalari biroz farqli bo'lib *spin-up* va *spin-down* komponentlari orasidagi farq ortib Mn atomlarining magnit momentini qisman oshishiga olib keldi. 1-jadvalda alabandit (α -MnS) mineralining DFT va DFT+U hisoblash natijalariga ko'ra magnit xossalari va elektron zaryadi qiymatlari keltilgan. Elektronlarning zaryad (*Charge*) taqsimoti Mn atomlari uchun DFT da 13.1625 e ga teng. DFT+U hisoblash natijalarida esa bu qiymat 13.1100-13.1101 e gacha kamayadi. Bu shundan dalolat beradiki, DFT+U usuli Mn atomlarining 3d-qobiqlaridagi elektronlarni kuchliroq lokallashtirib, elektronlarni yanada aniqroq taqsimlanishiga olib keladi. Marganets atomlari uchun magnit moment DFT usulida $\pm 4.1117 - 4.1118 \mu_B$ va DFT+U usulida esa $\pm 4.4320 - 4.4321 \mu_B$ qiymatlarga ega. Oltingugurt atomlari juda kichik magnit momentga ega (DFT: ± 0.0587 , DFT+U: $\pm 0.0389 \mu_B$). Bu o'z navbatida oltingugurt atomlarining magnitlanish jarayonida deyarli ishtirok etmasligini ko'rsatadi.

1-jadval

Atom	Zaryad (e)		DFT		DFT+U	
	DFT	DFT+U	Atom birligiga to'g'ri keluvchi magnit moment (μ_B)	Umumiy magnitlanish Bohr mag/cell	Atom birligiga to'g'ri keluvchi magnit moment (μ_B)	Umumiy magnitlanish Bohr mag/cell
Mn1	13.1624	13.1097	4.1117	0.00	4.4320	0.00
Mn1	13.1625	13.1101	4.1118		4.4321	
Mn2	13.1625	13.1100	-4.1118		-4.4321	
Mn2	13.1625	13.1100	-4.1118		-4.4321	
S	4.5858	4.6476	-0.0587		-0.0389	
S	4.5858	4.6476	-0.0587		-0.0389	
S	4.5858	4.6476	0.0588		0.0389	
S	4.5858	4.6476	0.0587		0.0389	

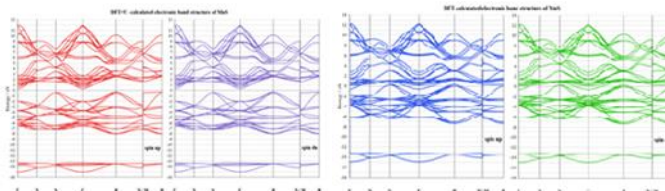
Zona strukturasi (Band structure). Alabandit mineralining magnit va electron tabiatini tushunish uchun elektron strukturasi hisoblab chiqildi. 2-rasmda DFT natijalarining "*spin up*" va "*spin down*" holatlari alohida tasvirlangan. Har ikkala

holatida Fermi energiya sathi bilan kesishmoqda. Bundan α -MnS metall tabiatga ega ekanligi kelib chiqadi ammo tadqiqodlar uni yarim o'tkazgich ekanligini tasdiqlaydi [17]. DFT odatiy holatda Mn 3d- elektronlarining kuchli korelyasiyasini yetarli darajada hisobga olmaganligi sababli o'lchash aniqligi juda kichik bo'lib chiqdi.

DFT+U hisoblashda zona tuzilishi o'zgarishga uchrab zonalar oralig'i oshib taqiqlangan zona vujudga keladi (2-rasm). Hubbard U parametrining kiritilishi (DFT+U) Mn 3d-qobiq elektrtonlari uchun elektron-lokallashish darajasini oshirib E_g hosil bo'lishining asosiy sabablardan biri sifatida keltrish mumkin. DFT+U natijasi DFT ga nisbatan α -MnS ning yarim o'tkazgich va magnit xossalarini aniqroq aks ettirishi ma'lum bo'ldi.

Jadval 2.

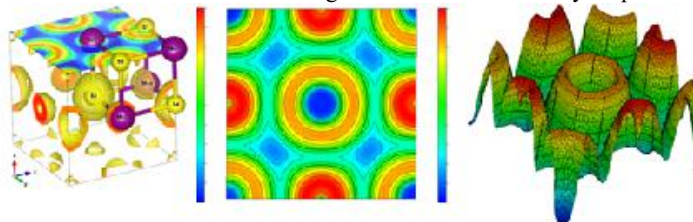
Hisoblash usuli	E_g (eV)		Magnit turi	Material turi
DFT	0 eV		antiferromagnit	metall
DFT+U	U = 4 eV	~0.62 eV	antiferromagnit	yarim o'tkazgich
	U = 5 eV	~0.65 eV		
	U = 6 eV	~0.67 eV		
DFT (Monolayer MnS)	0 eV [17]		antiferromagnit	Metall
DFT+U (Monolayer MnS)	0.68 eV [17]		antiferromagnit	yarim o'tkazgich



2-rasm. Alabanditning energitik zona strukturasini (DFT), (DFT+U).

2-jadvalga ko'ra DFT+U hisoblashlarida kubik α -MnS (B1) uchun $E_g = 0.67$ eV qiymati olindi, agar bu qiymatni bir qatlamli MnS minerali uchun DFT+U usuli yordamida olgan qiymatiga solishtiradigan bo'lsak Y.Z.Abdullahining tadqiqod ishida $E_g = 0.68$ eV [17] ga tengligi bizning tadqiqod ishimizning ishonchligini tasdiqlaydi.

ELF tahlil. DFT+U usulida hisoblangan ELF xarita marganets va oltingugurt atomlari o'rtasida elektronlar seyrak joylashganligini kurish mumkin Bu esa atomlar o'rtasida ion bog'lanish xarakterini namoyon qiladi 3-rasm.



3-rasm. Alabandit (α -MnS) mineralining ELF xaritasi (DFT+U).

Xulosa.

Alabandit mineralining elektron va strukturaviy xossalarini zichlik funksional nazariyasi DFT va DFT+U yondashuvlari asosida tadqiq qilish orqali muhim ilmiy natijalarga olindi. Ikkala holatda ham alabandit mineralining magnit tabiati bir xil antiferromagnit ko'rsatdi, atom magnit momenti esa bir biriga yaqin ammo uning elektron o'tkazuvchanlik tabiatini aniqlashda bir biridan keskin farq qilishi ma'lum bo'ldi. DFT natijalari o'rganilgan namuna uchun $E_g=0$ eV bo'lib, metall tabiatga ega ekanligini ko'rsatdi. DFT+U esa $E_g=0.62-0.67$ eV qiymatga egaligini kursatib yarimo'tkazgich xususiyatlarini namoyon qildi. Demak α -MnS strukturasini uchun DFT+U usulining DFT ga nisbatan aniqligi yuqoriligi namoyon bo'ldi.

α -MnS ning ELF (Electron Localization Function) xaritalariga ko'ra Mn va S atomlari orasida ion bog'lanish dominantlik qilishi anqlandi.

ADABIYOTLAR

1. Г.А. Петраковский, Л.И. Рябинкина, Г.М. Абрамова, Н.И. Киселев, Д.А. Великанов, А.Ф. Бовина. Письма в ЖЭТФ 69, 12, 949 (1999).
2. И.С. Эдельман, О.Б. Романова, Л.И. Рябинкина, Г.М. Абрамова, В.В. Марков. Анизотропия оптического поглощения α -MnS, Физика твердого тела, 2001, том 43, вып. 8
3. Ferretti, A. M., Mondini, S., & Ponti, A. (2016). Manganese sulfide (MNS) nanocrystals: Synthesis, properties, and Applications. In IntechOpen eBooks. <https://doi.org/10.5772/65092>
4. Ferretti, A. M.; Mondini, S.; Ponti, A. Manganese Sulfide (MnS) Nanocrystals: Synthesis, Properties, and Applications. Advances in Colloid Science; Elsevier, 2017; pp 121–123.
5. Alanazi, A. M., McNaughton, P. D., Alam, F., Vitorica-Yrezabal, I. J., Whitehead, G. F. S., Tuna, F., O'Brien, P., Collison, D., & Lewis, D. J. (2021). Structural Investigations of α -MnS Nanocrystals and Thin Films Synthesized from Manganese(II) Xanthates by Hot Injection, Solvent-Less Thermolysis, and Doctor Blade Routes. ACS Omega, 6(42), 27716–27725. <https://doi.org/10.1021/acsomega.1c02907>
6. Yang, X.; Wang, Y.; Wang, K.; Sui, Y.; Zhang, M.; Li, B.; Ma, Y.; Liu, B.; Zou, G.; Zou, B. Polymorphism and Formation Mechanism of Nanobipods in Manganese Sulfide Nanocrystals Induced by Temperature or Pressure. J. Phys. Chem. C 2012, 116, 3292–3297.
7. Yang, X.; Wang, Y.; Sui, Y.; Huang, X.; Cui, T.; Wang, C.; Liu, B.; Zou, G.; Zou, B. Size-Controlled Synthesis of Bifunctional Magnetic and Ultraviolet Optical Rock-Salt MnS Nanocube Superlattices. Langmuir 2012, 28, 17811–17816.

8. Kavcı, O., & Cabuk, S. (2014). First-principles study of structural stability, elastic and dynamical properties of MnS. *Computational Materials Science*, 95, 99–105. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.07.022>
9. L.I. Ryabinkina, G.V. Loseva. *Phys. Stat. Sol. (a)* 80, k179 (1983).
10. Gilbert, T. L. (1975). Generalized Kohn-Sham system in one-matrix functional theory. *Physical Review B*, 12(12), 2111–2113.
11. Brockherde, F., Vogt, L., Li, L., Tuckerman, M. E., Burke, K., & Müller, K. -R. (2017). By-passing the Kohn-Sham equations with machine learning. *Journal of Chemical Physics*, 146(16), 164105.
12. Jain A., Ong S.P., Hautier G. et al. The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation // *APL Materials*. – 2013. – Vol. 1. – P. 011002. DOI: [10.1063/1.4812323], <https://doi.org/10.1063/1.4812323>
13. Materials Project Database. MnS (mp-2065, Fm3m). URL:(<https://legacy.materialsproject.org/materials/mp-2065>) (access date: 20.02.2025).
14. Giannozzi, P., et al. (2017). Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of Physics Condensed Matter*, 29(46), 465901. <https://doi.org/10.1088/1361-648x/aa8f79>
15. C. P. Grimes, F. J. Himpsel, and G. M. S. Kuo, "Electron localization function (ELF) and its role in understanding chemical bonding in transition metal compounds," *J. Chem. Phys.*, vol. 120, no. 14, pp. 6521-6529, Apr. 2004, <https://doi.org/10.1063/1.1704304>.
16. K. Momma and F. Izumi, "VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data," *J. Appl. Crystallogr.*, 44, 1272-1276 (2011).
17. Abdullahi, Y. Z. (2024). Role of inter-site hubbard interactions in MnS Monolayer: DFT+U+V investigation. *GAZI UNIVERSITY JOURNAL OF SCIENCE*, 37(3), 1552–1559. <https://doi.org/10.35378/gujs.1307490>



UDK: 530.12:531.51

Sojida MANNOBOVA,
Student at National University of Uzbekistan
E-mail: sojidamannabova2208@gmail.com
Gulzoda RAKHIMOVA,
Tashkent State Technical University
Nozima JURAEVA,
National Research University TIAME

Based on the review of professor A.Abdujabbarov, Ulugh Beg Astronomical Institute

A GENERIC STUDY OF THIN-SHELL VIA REGULAR CHARGED BLACK HOLE

Annotation

We present a thin-shell in the background of a regular charged static black hole solution in the presence of T-duality effects for the Einstein-Maxwell system. The thin-shells are created by aligning the inner and outer surfaces using the well-established Visser method of cutting and pasting. We manufacture two varieties of thin-shells an outer regular charged black hole from T-duality and different choices of inner manifolds named: 1. Thin-shell (inner flat spacetime), 2. Thin-shell Garvastars (inner de Sitter spacetime).
Key words: Thin-shell wormholes, Gravastar, T-Duality, Stability analysis.

ОБЩЕЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТОНКОЙ ОБОЛОЧКИ ЧЕРЕЗ РЕГУЛЯРНУЮ ЗАРЯЖЕННУЮ ЧЕРНУЮ ДЫРУ

Аннотация

Мы представляем тонкую оболочку в фоне регулярного заряженного статического решения черной дыры с учетом эффектов Т-дуальности в системе Эйнштейна-Максвелла. Тонкая оболочка формируется путем согласования внутреннего и внешнего многообразий с использованием известного метода Виссера «вырезать и вставить». Мы получаем два типа тонких оболочек с внешней регулярной заряженной черной дырой из Т-дуальности и различными выборками внутренних многообразий: 1. Тонкая оболочка (внутреннее плоское пространство-время), 2. Тонкая оболочка гравастаров (внутреннее пространство-время де Ситтера).

Ключевые слова: тонкие оболочки кротовых нор, гравастар, Т-дуальность, анализ устойчивости.

MUNTAZAM ZARYADLANGAN QORA TUYNUK ORQALI UMUMIY YUPQA QOBIQ TADQIQOTI

Annotatsiya

Biz Eynshteyn-Maksvell sistemasida T-duallik ta'sirlarini hisobga olgan holda, muntazam zaryadlangan statsionar qora tuynuk fonida yupqa qobiqni taqdim etamiz. Yupqa qobiq Visserning mashhur "kesib-yopishtirish" usuli orqali ichki va tashqi manifoldlarni moslashtirish orqali hosil qilinadi. Biz T-duallikdan olingan tashqi muntazam zaryadlangan qora tuynuk va turli ichki manifold tanlovlari bilan ikki turdagi yupqa qobiqlarni hosil qilamiz: 1. Yupqa qobiq (ichki tekis fazo-vaqt), 2. Yupqa qobiq gravastarlar (ichki de Sitter fazo-vaqti).

Kalit so'zlar: yupqa qobiq chuqurchalar, gravastar, T-duallik, barqarorlik tahlili.

Introduction. Black holes (BHs) stand out as particularly remarkable manifestations of strong-gravitational fields in contemporary research. Black holes possess an event horizon from which nothing can escape because of the immense gravitational pull, while simultaneously absorbing everything within their vicinity. Quantum fluctuations have consistently yielded miraculous consequences regarding the physical properties of BH geometries. The presence of singularities represents a fundamental challenge in BH physics.

Incorporating an NLED Lagrangian ensures a singularity cut-off in the context of the magnetic charge of BHs [1, 2]. The literature also conquered this limitation by a process of BH engineering, i.e., considering regular BH models with a de Sitter central core [3]-[6].

A vital breakthrough in removing the singularity comes with a family of regular BHs developed in a string-inspired manner by noncommutative geometry [7, 8]. Apart from the singularity eradication, these BHs present an interesting scenario for the final phase of evaporation. Instead of a divergent Hawking emission, there exists a phase characterized by a gradual cooling towards a zero-temperature extremal configuration, even in the absence of charge and angular momentum [9]. Interestingly, noncommutative effects undergo an equivalence framework to a non-local gravity that softens the curvature singularity [10]-[14].

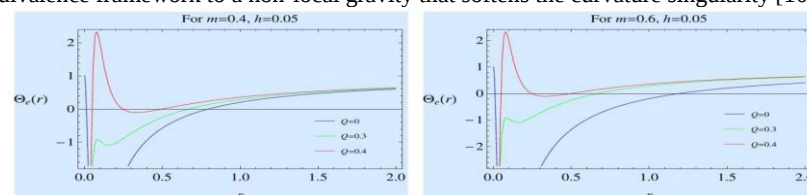


FIG. 1: Graphical analysis of metric function of charged BH from T-duality verses r with suitable physical parameters.

THIN-SHELL WITH EXTERIOR REGULAR CHARGED BLACK HOLE FROM T-DUALITY. This section is devoted to analysing the thin-shell formalism for charged black holes (BHs) arising from T-duality. The line element for the regular charged BH resulting from T-duality is given by

$$ds^2 = -\Theta_e(r)dt^2 + \Theta_e(r)^{-1}dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2) \quad (1)$$

where

$$\Theta_e(r) = \frac{Q^2 r^2 F(r)}{(h^2 + r^2)^2} - \frac{2mr^2}{(h^2 + r^2)^{3/2}} + 1, \quad (2)$$

with

$$F(r) = \frac{3\pi}{16h} \sqrt{h^2 + r^2} \left(1 - \frac{(h^2 + r^2)^{3/2} \left(2 \tan^{-1} \left(\frac{r}{h} \right) \right)}{\pi r^3} \right) + \frac{3h^2}{8r^2} + \frac{5}{8} \quad (3)$$

Here, m represents the mass of Schwarzschild BH, Q is the charge, h denotes the zero point length. $F(r)$ is monotonically increasing function and,

$$F(r) = \begin{cases} 3\pi/16, & r \ll h \\ 1, & r \gg h \end{cases}$$

i.e., $3\pi/16 < F(r) < 1$.

It should be pointed out that the metric can be equivalent to the following solutions: 1) Bardeen metrics if the length is redefined as $h \rightarrow Q, 2$) Ayon-Beato and Garcia spacetime by considering $h \rightarrow Q$ and $F(r) = 1$ everywhere.

A. Thin-Shell. Now, we examine $(2+1) - D$ a charged thin-wall, represented by Σ , with its radius $r = b(\tau)$ (τ being the proper time). The metric for these spaces can be expressed :

$$ds^2 = -\Theta_n(r)dt^2 + (\Theta_n(r))^{-1}dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2) \quad (4)$$

The quantitative measure for these two regions can be summarized as follows

$$\Theta_i(r) = 1, \Theta_e(r) = \frac{F(r)(Q^2 r^2)}{(h^2 + r^2)^2} - \frac{2mr^2}{(h^2 + r^2)^{3/2}} + 1 \quad (5)$$

In the case of a thin shell, the metric function corresponds to a time-like two-dimensional sphere, whose coordinates can be expressed as $y^i = (\tau, \theta, \phi)$:

$$ds^2 = h_{ij}dy^i dy^j = -d\tau^2 + b^2 d\theta^2 + b^2 \sin^2\theta d\phi^2 \quad (6)$$

The constituent elements of the thin-shell can be expressed as:

$$S_t^\tau \equiv \rho(b) = -\frac{1}{4\pi b} (\chi_e(b) - \chi_i(b)) \quad (7)$$

$$S_\theta^\theta = S_\phi^\phi \equiv \mathfrak{P}(b) = \frac{-\chi_i(b) + \chi_e(b)}{8\pi b} + \frac{2\dot{b} + \Theta'_e(b)}{16\pi \chi_e(b)} - \frac{2\dot{b} + \Theta'_i(b)}{16\pi \chi_i(b)} \quad (8)$$

where

$$\chi_i(b) = \sqrt{\Theta_i(b) + \dot{b}^2}, \chi_e(b) = \sqrt{\Theta_e(b) + \dot{b}^2} \quad (9)$$

$\rho(b)$ and $\mathfrak{P}(b)$ -the energy density and the tangential pressure are represented by the dot and dash, respectively, which correspond to the derivatives with respect to the proper time and the radial coordinate. Here, subindex zero belongs to the physical entities at the static state of thin-shell, i.e., $b = b_0$. Employing equations (7) and (9), we establish connections between the gravitational mass and the mass of the shell.

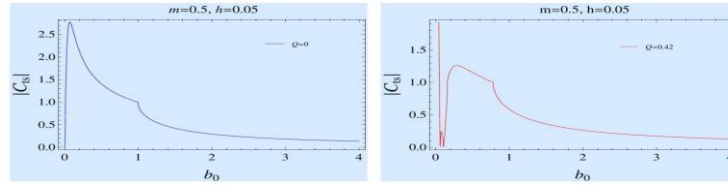


FIG. 2: The compactness of thin-shell with exterior Bardeen (left plot) and charged BHs from T-duality versus equilibrium shell radius.

We choose a compactness parameter for the stable arrangement, which is calculated as the ratio of the shell's mass to its radius., i.e., $C_{ts} = M/b_0$. The compactness parameter yields

$$C_{ts} = 1 - \frac{\sqrt{b_0^2(b_0^2 + h^2)^2 (b_0^4 + b_0^2 Q^2 F(b_0) + 2b_0^2 (h^2 - m\sqrt{b_0^2 + h^2}) + h^4)}}{b_0(b_0^2 + h^2)^2} \quad (10)$$

Fig (2) shows the behaviour of compactness for allowed values of parameters. We can conclude that the thin-shell is less compact near the origin for exterior Bardeen BH while more compact near the origin for the case of charged BH from T-duality. The compactness tends to decrease as the shell radius increases.

B. Thin-Shell Gravastars. In this subsection we utilize Visser's cut-and-paste approach to form a charged thin-shell gravastar with the inner manifold as a de Sitter spacetime and the exterior manifold as charged BH from T-duality. We joined the interior and exterior regions at the timelike hypersurface known as a gravastar shell with radius $r = b$.

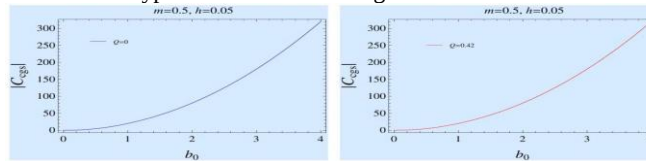


FIG. 3: The compactness of the thin-shell gravastars with exterior Bardeen (left plot) and charged BHs from T-duality versus equilibrium shell radius.

here $\Theta_i(r)$ is the metric function of de Sitter geometry with α is a nonzero positive constant.

The surface stresses for thin-shell gravastar at equilibrium state can be written as

$$\rho_0 = -\frac{1}{4\pi b_0} \left(\sqrt{\frac{F(b_0)(Q^2 b_0^2)}{(h^2 + b_0^2)^2} - \frac{2mb_0^2}{(h^2 + b_0^2)^{3/2}}} + 1 - \sqrt{1 - \frac{b_0^2}{\alpha^2}} \right) \quad (11)$$

$$\mathfrak{P}_0 = \frac{4b_0^2 - 2\alpha^2}{8\pi b_0 \alpha^2 \sqrt{1 - \frac{b_0^2}{\alpha^2}}} + \frac{b_0 \left(\frac{2b_0 Q^2 F(b_0)}{(b_0^2 + h^2)^2} + \theta_\epsilon(b_0) \right) - \frac{4b_0^2 m}{(b_0^2 + h^2)^{3/2}} + 2}{8\pi b_0 \sqrt{\frac{b_0^2 Q^2 F(b_0)}{(b_0^2 + h^2)^2} - \frac{2b_0^2 m}{(b_0^2 + h^2)^{3/2}} + 1}} \quad (12)$$

We define the compactness of thin-shell gravastar by $C_{cgs} = 4\pi b^2 \rho(b)$ with the subindex denoting charged thin-shell gravastar. Fig (3) illustrates that the thin-shell gravastar is less compact near the origin, and compactness is enhanced as the shell radius increases for both choices of exterior geometries.

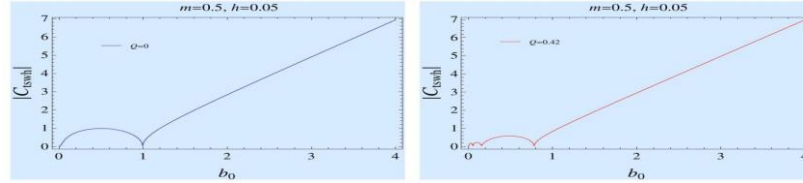


FIG. 4: The compactness of thin-shell WHs with exterior Bardeen (left plot) and charged BHs from T-duality versus equilibrium shell radius.

Conclusions. In this work, we have studied the thin-shell theory with three different options for its inner geometries, namely flat, de Sitter, and regular charged black hole obtained from T-duality while the latter has been chosen as an exterior geometry for all three cases. Here, the following approaches have been utilized through investigating: First, all configurations are developed using a cut-and-paste approach, which is a valuable method for eliminating singularities and event horizons in the constructed structure; Furthermore, the elements of the stress-energy tensor are calculated using a simplified version of Einstein's field equations on the surface.

We have employed the barotropic and generalized Chaplygin gas models to analyze the stable and unstable structures by determining the critical values of Π_{20} for each choice of inner manifolds.

REFERENCES

1. Ayon-Beato, E. and Garcia, A., The Bardeen model as a nonlinear magnetic monopole, *Physics Letters. B* 493(2000)149.
2. Ayon-Beato, E. and Garcia, A., Regular black hole in general relativity coupled to nonlinear electrodynamics, *Physical Review Letters*. 80(1998)5056.
3. Aurilia, A. and et al., Evolution of bubbles in a vacuum, *Phys. Rev. D* 40(1989)2511.
4. Frolov, V.P., Markov, M.A. and Mukhanov, V.F, Black holes as possible sources of closed and semiclosed worlds, *Physical Reviews D* 41(1990)383.
5. Dymnikova, I., Vacuum nonsingular black hole, *General Relativistic Gravitation*. 24(1992)235.
6. Hayward, S.A., Formation and evaporation of nonsingular black holes, *Physical Review Letters*. 96(2006)031103.
7. Nicolini, P., Smailagic, A. and Spallucci, E., Noncommutative geometry inspired Schwarzschild black hole, *Physics Letters. B* 632(2006)547.
8. Nicolini, P. and Spallucci, E.: *Class. Quantum Grav.* Noncommutative geometry-inspired dirty black holes, 27(2010)015010.
9. Nicolini, P. and Winstanley, E., Hawking emission from quantum gravity black holes, *J. High Energy Physics*. 11(2011)075.
10. Modesto, L., Moffat, J.W. and Nicolini, P., Black holes in an ultraviolet complete quantum gravity, *Physics Letters. B* 695(2011)397.
11. Isi, M., Mureika, J. and Nicolini, P., Self-completeness and the generalized uncertainty principle, *J. High Energy Physics*. 1311(2013)139.
12. Nicolini, P. and Spallucci, E., Holographic screens in ultraviolet self-complete quantum gravity, *Adv. High Energy Physics*. 2014(2014)805684.
13. Frolov, V.P., Zelnikov, A. and de Paula Netto, T., Spherical collapse of small masses in the ghost-free gravity, *J. High Energy Physics*. 06(2015)107.
14. Frassino, A.M., Koppel, S. and Nicolini, P., Geometric Model of Black Hole Quantum N-portrait, *Extradimensions and Thermodynamics, Entropy* 18(2016)181.



UDK: 537.621.5

Jamoliddin MURODOV,
*O'zbekiston Milliy universiteti Nanotexnologiyalarni rivojlantirish markazi tayanch doktoranti,
Toshkent texnika universiteti assistenti
E-mail: jamoliddinmilliy@gmail.com*

Noiba BOTIROVA,
O'zbekiston Milliy universiteti Nanotexnologiyalarni rivojlantirish markazi tayanch doktoranti

Azamatbek ARSLANOV,
O'zbekiston Milliy universiteti o'qituvchisi

Shavkat YULDASHEV,
O'zbekiston Milliy universiteti Nanotexnologiyalarni rivojlantirish markazi laboratoriya mudiri

Toshkent texnika universiteti O'zbek-Yapon yoshlar markazi katta ilmiy xodimi R. Nusretov taqrizi ostida

TAILORING MEMRISTIVE BEHAVIOR IN NIO THIN FILMS VIA POST-ANNEALING TIME AND ELECTRODE ENGINEERING

Annotation

Nickel oxide (NiO) thin films were synthesized by the sol-gel spin-coating method and annealed at 400 °C for 2 and 5 hours to investigate the effect of post-annealing time on their memristive behavior. Silver (Ag) and indium (In) were employed as top electrodes. The optical bandgap was determined via Tauc plot analysis using reflectance data. Structural properties were examined by X-ray diffraction (XRD), and the memristive switching behavior was characterized by current-voltage (I-V) measurements using a Keithley-2460 SourceMeter. It was found that both annealing time and electrode type significantly affect the switching behavior and material properties.

Key words: NiO, memristor, sol-gel.

ФОРМИРОВАНИЕ МЕМРИСТИВНОГО ПОВЕДЕНИЯ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ NiO ПУТЕМ ИЗМЕНЕНИЯ ВРЕМЕНИ ОТЖИГА И ВЫБОРА МАТЕРИАЛА ЭЛЕКТРОДА

Аннотация

Тонкие пленки оксида никеля (NiO) были синтезированы методом золь-гель центрифугирования и подвергнуты отжигу при 400 °C в течение 2 и 5 часов для изучения влияния времени постотжига на их мемристивное поведение. В качестве верхних электродов были использованы серебро (Ag) и индий (In). Оптическая ширина запрещенной зоны была определена с помощью анализа графиков Тауца на основе данных отражения. Структурные свойства исследовались методом рентгеновской дифракции (XRD), а мемристивное переключение - с помощью измерений ток-напряжение (I-V) с использованием прибора Keithley-2460 SourceMeter. Было установлено, что как время отжига, так и тип электрода значительно влияют на характеристики переключения и свойства материала.

Ключевые слова: NiO, мемристор, золь-гель.

QIZDIRISH VA ELEKTROD MATERIALINI BOSHQARISH ORQALI NiO YUPQA QAVATLARIDA MEMRISTIV XATTI-HARAKATNI SHAKLLANTIRISH

Annotatsiya

Nikel oksid (NiO) yupqa qatlamlari sol-gel aylantirish (spin-coating) usuli bilan sintez qilinib, 400 °C da 2 va 5 soat davomida termik ishlav berildi. Post-annealing (qayta qizdirish) vaqtining memristiv xatti-harakatga ta'sirini o'rganish maqsad qilingan. Yuqori elektrod sifatida kumush (Ag) va indiy (In) materiallari ishlatildi. Optik energiya oralig'i (bandgap) yutilish spektridan (reflectance) olingan Tauc grafiklari yordamida aniqlandi. Struktura xossalari rentgen difraksiyasi (XRD) orqali o'rganildi, memristiv xatti-harakat esa Keithley-2460 SourceMeter qurilmasi yordamida tok-kuchlanish (I-V) o'lchovlari orqali baholandi. Tadqiqot natijalari shuni ko'rsatdiki, qizdirish vaqti hamda elektrod turi o'tish xatti-harakati va material xossalari sezilarli darajada ta'sir qiladi.

Kalit so'zlar: NiO, memristor, sol-gel.

Introduction. Nickel oxide (NiO) is considered a promising material for resistive switching (memristive) devices due to its wide bandgap, chemical stability, and simple stoichiometry [1]. Memristive devices, capable of non-volatile resistance switching, are key candidates for next-generation non-volatile memory (NVM) technologies owing to their scalability, low power consumption, and CMOS compatibility [2].

Among synthesis methods, the sol-gel spin-coating technique offers a simple and cost-effective approach to fabricate uniform NiO thin films [3]. Post-annealing critically affects film properties such as crystallinity, defect density, and grain size, thereby influencing switching behavior [4]. In particular, variations in annealing time can alter oxygen vacancy concentrations and metallic Ni cluster formation, which are central to the switching mechanism [5]. Additionally, electrode material selection impacts Schottky barrier formation, filament dynamics, and switching stability [6]. Ag electrodes, with high mobility, actively participate

in filament formation, while In electrodes offer relatively inert behavior, affecting switching mechanisms differently [7]. In this work, NiO thin films were synthesized by sol-gel spin-coating and annealed at 400 °C for 2 and 5 hours to investigate the effects of annealing duration on structural, optical, and memristive properties. The influence of Ag and In top electrodes on switching behavior was also analyzed, providing insights into optimizing NiO-based memristive devices for future memory and neuromorphic applications.

Literature review. NiO thin films have been widely studied for memristive applications due to their wide bandgap (~3.6–4.0 eV) and intrinsic p-type conductivity from nickel vacancies [8]. Deposition methods like PLD, sputtering, CVD, and sol-gel spin-coating have been utilized to achieve tunable film properties [9].

Resistive switching is primarily attributed to the formation and rupture of conductive filaments comprising oxygen vacancies and metallic Ni clusters [10]. Post-deposition annealing significantly affects film crystallinity and defect states [11]. Moderate annealing (300–500 °C) enhances crystallinity, reduces organic residues, and optimizes vacancy concentrations, thereby modulating switching behavior [12].

Electrode engineering is critical; mobile metals such as Ag and Cu promote filamentary switching, whereas inert electrodes like InGa and Au encourage interface-type switching [13], [14]. The electrode/oxide interface influences switching voltages, stability, and endurance [15]. Simultaneous optimization of electrode material and annealing conditions is essential. Shorter annealing preserves higher vacancy levels, favoring filament conduction, while prolonged annealing enhances crystallinity and stabilizes switching [16]. Proper control over these parameters is key to advancing reliable, low-power NiO-based memristive devices.

Research Methodology. In this study, a systematic approach was employed to fabricate and characterize nickel oxide (NiO) thin films with tailored memristive behavior through precise control of post-annealing time and electrode engineering.

First, high-purity reagents were selected for the sol-gel synthesis process. Nickel acetate tetrahydrate ($\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, 99%, Sigma-Aldrich) served as the nickel source, dissolved in 2-methoxyethanol ($\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$, $\geq 99.3\%$, Sigma-Aldrich) with monoethanolamine (MEA, $\text{C}_2\text{H}_7\text{NO}$, 98%, Sigma-Aldrich) added as a complexing agent in a 1:1 molar ratio with nickel acetate. The precursor solution was magnetically stirred at 60 °C for one hour to achieve a homogeneous and transparent sol, and subsequently aged for 36 hours at room temperature to stabilize the chemical composition.

The sol was then deposited onto pre-cleaned monocrystalline silicon (Si) substrates using a spin-coating method at 3000 rpm for 30 seconds. Following each spin-coating cycle, the films were dried at 100 °C for 10 minutes and pre-heated at 275 °C for 15 minutes to remove organic residues. This deposition-drying cycle was repeated six times to achieve the desired film thickness, ensuring uniformity and controlled growth.

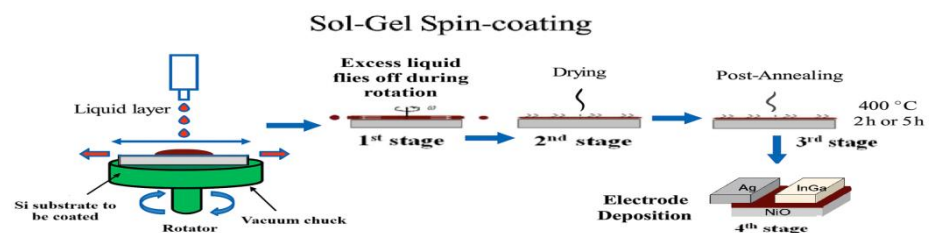
After deposition, post-annealing was performed in a muffle furnace at 400 °C for different durations - 2 hours and 5 hours - to systematically study the impact of thermal treatment on the structural, optical, and electrical properties. The samples were labeled as NiO-2h and NiO-5h, respectively.

For device fabrication, metal-insulator-metal (MIM) structures were assembled by depositing top electrodes of silver (Ag) and indium (In) onto the annealed NiO thin films, while the Si substrate served as the bottom electrode.

Comprehensive material characterization techniques were employed to analyze the resulting films. X-ray diffraction (XRD) measurements with Cu K α radiation ($\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$) were used to determine the crystallographic structure and phase purity. Memristive switching behavior was evaluated by current-voltage (I-V) measurements using a Keithley 2460 SourceMeter at room temperature, applying a double-sweep voltage from -5 V to +5 V.

Fig.1. NiO film preparation process scheme

Analysis and results. The structural, optical, and memristive properties of the NiO thin films were comprehensively analyzed to understand the effects of post-annealing time and electrode material on device performance. X-ray diffraction (XRD) patterns confirmed the polycrystalline nature of the NiO films, exhibiting reflections corresponding to the (111), (200), (202), (311), and (220) planes, characteristic of the cubic NiO phase (JCPDS Card No. 47-1049). Films annealed for 5 hours exhibited sharper and more intense diffraction peaks compared to the 2-hour annealed films, indicating enhanced crystallinity and larger grain growth due to the extended thermal treatment. Improved crystalline quality is beneficial for achieving better electrical properties in memristive devices, as it reduces defect density and enhances filament stability during resistive switching.



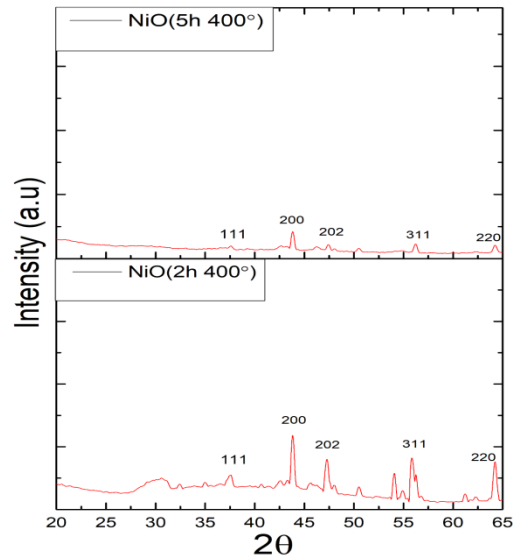


Fig.2- XRD patterns of NiO thin films deposited by sol-gel method on Si substrates and annealed at 400 °C for 2 and 5 hours

The optical bandgaps of the films were determined from Tauc plot analysis based on reflectance measurements. Direct bandgap transitions were observed for both samples, with extracted bandgap values of approximately 3.38 eV for the 2-hour annealed sample and 3.44 eV for the 5-hour annealed sample. The slight increase in bandgap with longer annealing time suggests reduced defect densities and improved structural ordering within the NiO lattice. Enhanced bandgap values further support the improved crystallinity indicated by the XRD results.

Current-voltage (I - V) measurements were performed to evaluate the memristive switching behavior of the fabricated devices. Typical bipolar resistive switching (BRS) behavior was observed in all devices. NiO films with Ag electrodes exhibited higher ON-state current levels and better switching stability compared to devices using In electrodes.

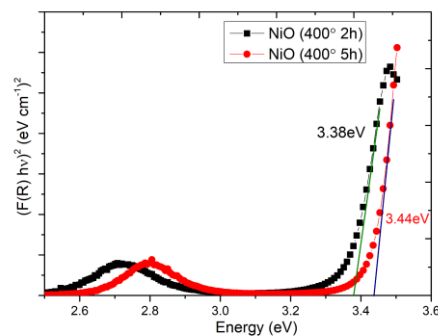


Fig.3- Tauc plots for sol-gel derived NiO films annealed at 400 °C for 2h and 5h.

NiO films with Ag electrodes exhibited higher ON-state current levels and better switching stability compared to devices using In electrodes. The improved performance in Ag-based devices is attributed to the higher mobility of Ag ions, which facilitates the formation and rupture of conductive filaments more efficiently. Moreover, films annealed for 5 hours demonstrated superior memristive characteristics, including larger memory windows, lower switching voltages, and improved endurance. This can be attributed to enhanced crystallinity and reduced structural defects, which enable more stable and reproducible filament formation during resistive switching cycles.

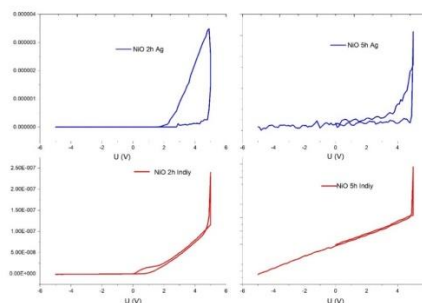


Fig.3- (I–V) comparison of NiO films with In and Ag electrodes after annealing, highlighting switching behavior.

Conclusion. In this study, NiO thin films were successfully synthesized via the sol–gel spin-coating method, and the effects of post-annealing time and electrode material on their structural, optical, and memristive properties were systematically investigated. XRD analysis confirmed the formation of polycrystalline NiO with enhanced crystallinity and grain growth for films annealed for 5 hours. Optical characterization revealed that prolonged annealing slightly increased the optical bandgap, suggesting reduced defect densities and improved structural ordering.

Memristive devices fabricated with Ag and In electrodes exhibited typical bipolar resistive switching behavior. Devices with Ag electrodes demonstrated superior switching stability and higher ON-state currents compared to those with In electrodes. Moreover, films annealed for longer durations exhibited enhanced memristive performance, including larger memory windows, better endurance, and more stable filament formation.

These results highlight the critical role of post-annealing treatment and electrode engineering in tailoring the performance of NiO-based memristive devices. Precise optimization of thermal processing conditions and electrode material selection can significantly enhance device reliability and functionality, offering valuable insights for the future development of high-performance resistive switching memories and neuromorphic computing applications.

REFERENCES

1. S. Tappertzhofen, D. Valov, and R. Waser, "Dependence of the electrical switching behavior in Ag/oxide-based memristive systems on the electrode material," *Nanotechnology*, vol. 23, no. 14, p. 145703, 2012.
2. D. Ielmini and R. Waser, *Resistive Switching: From Fundamentals of Nanoionic Redox Processes to Memristive Device Applications*, Wiley-VCH, 2015.
3. T. Chen, C. Liao, J. Liu, and L. Wang, "Preparation of NiO thin films by sol–gel method and their application in solar cells," *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 509, no. 5, pp. 2316–2319, 2011.
4. Z. Wang, H. Wu, G. Burr, et al., "Resistive switching materials for information processing," *Nature Reviews Materials*, vol. 5, no. 3, pp. 173–195, 2020.
5. S. Yu, "Resistive random access memory (RRAM) materials and devices: Modeling and applications," *Materials Today*, vol. 18, no. 5, pp. 252–264, 2015.
6. M. Lanza, "A review on resistive switching in high-k dielectrics: A nanoscale point of view using conductive atomic force microscope (CAFM)," *Materials*, vol. 7, no. 3, pp. 2155–2182, 2014.
7. J. Yao, Z. Sun, L. Zhong, et al., "Resistive switching in nanogap systems on SiO₂ substrates," *Nano Letters*, vol. 10, no. 10, pp. 4105–4110, 2010.
8. C. H. Ahn, J. W. Lee, and H. J. Lee, "Growth and characterization of p-type NiO thin films by sputtering," *Journal of Applied Physics*, vol. 92, no. 6, pp. 3684–3687, 2002.
9. Z. Zhang, M. Zhu, and Y. Li, "Preparation of NiO thin films for resistive switching memories," *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, vol. 23, no. 3, pp. 636–640, 2012.
10. D. Lee, S. Lee, and H. Hwang, "Resistance switching of NiO thin films for nonvolatile memory applications," *Applied Physics Letters*, vol. 90, no. 12, p. 122104, 2007.
11. M. H. Lee, J. W. Park, and S. H. Kim, "Annealing effect on electrical properties of NiO thin films," *Journal of the Korean Physical Society*, vol. 56, no. 1, pp. 132–136, 2010.
12. R. Waser and M. Aono, "Nanoionics-based resistive switching memories," *Nature Materials*, vol. 6, no. 11, pp. 833–840, 2007.
13. J. Yao, Z. Sun, and L. Zhong, "Resistive switching in nanogap systems on SiO₂ substrates," *Nano Letters*, vol. 10, no. 10, pp. 4105–4110, 2010.
14. G. Bersuker, "Metal oxide resistive memory switching mechanism based on conductive filament properties," *Journal of Applied Physics*, vol. 110, no. 12, p. 124518, 2011.
15. S. Yu, "Resistive random access memory (RRAM) materials and devices: Modeling and applications," *Materials Today*, vol. 18, no. 5, pp. 252–264, 2015.
16. Z. Wang, H. Wu, G. Burr, et al., "Resistive switching materials for information processing," *Nature Reviews Materials*, vol. 5, no. 3, pp. 173–195, 2020.



UDK: 52:37.016:004.9

Yulduz MUSLIMOVA,
Nizomiy nomidagi TDPU dotsenti, f.-m.f.n
E-mail: yulduzmuslimova2020@gmail.com

TDPU dotsenti, f.-m.f.n A.Uzoqov taqrizi asosida

USING DIGITAL TECHNOLOGIES IN TEACHING ASTRONOMY BASED ON THE COMPETENCY-BASED APPROACH

Annotation

This article explores the issues of teaching astronomy through modern digital technologies. It demonstrates that the didactic principles of digital education contribute to a deeper acquisition of astronomical knowledge. The study analyzes the potential of virtual laboratories, interactive models, mobile applications, and online platforms, emphasizing their role in enhancing the quality of education.

Key words: Astronomy, digital technologies, competency-based approach, didactic principles, virtual laboratories, interactive models, mobile applications, online learning, modern education, Personalized learning, scientific thinking, collaborative learning.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЦИФРОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ПРЕПОДАВАНИИ АСТРОНОМИИ НА ОСНОВЕ КОМПЕТЕНТНОСТНОГО ПОДХОДА

Аннотация

В данной статье рассматриваются вопросы преподавания астрономии с использованием современных цифровых технологий. Показано, что дидактические принципы цифрового образования способствуют глубокому усвоению астрономических знаний. В статье проанализированы возможности виртуальных лабораторий, интерактивных моделей, мобильных приложений и онлайн-платформ, а также их роль в повышении качества образования. **Ключевые слова:** Астрономия, цифровые технологии, компетентностный подход, дидактические принципы, виртуальные лаборатории, интерактивные модели, мобильные приложения, онлайн-обучение, современное образование, научное мышление, совместное обучение.

KOMPETENSIYAVIY YONDASHUV ASOSIDA ASTRONOMIYANI O'QITISHDA RAQAMLI TEXNOLOGIYALARDAN FOYDALANISH

Annotatsiya

Ushbu maqolada astronomiya fanini zamonaviy raqamli texnologiyalar orqali o'qitish masalalari yoritilgan. Raqamli ta'limning didaktik tamoyillari astronomik bilimlarni chuqur egallashga xizmat qilishi ko'rsatilgan. Maqolada virtual laboratoriyalar, interaktiv modellar, mobil ilovalar va onlayn platformalarning imkoniyatlari o'rganilib, ta'lim sifatini oshirishdagi o'rni tahlil qilingan.

Kalit so'zlar: Astronomiya, astrofizika, raqamli texnologiya, kompetensiyaviy yondoshuv, didaktik tamoyillar, virtual laboratoriyalar, interaktiv modellar, mobil ilovalar, onlayn ta'limizlanishga yo'naltirish, hamkorlikda o'rganish.

Kirish. O'zbekiston Respublikasi Prezidenti Shavkat Mirziyoyev 2020 yil 5 oktyabr kuni "Raqamli O'zbekiston – 2030" strategiyasini tasdiqlash va uni samarali amalga oshirish chora-tadbirlari to'g'risidagi farmonni imzoladi. Farmonda raqamlashtirish masalasiga alohida e'tibor qaratilgan. Jumladan, elektron ta'lim platformalarini yaratish, raqamli o'quv materiallarini ishlab chiqish, onlayn kurslar va masofaviy o'qitishni kengaytirish masalalariga alohida e'tibor qaratilgan[1]. Bu esa o'quv jarayonida raqamli texnologiyalardan samarali foydalanishga va bu orqali talabalarga astronomiyadan bilim olish, masofaviy darslar va interaktiv ta'lim resurslardan foydalanish imkoniyatlarini taqdim etadi.

Mavzuga oid adabiyotlar tahlili. Ta'lim jarayonida raqamli texnologiyalardan foydalanish bo'yicha J.B. Rey, I.N. Fierro, A. Zangara, P. Freedom, I. Kmecova, S. Arunkum va boshqalarning ishlarida ko'rsatib berilgan[2]. Shuningdek, o'quv jarayonida raqamli texnologiyalardan foydalanish bu talabalarning yuqori malakali, raqobatbardosh mutaxassis bo'lib yetishishiga imkon beradi. O'qituvchilar bilim oluvchilarning individual imkoniyatlarini hisobga olgan holda ta'lim jarayonida raqamli texnologiyalardan foydalanishlari lozim[3]. Raqamli ta'limning oliy talim tizimida o'rni beqiyos bo'lib, bunda talabalar faqat darsni o'zlashtiribgina qolmay, balki bir vaqtning o'zida, o'z faoliyatini nazorat qilishini, o'zini o'zi boshqarishini, muammolarga fikr bildirishni o'rganadi[4]. V.I.Kudashov, S.I.Chernix, M.P.Yatsenko va D.V.Raxinskiylar axborot texnologiyalari ta'sirida ta'lim jarayonlarini o'zgartirish bo'yicha tadqiqotlar olib borishgan [5]. Ta'lim jarayoniga raqamli texnologiyalarni joriy etish, ularni pedagoglarning professional kasbiy faoliyatini namoyon etishlari bilan uyg'unlashtirish masalalari U.Sh.Begimqulov[6], A.A.Abdugodirovlarning [7] ilmiy ishlarida ko'rsatib o'tilgan hamda M.E.Mamarajabovning raqamlashtirilgan ta'lim sharoitida bo'lajak o'qituvchilarning kasbiy-pedagogik tayyorgarligini takomillashtirish bo'yicha ilmiy tadqiqot ishlarida tahlil qilib berilgan [8]. Oliy ta'lim muassasalarida astronomiyadan ta'lim sifatini oshirish bo'yicha S.N.Nuriddinov [9], M.M. Mamadazimov[10], M.Djorayev[11] va I.Sattarovlarning [12] ilmiy asarlarida, shuningdek, uluksiz ta'limda ta'lim texnologiyalarini qo'llash bo'yicha B.S.Abdullayeva[13], R.G.Isyanov [14] va N.A.Muslimovlarning[15] ilmiy asarlarida keltirib o'tilgan. B. D. Sattarova

astronomiya o'qitish nazariyasi va metodikasi bo'yicha, shuningdek, astronomiya kursida zamonaviy axborot texnologiyalarini qo'llash bo'yicha, A.M.Tillaboyev astronomiya kursini o'qitishda zamonaviy ilmiy-tadqiqot natijalarini o'quv jarayonida tadbqiq etish bo'yicha ilmiy tadqiqot ishlarini olib borishgan [16,17].

Tadqiqot metodologiyasi. Raqamli texnologiyalarni didaktik talablar asosida moslashtirib o'quv jarayoniga tatbiq qilish ta'lim sifatini oshirishda juda katta ahamiyatga ega [18,19,20,21]. Raqamli ta'limning didaktik tamoyillari izchil ravishda an'anaviy didaktik o'qitish tamoyillariga tayanadi, ularni raqamlashtirilgan ta'lim jarayoni sharoitlariga moslashtiradi. Raqamlashtirilgan ta'limning didaktik tamoyillarini sanab o'tamiz:

1.Ustunlik tamoyili: Bu tamoyili ta'limning yuqori sifatini ta'minlashni anglatadi va bu raqamlashtirgan ta'limda o'quv materiallari va resurslarining to'g'ri va samarali tanlanishini, ta'limning har bir bosqichida yuqori sifatli vositalar va platformalar ishlatilishini talab etadi. Raqamli vositalar ba'zi mavzularni o'qitishda an'anaviy usullardan ko'ra aniqroq, tushunarliroq natija beradi. Interfaol 3D modellari orqali osmon jismlarining joylashuvi, harakatini real vaqtda ko'rish va kuzatish orqali masalan, osmon sferasining asosiy nuqta, aylanalari haqida tushunib olish mumkin.

2.Shaxsiylashtirish tamoyili: Bu tamoyil har bir talabaga uning o'ziga xos ehtiyojlari, bilim darajasi va o'rganish uslubiga mos keladigan ta'lim yondoshuvini taqdim etadi. Raqamli ta'limda bu tamoyil, talabalarni individual tarzda o'qitish, o'rganish jarayoniga moslashtirish, shuningdek, talabaning o'z-o'zini boshqarish va mustaqil ishlash imkoniyatlarini yaratishni ko'rsatadi. Agar bir talaba "qora tuynuklar"ga qiziqsa, boshqa birov "neytron yulduzlar"ga qiziqishi mumkin. Raqamli resurslar foydalanuvchi qiziqishiga mos elektron ma'ruza matni, testlar berishi mumkin.

3.Maqsadlilik tamoyili: Bu tamoyil ta'lim jarayonining samarasiz pedagogik texnologiyalarni raqamlashtirishni, aniq maqsadlarga yo'naltirilganligini anglatadi. Har bir o'quv kursi yoki darsning maqsadi va natijalari oldindan aniqlanadi. Masalan, "yulduzlar evolyutsiyasi"ni simulyatsiya yordamida bosqichma-bosqich o'rganishi mumkin.

4.Moyillik va moslanuvchanlik tamoyillari: Moyillik va moslanuvchanlik tamoyillari talaba va o'qituvchilar orasida moslashuv va harakatga moyillik va yangi texnologiyalarni qabul qilishga tayyorligini anglatadi. Astronomiyadan planetariyga virtual sayohat orqali, teleskopda kuzatib bo'lmaydigan hollarda (bulutli osmon yoki astroiklim tufayli) mobil ilova orqali onlayn kuzatuvlar olib borishi mumkin.

5.Ta'limdagi muvaffaqiyat tamoyili: Ta'limdagi muvaffaqiyat tamoyili – izchillik didaktik tamoyilini rivojlantiradi. Raqamli ta'limda muvaffaqiyatga erishish uchun talabalarga individual yondoshuv, doimiy baholash va tahlil qilish, shuningdek, ularning muvaffaqiyatlarini rag'batlantirish zarur. Talabalarga O'zR FA Astronomiya instituti tomonidan har yili tashkil qilinadigan seminar-trenigga yo'llanmalar berish, sertifikatlar berish, rag'batlantirish.

6.Hamkorlik va o'zaro ta'sirda o'rganish tamoyili. Bunda dars jarayonida mavzular talabalarga birgalikda ishlash, raqamli ta'limda hamkorlik asosida o'rganish uchun guruhli ishlar, forumlar, onlayn munozaralar va loyiha ishlari ko'p bo'ladi. Bunda talabalar bir-biri bilan tajriba almashib, fikr almashishlari, birgalikda muammolarni hal qilishlari, "Sun'iy yo'ldoshlar" yoki boshqa istalgan mavzularda jamoaviy izlanish olib borishi, loyihalarda ishtirok etishi mumkin. Bu esa o'quv jarayonini yanada samarali bo'lishini ta'minlaydi.

7.Amaliyotga yo'naltirilgan tamoyil. Ushbu tamoyil o'qitishda nafaqat nazariy bilimlarni, balki amaliy ko'nikmalarni ham egallashni taqozo etadi. Bunda talabalar teleskop yordamida o'yning fazalarini kuzatishi, o'zlari yulduz xaritalarini tuzishi yoki CLEA da amaliy ishlar bajarishi mumkin.

8.Murakkablikni oshirish tamoyili: Raqamli ta'limda o'quv jarayonining murakkabligi bosqichma-bosqich oshirilishi kerak. Bu tamoyil, talabalar o'rganayotgan mavzular va ko'nikmalarni kichik qadamlar bilan o'rganish orqali yengillashtirishni va keyinchalik bu bilimlarni yanada murakkab vazifalar bilan kengaytirishni anglatadi. Har bir yangi ma'lumot oldingi bilimlar asosida shakllanadi, murakkablashadi. Masalan, Quyosh sistemasi, galaktikalar, qora tuynuklar, kvazarlar va boshq.

9.Ta'lim muhitini to'ldirish tamoyili. Bu tamoyil o'quv jarayonida barcha zarur vositalar va resurslarni, raqamlashtirgan ta'lim sharoitida astronomiya bo'yicha turli onlayn resurslardan foydalanishni o'z ichiga oladi.

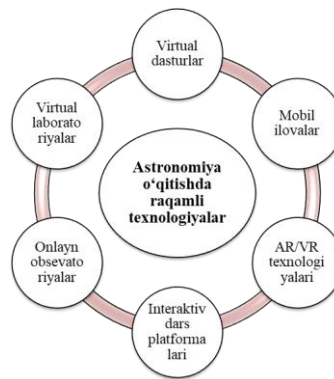
10.Polimodalilik(multimediya) tamoyili bu raqamli ta'lim jarayoni sharoitida ko'rgazmalilik didaktik tamoyilini ishlab chiqishdir. Bunda turli xil modalliklarni birlashtirish orqali o'rganish samaradorligini oshirish bo'lib, astronomiya darslarida talabalarga bir vaqtning o'zida vizual, eshitish, matn va boshqa ma'lumotlarni taqdim etish orqali ta'lim jarayonini boyitadi.

11.Hamkorlik asosida baholash tamoyili: Hamkorlik asosida baholash talabalar o'rtasida o'zaro fikr almashish, konstruktiv tanqid va o'rganilgan bilimlarni birgalikda baholash imkoniyatini yaratadi. Bu astronomiya mashg'ulotlarida baholash jarayonini adolatli va to'g'ri amalga oshirishga yordam beradi.

12.Globallashtirish tamoyili: Globallashtirish tamoyili ta'lim jarayonining global kontekstga moslashishi zarurligini anglatadi. Raqamli ta'limda globallashtirish, talabalarni global miqyosdagi bilimlar va malakalarga tayyorlashni o'z ichiga oladi. Talabalar NASA,ESA va boshqa kosmik agentliklarning saytlaridan foydalanib ma'lumotlar olish, xorijiy resurslar va platformalardan foydalanish imkoniyatini beradi.

13.Izlanishga yo'naltirilgan tamoyil: Raqamli ta'lim sharoitida astronomiya darslarida talabalar birgina "Ekzosayyoralar" mavzusi orqali mustaqil izlanishlar olib borishi, onlayn resurslardan foydalanishi va yangi bilimlarni o'rganish imkoniyatlarini yaratadi.

Yuqorida sanab o'tilgan tamoyillar, kompetensiyaviy yondashuv asosida astronomiya o'qitishda raqamli texnologiyalardan foydalanish ta'limni samarali va sifatli tashkil etishda asosiy yo'riqnomalarni taqdim etadi. Kompetensiyaviy yondashuv asosida astronomiya o'qitish metodikasini rivojlantirish jarayonida raqamli vositalardan foydalanish ta'lim jarayonini yanada interaktiv va qiziqarli qilish imkoniyatini beradi. Masofaviy va onlayn platformalar yordamida o'quv jarayonini rivojlantirish esa bugungi ta'lim tizimida dolzarb va samarali usul bo'lib bormoqda. Masofaviy va onlayn ta'lim imkoniyatlari shuningdek, talabalarga o'z vaqlarini samarali boshqarish va dunyodagi eng yirik observatoriya teleskoplaridan istalgan joyidan turib foydalanish hamda astronomik bilimlarini rivojlantirish imkoniyatini yaratadi.



1-rasm. Astronomiya o'qitishda raqamli texnologiyalardan foydalanish imkoniyatlari.

Xulosa va takliflar. Virtual dasturlar orqali (Stellarium, Solar System Scope, Celestia) osmon jismlarining real vaqtda qanday harakatlanayotganligini ko'rish mumkin. Interaktiv dars platformalari (NASA Space Place) yordamida astronomiyaga oid mavzularni o'rganish mumkin. Raqamli vositalar va masofaviy ta'lim platformalarining qo'llanilishi o'quv jarayonini yanada boyitadi. Astronomiya darslarida tasavvur qilish bilan bog'liq mavzularni tushuntirishda raqamli texnologiyalardan foydalanish juda katta ahamiyatga ega. Astronomiyani an'anaviy holda o'qitishdan ko'ra raqamli texnologiyalar muhitida o'qitish yaxshi samara beradi va Koinot, astronomik hodisalar haqida talabalarda chuqurroq tasavvurga ega bo'lishga undaydi, ularning nazariy va amaliy bilimlarini mustahkamlaydi. Raqamli ta'limning didaktik tamoyillaridan foydalanish astronomiya fanini yanada chuqurroq o'rganishga xizmat qiladi.

ADABIYOTLAR

1. O'zbekiston Respublikasi Prezidentining "O'zbekiston Respublikasi oliy ta'lim tizimini 2030 yilgacha rivojlantirish konsepsiyasini tasdiqlash to'g'risida"gi Farmoni, 2019 yil, PF-5847-son. Manba: <http://lex.uz>
2. Mamarajabov M.E., To'rayev R. Talabalarda web dasturlashni o'rgatuvchi elektron darslik // O'zbekiston Respublikasi Adliya vazirligi huzuridagi Intellektual mulk agentligi. Guvohnoma DGU-08213. 2020 yil 11 mart.
3. Блинов В.И. Образовательный процесс в профессиональном образовании: учебное пособие для вузов / В. И. Блинов [и др.]; под общей редакцией В. И. Блинова. - Москва: Издательство Юрайт, 2018.-203с.
4. Акрамова Г.Р. Эффективные методы развития критического мышления у учащихся. International scientific review of the problems of pedagogy and psychology. 2018. 73-75b
5. Мамаражабов М.Э. Рақамлаштирилган таълим шароитида бўлажак ўқитувчиларнинг касбий-педагогик тайёргарлигини такомиллаштириш. Педагогика фанлари бўйича фалсафа доктори (DSc) диссертация, Т: 2022.
6. Бегимкулов У.Ш. Олий педагогик таълим тизимида замонавий ахборот ва коммуникация технологияларини жорий этишнинг илмий-педагогик асослари. Пед.фан.доктори дисс. -Т.: 2007, 250б.
7. Абдуқодиров А.А. Таълимда инновацион технологиялар. - Тошкент: Истеъдод, 2008. - 180 б.
8. Мамаражабов М.Э. Рақамлаштирилган таълим шароитида бўлажак ўқитувчиларнинг касбий-педагогик тайёргарлигини такомиллаштириш// Монография. - Тошкент.: "Фафур Фулом" нашриёти, 2022. - 170 б.
9. Nuritdinov S.N., Mirtadgiyeva K.T., Umumiy astronomiya, Universitet, Tashkent, 2008.-150 b.
10. Мамадазимов М.М. Теоретические основы содержания и методики обучения астрономии в системе непрерывного образования. Дисс.д-ра пед. наук. - Тошкент: ТДПУ, 2005.
11. Djorayev M., Xujanov E.B. Mutaxassislik fanlarini o'qitish metodikasi / O'quv qo'llanma. -Toshkent: 2021. - 248 b.
12. Sattarov I. «Astrofizika» (1-qism, darslik). T.: Ta'lim, 2009 y.
13. Abdullayeva B.S. Fanlararo aloqadorlikning metodologik-didaktik asoslari (Ijtimoiy-gumanitar yo'nalishlardagi akademik litseylarda matematika o'qitish misolida): Ped. fan. Dokt. diss. avtoref. -T., 2006, - 49 b.
14. Исынов Р.Г. Кластерный подход в формировании модульной компетентности преподавателей высших образовательных учреждений. - Ташкент: ТГПУ, 2014. - 69 с.
15. Muslimov N.A. Kasb ta'limi o'kituvchisini kasbiy shakllantirishning nazariy-metodik asoslari. Ped. fan. dok. diss. avtoref. - Toshkent: TDPU, 2007. 47 b.
16. Sattarova B.J. Methods of applying virtual laboratory work in training X-ray radiations of lights, Science and Innovation, 2, №12, 2023, pp.212-222
17. Tillaboyev A.M., Nurmatov Sh.E., Qurbonova N. Umumiy astronomiya kursining kosmonavtika bo'limidan masala yechish metodikasi // "Fizika va zamonaviy astronomiya: innovatsion o'qitishning yangi modellari yaratish". Respublika ilmiy-amaliy konferensiya materiallari. - Toshkent, 2019. - B. 97-99.
18. Muslimova Y.Ch. Astronomiyadan zamonaviy internet resurslari va ulardan foydalanish //Science and innovation. - 2023. - r. 2. - №. special Issue 3. - pp. 1001-1006.
19. Nurmatov S. Astronomiya kursining laboratoriya mashg'ulotlarida "Koinotning katta o'Ichamli tuzilishi" mavzusini o'qitish //Science and innovation. - 2022. - T. 1. - №. B8. - C. 1914-1920.
20. Муслимова Ю. Ч. Формирование экологической культуры при обучении астрономии в непрерывном образовании. "Парадигма современной науки в условиях модернизации и инновационного развития научной мысли: теория и практика" -2022 - с. 705-708.
21. Muslimova Y.Ch. Astronomiyani o'qitishda onlayn kuzatuvlarni tashkil etish va talabalarni ilmiy-tadqiqot ishlariga yo'naltirish. O'zMU xabarlari. Vol1.No1.1, 2025 B. 126-129.



УДК: 537.533.537.534;

Нодира МУСТАФӨЕВА,

Доцент Университета информационных технологий и менеджмента, PhD

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-2693-0751>,

E-mail: mustafoyevan@gmail.com.

Ёқуб ЭРГАШОВ,

Профессор Национального университета Узбекистана, д.ф.-м.н

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1884-9462>.

E-mail: y.ergashov@nuu.uz

Алланазар ТАШАТОВ,

Профессор Каршинского государственного университета, д.ф.-м.н

ORCID: <https://orcid.org/0009-0006-0164-829X>,

E-mail: atashatov@mail.ru.

Сафарали КУЧАРОВ,

Базовый докторант Каршинского государственного университета

Зуснора НОРКУЛОВА,

Магистрантка Каршинского государственного университета.

ИССЛЕДОВАНИЕ ШИРИНА ПЕРЕХОДНОГО СЛОЯ ДВУХСЛОЙНОЙ СИСТЕМЫ СИЛИЦИД-КРЕМНИЙ

Аннотация

В данной работе представлены результаты исследования параметров энергетических зон тонких пленок кремния (Si) и дисилицида бария (BaSi_2), а также определены характеристики переходного слоя между ними. Метод ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии (УФЭС) использован для определения ширины запрещенной зоны (E_g) и положения потолка валентной зоны (E_v). Комплексный подход, включающий методы оптической электронной спектроскопии (ОЭС), УФЭС, растровой электронной микроскопии (РЭМ) и рентгеноструктурного анализа, позволил изучить состав, морфологию поверхности и электронную структуру нанопленочной системы $\text{BaSi}_2/\text{Si}/\text{BaSi}_2/\text{Si}$ (111). Данная система была получена методом имплантации ионов бария (Ba^+) в кремний с последующим прогревом. В работе определены параметры энергетических зон и построена энергетическая зонная диаграмма системы $\text{Si}/\text{BaSi}_2/\text{Si}$. Также исследованы глубина образования и толщина слоя BaSi_2 в зависимости от энергии имплантируемых ионов Ba^+ в диапазоне от 0.5 кэВ до 30 кэВ. Полученные результаты имеют важное значение для понимания электронных свойств и потенциального применения таких систем в оптоэлектронике и энергетических устройствах.

Ключевые слова: ширина запрещенной зоны, нанослой, имплантация ионов, морфология, отжиг, параметры энергетических зон, тонких пленок, потолка валентной зона.

INVESTIGATION OF THE WIDTH OF THE TRANSITION LAYER IN A SILICIDE-SILICON BILAYER SYSTEM

Annotation

This work presents the results of a study on the parameters of the energy bands of thin films of silicon (Si) and barium disilicide (BaSi_2), as well as the characteristics of the transitional layer between them. Ultraviolet photoelectron spectroscopy (UPS) was used to determine the bandgap width (E_g) and the position of the valence band maximum (E_v). A comprehensive approach, including optical electron spectroscopy (OES), UPS, scanning electron microscopy (SEM), and X-ray structural analysis, allowed for the investigation of the composition, surface morphology, and electronic structure of the $\text{BaSi}_2/\text{Si}/\text{BaSi}_2/\text{Si}$ (111) nanofilm system. This system was obtained by implanting barium ions (Ba^+) into silicon followed by annealing.

The work determined the parameters of the energy bands and constructed the energy band diagram of the $\text{Si}/\text{BaSi}_2/\text{Si}$ system. Additionally, the depth of formation and thickness of the BaSi_2 layer were studied depending on the energy of the implanted Ba^+ ions in the range from 0.5 keV to 30 keV. The obtained results are of great importance for understanding the electronic properties and potential applications of such systems in optoelectronics and energy devices.

Key words: band gap, nanolayer, ion implantation, morphology, annealing, parameters of energy bands, thin films, valence band ceiling.

SILITSID-KREMIY IKKI QATLAMLI TIZIMIDAGI O'TISH QATLAMINING KO'NLIGINI TADQIQ QILISH

Аннотация

Bu ishda kremniy (Si) va bariy disilitsidi (BaSi_2) ingichka plenklarining energetik zonalarini parametrlarini o'rganish natijalari taqdim etilgan, shuningdek, ular o'rtasidagi o'tish qavatining xususiyatlari aniqlangan. UFES (Ultrafiollet fotoelektron spektroskopiyasi) usuli yordamida to'siqli zonaning kengligi (E_g) va valentlik zonasining chegarasi (E_v) aniqlangan. Optik elektron spektroskopiyasi (OES), UFES, rastrali elektron mikroskopiyasi (REM) va rentgen strukturaviy tahlil usullarini o'z ichiga olgan kompleks yondashuv orqali $\text{BaSi}_2/\text{Si}/\text{BaSi}_2/\text{Si}$ (111) nanoplenka tizimining tarkibi, yuza morfologiyasi va elektron strukturasini o'rganildi. Bu tizim bariy ionlarini (Ba^+) kremniyga implantatsiya qilish va keyingi isitish orqali olingan.

Ishda energetik zonalar parametrlari aniqlandi va Si/BaSi₂/Si tizimining energetik zona diagrammasi qurildi. Shuningdek, 0.5 кэВ dan 30 кэВ gacha bo'lgan implantatsiya qilingan Ba⁺ ionlarining energiyasiga bog'liq ravishda BaSi₂ qavatining qalinligi va paydo bo'lish chuqurligi o'rganildi. Olingan natijalar bu tizimlarning elektron xususiyatlarini tushunish va ularni optoelektronika va energetik qurilmalarda qo'llash imkoniyati uchun muhim ahamiyatga ega.

Kalit so'zlar: tarmoqli bo'shlig'i, nano qatlam, ion implantatsiyasi, morfologiya, tavlani,sh, energiya tasmasi parametrlari, yupqa plyonkalar, valentlik zonasi shifti.

В настоящее время во многих научных центрах ведется поиск материалов для создания фотоэлектрических преобразователей с лучшими физическими свойствами. Основой для таких материалов могут служить тонкие пленки силицидов, в частности дисилицида бария [1-4]. Поэтому ведется активная работа по поиску оптимальных методов получения одно- и двухслойных нанопленочных систем типа силицид металл - кремний. Теоретические исследования и расчёт показывают, что функциональная плотность BaSi₂ принадлежит фазе *Zintl* со смешанной ковалентной связью тетраэдрического Si₄ и с ионной связью типа (2Ba²⁺)(Si₄)⁴⁻.

Диаграмма молекулярных орбиталей объясняется на основе электронных структур, предполагая, что переход с переносом заряда от *p*-состояния Si к *d*-состоянию Ba, что значительно увеличивает оптическое поглощение. Большой коэффициент фотопоглощения подтверждается расширенными расчетами возбужденного состояния, которые включают экситонные эффекты. Уровень Ферми закреплён в середине запрещенной зоны для всего диапазона химических потенциалов кремния и широкого диапазона температур роста, что указывает на возможность биполярного легирования, которое является преимуществом для изготовления *p-n*-переходов [5].

В [6], с использованием метода поэтапной имплантации Co⁺ в Si в сочетании с отжигом, получена слоистая структура типа CoSi₂ / Si / CoSi₂ / Si (111) и изучены их состав и электронная структура. Однако, такие исследования в случае имплантации ионов Ba⁺ в Si, практически, не проводились.

Целью данной работы является получение методом имплантации ионов Ba⁺ в Si двухслойной нанопленочной системы типа BaSi₂ / Si / BaSi₂ / Si (111) и исследование их состава, структуры и параметров энергетических зон. Наноразмерные фазы и слои BaSi₂ на различных глубинах приповерхностного слоя Si получены имплантацией ионов Ba⁺ с вариацией энергии E₀ до 30 кэВ, при вакууме не хуже 10⁻⁷ Па [7-8].

Методика эксперимента. В качестве подложки использовались хорошо полированные монокристаллические пластины Si (111) p-типа. Эти образцы установили в сверхвысоковакуумный- универсальный прибор типа UCS-2, где проводился все технологические операции (прогрев, напыление атомов Ni и Si) и исследования состава и электронной структуры с помощью метода Оже- и фотоэлектронной спектроскопии. Очистка Si (111) осуществлялась при вакууме P=10⁻⁷ Па при T=1100 K длительно (~4-5 часов) и кратковременно при температуры ~1350 T.

Морфология и кристаллическая структура, спектр поглощения света и удельные сопротивления пленок исследовались на стандартных приборах типа Jeol, ЭМР-2 и UV-1280

Профили распределения атомов по глубине исследовались методом ОЭС в сочетании с травлением поверхности Ag⁺.

Результаты и их обсуждение. На рис. 1 приведена зависимость C_{Ba} от глубины *h* для Si (111), имплантированного ионами Ba⁺ с E₀ = 30 и 1 кэВ. После каждого цикла ионной имплантации проводился прогрев при оптимальной температуре 900 K в течении 30 ÷ 40 мин. Видно, что на поверхности и на глубине 20 ÷ 30 нм концентрация Ba составляет 30 ÷ 35 ат.%. Анализ изменения положения и формы оже – пика L_{2,3}VV кремния показали, что в этих слоях образуются соединения типа BaSi₂. На рисунке 2 приведена рентгенограмма системы BaSi₂ / Si / BaSi₂ / Si (111), снятая на дифрактометре STOE «STADI P» (CoKa – излучение). Видно, что на рентгенограмме, в основном, обнаруживается множество пиков, характерных для BaSi₂ и Si, а пики посторонних элементов, практически, отсутствуют. Исходя из этого можно полагать, что данная система имеет поликристаллическую структуру. Данное предположение подтверждалось результатами, полученными методом ДБЭ.

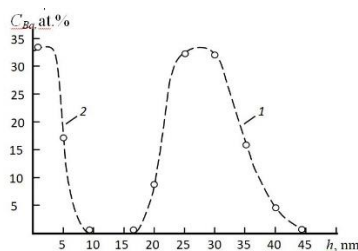


Рис.1. Концентрационные профили распределения Ba по глубине для Si, имплантированного ионами Ba⁺ с E₀ = 30 кэВ – 1 и 1 кэВ – 2. После каждого цикла имплантации проводился прогрев при T ≈ 900 K.

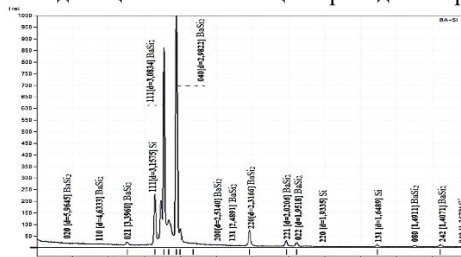


Рис. 2. Рентгенограмма поверхности системы BaSi₂/Si/BaSi₂/Si (111).

На рисунке 3 приведены картины ДБЭ для чистого Si и системы BaSi₂ / Si / BaSi₂ / Si (111). Видно, что на электронограмме поверхности чистого Si наблюдаются рефлексы, характерные для грани (111), а в случае двухслойной системы устанавливается структура, соответствующая поликристаллическим образцам.

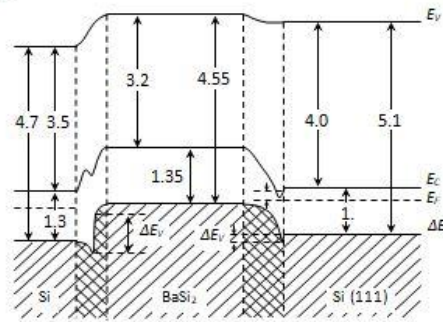


Рис. 3. Энергетическая зонная диаграмма для сверхрешетки Si/BaSi₂/Si (111).

При этом, на фоне поликристаллических колец с узкими линиями, появляются точечные рефлексы. Отметим, что при малых толщинах ($\theta \leq 0.2 \div 1$ нм) BaSi₂ на поверхности Si кристаллизуется кубической решеткой с постоянной решетки $a \approx 6.54$ Å [9; 10]. Однако, вследствие несоответствия параметров решеток Si и пленки BaSi₂, на поверхности Si, даже после прогрева при определенной температуре, сохраняются дендритные структуры.

Таблица

Параметры энергетических зон тонких пленок Si и BaSi₂ и ширина переходного слоя (Δh) на границе Si/BaSi₂ и BaSi₂/Si(111)

Параметры	Si ($d = 15$ nm)	BaSi ₂ ($h = 10-12$ nm)	1)
E_g , эВ	1.3	1,35	
E_v , эВ	4.7	4.55	
χ , эВ	3.5	3.2	
ΔE_C , эВ	0.1	0.5	
ΔE_V , эВ	0.3	0.1	
Δh , nm	6-7	8-10	

В таблице приведены параметры энергетических зон тонких пленок Si, BaSi₂ и ширина переходного слоя. Значения ширины запрещенной зоны - E_g и положения потолка валентной зоны - E_v определялись методом УФЭС. Значение сродства к электрону - χ оценивалось по формуле $\chi = E_v - E_g$. Разрыв краев зон проводимости - по разности значений электронного сродства двух полупроводников [11]:

$$\Delta E_C = \chi_1 - \chi_2 \quad (1)$$

Предполагая справедливой одноэлектронную теорию, имеем $\Delta E_g = \Delta E_C - \Delta E_V$, где $\Delta E_g = E_{g2} - E_{g1}$ - разность ширины запрещенных зон. Учитывая соотношение $E_F = \chi + E_g$, получаем для разрыва краев валентных зон $\Delta E_V = E_{F2} - E_{F1}$ (2)

Согласно этим формулам для контакта нанопленки Si/BaSi₂: $\Delta E_C = 0.1$ эВ; $\Delta E_V = 0.3$ эВ, а для контакта BaSi₂/Si (111): $\Delta E_C = 0.5$ эВ $\Delta E_V = 0.1$ эВ. Необходимо отметить, что E_g нанопленки Si с толщиной $10 \div 15$ Å на $0.05 \div 0.1$ эВ больше, чем толстой пленки.

Как видно из таблицы, вследствие заметного различия постоянных решеток Si и BaSi₂, происходит интенсивная взаимодиффузия атомов и на границе Si/BaSi₂ и BaSi₂/Si (111) формируются переходные области толщиной $\sim 6 \div 10$ нм.

На основе данных таблицы нами построена примерная зонно-энергетическая диаграмма системы Si(111)/BaSi₂/Si (рис.3). Для построения этой диаграммы мы пользовались моделью Шокли-Андерсона [12].

Согласно этой модели, после установления контакта между двумя полупроводниками, происходит выравнивание уровней Ферми E_F путем перемещения электронов из одного материала в другой. Образование слоя пространственного заряда вблизи границы раздела сопровождается изгибом зон.

С использованием методов ОЭС, УФЭС, РЭМ и рентгеноструктурного анализа исследованы состав, морфология поверхности и электронная структура нанопленочной системы BaSi₂/Si/BaSi₂/Si (111), полученных методом имплантации ионов Ba⁺ в Si в сочетании с прогревом. Определены параметры энергетических зон и построена энергетическая зонная диаграмма системы Si/BaSi₂/Si. Определены глубина образования и толщина слоя BaSi₂ для различных энергии ионов Ba⁺ в диапазоне от 0.5 кэВ до 30 кэВ [13-15].

ЛИТЕРАТУРА

1. Гомоюнова М.В., Пронин И.И., Галль Н.Р., Молодцов С.Л., Вялых Д.В. // ФТТ. 2003. Т. 45. Вып. 8. С. 1519–1522.
2. Нормурадов М.Т., Рысбаев А.С., Нормурадов Д.А., Турсунметова З.А.. // Тезисы докладов 50-й международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. Москва 2021. с.140.
3. Алексеев А.А., Олянич Д.А., Утас Т.В., Котляр В.Г., Зотов А.В., Саранин А.А. // ЖТФ. 2015. Т. 85. Вып. 10. С. 94–100
4. Алексеев А.А., Олянич Д.А., Утас Т.В., Котляр В.Г., Зотов А.В., Саранин А.А. // ЖТФ. 2015. Т. 85. Вып. 10. С. 94–100

5. Dubinin D.V., Geringer V. // Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. 2015. Vol. 326, № 3. p. 58-62.
6. Kirilin A.N., Tkachenko S.I., Salmin V.V., et.al.// 2015. Vol.14, № 4. p.58-71. doi: 10.18287/2412-7329-2015-14-4-58-71
7. Hara K.O., Nakagawa Y., Suemasu T., Usami N. // Selection and/or peer-review under responsibility of the scientific committee of Symposium 2015 ICMAT. p.28-31. doi: 10.1016/j.proeng.2015.08.1103.
8. Galkin N.G., Goroshko D.L., Dubov V.L., Fomin D.V., Galkin K.N., Chusovitin E.A., Chusovitina S.V. // Japanese Journal of Applied Physics 59, SFFA11 (2020). P. SFFA11-1-7. doi.org/10.35848/1347-4065/ab6b76.
9. Yamashita Y., Sato T., Saitoh N., Yoshizawa N., Toko K., Suemasu T. // J. Appl. Phys. 2019. 126, 215301-1-215301-7. doi: 10.1063/1.5128690.
10. Эргашов Ё.С., Умирзаков Б.Е. // Журнал технической физики, 2018, том 88, вып. 12. с. 1859-1862. doi:10.21883/JTF.2018.12.46788.12-18.
11. Umirzakov B.E., Tashmukhamedova D.A., Tashatov A.K., Mustafoeva N.M., Muradkabilov D.M. // Effect of the Disordering of Thin Surface Layers on the Electronic and Optical Properties of Si(111) // Semiconductors, 2020, 54(11), стр. 1424–1429
12. K. Tashatov, N. M. Mustafoeva // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2020, Vol. 14, No. 1, pp. 81–84.
13. Umirzakov, B.E., Tashmukhamedova, D.A., Tashatov, A.K., Mustafoeva, N.M. //Electronic and Optical Properties of NiSi₂/Si Nanofilms // Technical Physics, 2019, 64(5), стр. 708–710
14. Эргашов Ё.С.// Журнал технической физики, 2017, Том 87, вып. 5. с.758-761.
15. Умирзаков Б.Е., Ташмухамедова Д.А., Рузибаева М.К., Ташатов А.К., Донаев С.Б., Мавлянов Б.Б. // Журнал технической физики, 2013, Том 83, вып. 9. с. 146-149.



UDK: 530.12:531.51

Umidjon TILLAYEV,
Student at National University of Uzbekistan
E-mail: umidjontillayev35@gmail.com

Shakhzod ORZUYEV,
PhD at Institute of Fundamental and Applied Research, National Research University, TIAME
Poshshajon DAVLETOVA,
PhD at Institute of Fundamental and Applied Research, National Research University, TIAME

Based on the review of professor A.Abdujabbarov, Ulugh Beg Astronomical Institute

PLASMA EFFECTS ON GRAVITATIONAL WEAK LENSING OF HAIRY BLACK HOLE

Annotation

Detailed studies have been conducted on gravitational weak lensing around a hairy black hole in the presence of a plasma medium. The founded results showed that influence parameters a and l_0 the angle of rejection of light rays around a black hole in hairy spacetime can be seen. With an rise of parameter a the angle of of photon orbits decline, and the effect of plasma on the angle of deviation is opposite. Here we talked about the different types of plasma distribution: uniform $\omega_e = const$, Singular Isothermal Sphere medium, $1/r$ Singular Isothermal Sphere medium, a and parameter l_0 affined to hairy spacetime in the presence of plasma around the black hole.

Key words: hairy black hole, plasma medium, isothermal sphere medium, rejection angle, weak gravitational lensing.

ПЛАЗМЕННЫЕ ЭФФЕКТЫ НА ГРАВИТАЦИОННОЕ СЛАБОЕ ЛИНЗИРОВАНИЕ ВОЛОСАТЫХ ЧЁРНЫХ ДЫР

Аннотация

Гравитационное слабое линзирование вокруг волосатой чёрной дыры было глубоко изучено в присутствии плазменной среды. Полученные результаты показали, что влияние параметров a и l_0 на угол отклонения световых лучей вокруг чёрной дыры в волосатой пространственно-временной метрике ощутимо. С увеличением параметра a угол отклонения орбит фотонов уменьшается, а влияние плазмы на угол отклонения противоположно. В данной работе рассматриваются различные типы распределений плазмы: равномерное $\omega_e = const$ среда Сингулярной Изотермальной Сферы $1/r$, а также параметры a и l_0 , связанные с волосатым пространственно-временным континуумом в присутствии плазмы вокруг чёрной дыры.

Ключевые слова: Волосатые чёрные дыры, плазменная среда, угол отклонения, среда изотермальной сферы, слабое гравитационное линзирование.

SOCHLI QORA TUYNUKLARNING ZAIF GRAVITATSION LINZALANISHIGA PLAZMANI TA'SIRI

Annotatsiya

Ushbu maqola vosita sifatida mukammal suyuqlik qora materiya (PFDM) bilan o‘ralgan zaryadlangan aylanadigan qora tuynuklar atrofida zarrachalar tezlashishini o‘rganishga bag‘ishlangan. Boshida biz PFDM doirasida qora tuynuk (BH) gorizontlari, ergosfera va ichki barqaror dumaloq orbitalarni muhokama qilamiz. Keyinchalik, ekstremal va ekstremal bo‘lmagan BHlar yaqinida zarrachalarning to‘qnashuvini tekshiramiz. Aniqlanishicha, ekstremal bo‘lmagan holatda E_{cm} energiya PFDM ishtirokida Q zaryadining ba’zi qiymatlari uchun chekli bo‘lishi mumkin.

Kalit so‘zlar: sochli qora tuynuk, plazmali muhit, og‘ish burchagi, izotermal sfera muhiti, zaif gravitatsion linzalanish.

Introduction. The actual exactness of experiments and observations used to test or probe general relativity. (GR), proposed by Einstein in 1915 [1] and acknowledge as the standard theory of gravity, enables the exploration of modifications and alternatives to GR. Modifying GR is necessary to address its fundamental challenges. These challenges include the presence of singularities at the origin in most vacuum solutions of Einstein's equations, the incompatibility of GR with quantum field theory, among others. At the same time, modifications to GR and alternative gravity theories can be seen as progress toward developing a unified theory of fundamental interactions.

One approach to modifying the standard theory of gravity to address the fundamental issues of GR involves coupling GR with additional types of fields. Specifically, the so-called hairy black hole (BH) solutions have been derived using the gravitational decoupling (GD) method.[1]. This solution incorporates a source that adheres to the strong energy condition. It can also be described as a black hole (BH) solution possessing a form of global charge, distinct from conventional charges that comply with the Gauss law. [2-5]. Testing gravity models using observational and experimental data is one of the key challenges in modern relativistic astrophysics. Fortunately, current observational data provides numerous independent opportunities to test these models. In particular, such groundbreaking discoveries as gravitational waves [9] and the imaging of shadows around supermassive black

holes like M87 [10, 11] and Sgr A* [12] have opened new avenues for research in testing modified and alternative theories of gravity.

Hairy black hole. The gravitational decoupling (GD) method is specifically developed to identify modifications to GR solutions caused by additional surrounding sources, such as dark matter or dark energy. The GD approach results in deformed hairy black holes. In this analysis, we begin by examining the spherically symmetric hairy black hole solution introduced in Refs. [1, 8]. In Boyer-Lindquist coordinates, the line element for this spacetime is expressed as follows:

$$ds^2 = -f(r)dt^2 + \frac{1}{f(r)}dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2) \quad (1)$$

with

$$f(r) = 1 - \frac{2M}{r} + ae^{-r/(M-l_0/2)} \quad (2)$$

where M is the total mass of the black hole, a is a deviation parameter and l_0 is parameter related to Hairy black hole.

Weak gravitational lensing in the presence of plasma. Here we discuss the space-time metric (1) against a weak field background regime, which is expressed as [15]:

$$g_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta} + h_{\alpha\beta}. \quad (3)$$

Now, we are able to examine how the plasma affects the bending angle of light beams $\hat{\alpha}_i$ within the weak gravitational black hole field. Universal formula for the rejecting angle in the presence of plasma can be stated as [13,14]

$$\hat{\alpha}_i = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(h_{33} + \frac{h_{00}\omega^2 - K_e N(x^i)}{\omega^2 - \omega_e^2} \right) dz, i = 1, 2 \quad (4)$$

with

$$\omega_e^2 = \frac{4\pi e^2 N(x^i)}{m} = K_e N(x^i) \quad (5)$$

$N(x^i)$ represents the number density of the particles in the plasma surrounding the black hole, $K_e = 4\pi e^2/m_e$ is a constant, and ω and ω_e are the photon and plasma frequencies respectively, as reported in [15]. The axis for the motion of the photon in the spacetime is denoted by the variable z (as shown in Fig. ??). The equation for the deflection angle, expressed as (4), can be rewritten by using Eqs. (5)-(4) and the following variables [15]:

$$\hat{\alpha}_b = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{r} \left(\frac{dh_{33}}{dr} + \frac{1}{1 - \omega_e^2/\omega^2} \frac{dh_{00}}{dr} - \frac{K_e}{\omega^2 - \omega_e^2} \frac{dN}{dr} \right) dz \quad (6)$$

In the preceding equation, b marks the impact parameter. It is value citation that the values of $\hat{\alpha}_b$ needs to be both negative and positive [15]. In the attendance of a weak field at a distance from a hairy black hole, the spacetime metric (1) can be stated as

$$ds_0^2 = ds_0^2 + \left(\frac{R_s}{r} - ae^{-\beta r} \right) dt^2 + \left(\frac{R_s}{r} - ae^{-\beta r} \right) dr^2$$

where $ds_0^2 = -dt^2 + dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2)$ is the metric element in the Minkowski spacetime geometry. Find the angle of rejection of light rays near a black hole in the presence of a plasma medium using Eq. (6), recirculation the components $h_{\alpha\beta}$ in descart coordinates as

$$h_{00} = \left(\frac{R_s}{r} - ae^{-\beta r} \right),$$

$$h_{ik} = \left(\frac{R_s}{r} - ae^{-\beta r} \right) n_i n_k,$$

where $\cos^2\chi = z^2/(b^2 + z^2)$ and $r^2 = b^2 + z^2$ are given (see, e.g. [16]). The derivative of the expressions h_{00} and h_{33} with respect to radial coordinate iare calculated as

$$\frac{dh_{33}}{dr} = -\frac{R_s}{r^2} + \frac{3R_s b^2}{r^4} - 2ab^2 \frac{e^{-\beta r}}{r^3} + a\beta e^{-\beta r}$$

The deflection angle can be redefined as [20]:

$$\hat{\alpha}_b = \hat{\alpha}_1 + \hat{\alpha}_2 + \hat{\alpha}_3, \quad (9)$$

with

$$\hat{\alpha}_1 = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{r} \frac{dh_{33}}{dr} dz$$

$$\hat{\alpha}_2 = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{r} \left(\frac{1}{1 - \omega_e^2/\omega^2} \frac{dh_{00}}{dr} \right) dz$$

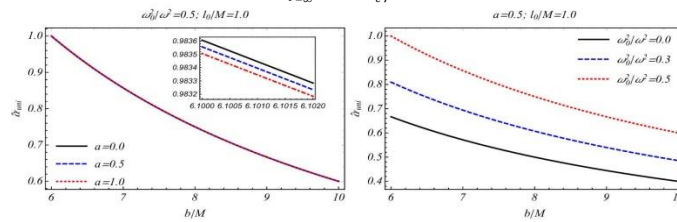


FIG. 2: Relationship of the angle of rejection $\hat{\alpha}_{uni}$ on the impact parameter b/M for a range of parameter values a (left panel), parameter l_0/M (lower panel). where the notations $\hat{\alpha}_1$, $\hat{\alpha}_2$ and $\hat{\alpha}_3$ these correspond to the deposit to the rejection angle from the gravitational field, homogeneous plasma, and patchy plasma, esteem. The objective of this study is to probe the impact of plasma on the rejection angle under weak gravitational lensing using Eqs. (9)-(10). We will reach into each scenario separately in the subsequent subsections, and for convenience, we will adopt the following notations for recent reference $\omega = \omega(\infty)$ and $\omega_0 = \omega_e(\infty)$ [17].

Uniform plasma with $\omega_e^2 = \text{const}$. In this section of our work, we use the equation to calculate The light ray deflection angle around a hairy black hole in a homogeneous plasma medium (9), represented as [19]:

$$\hat{\alpha}_{uni} = \hat{\alpha}_{uni1} + \hat{\alpha}_{uni2} + \hat{\alpha}_{uni3} \quad (11)$$

where $\hat{\alpha}_{uni1}$ and $\hat{\alpha}_{uni2}$ can be interpreted as portions of the deflection angle caused by uniform plasma and gravity, and $\hat{\alpha}_{uni3} = 0$ caused by uniform plasma distribution. Now, by considering expressions (9), (8) and (11) we get the equation for light ray the angle of rejection around a BH with new parameters a and l_0 circled by uniform plasma in the form

$$\hat{\alpha}_{uni} = \frac{R_s}{b} - \frac{3\sqrt{2}a\pi e^{-\beta b}}{8} - \frac{a\beta b\pi e^{-\beta b}}{8\sqrt{2}} + a\beta b\mathcal{B}_0(\beta b) + \left[\frac{R_s}{b} - a\beta b\mathcal{B}_0(\beta b) \right] \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_0^2}, \quad (12)$$

The second-kind modified Bessel function $\mathcal{B}_0(\beta b)$, as described in [20], is utilized in this study. The impact parameter b affects the rejection angle of light rays near a hairy BH, as demonstrated in Fig 2, which exhibits different meanings a, l_0 and plasma frequency ω_0/ω in the analysis. Fig. 3 illustrates how the rejection angle relying on plasma frequency and parameters a and l_0 expect stated values of the impact parameter. Based on Figs. 2 and 3, it follows that light rays are rejected around a hairy BH in the presence of plasma parameters. Moreover, with an growth in parameter a , with an growth in the parameter, the rejected angle of light rays go down, while the rejection angle growth l_0 growths. As the impact parameter b growths, the gravitational rejection angle rouch zero.

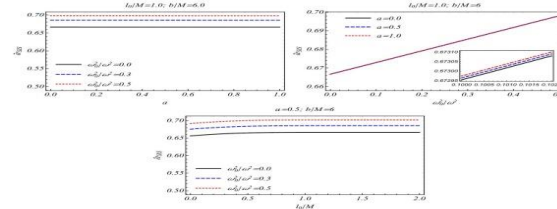


FIG. 5: Change of rejection angle $\hat{\alpha}_{SIS}$ on the argument a (left panel) and the impure plasma argument (right panel), as well as the parameter l_0/M (lower panel)

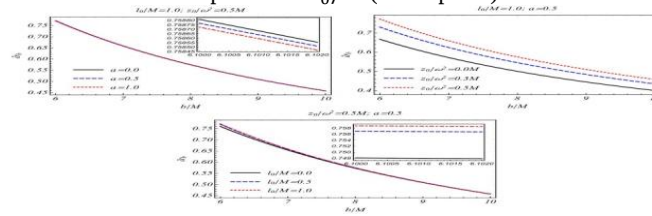


FIG. 6: Relation of rejection angle $\hat{\alpha}_{SIS}$ on the impact argument b/M for the either values of argument a (left panel) and the impure plasma parameter (right panel) and parameter l_0/M (lower panel)

Conclusions. This study thoroughly investigates the influence of plasma on weak gravitational lensing for hairy black holes, considering both uniform and non-uniform plasma distributions, as well as the parameters of the black hole, a and l_0 . The findings can be succintly summarized by the following assertions and findings:

- The parameter a results in a little go down in the angle of rejection of light beams around the hairy black hole. However, the angle of rejection of the light ray growths as a result of the influence of the parameter, l_0 . Moreover, we the effect of plasma Focusing on the weak gravitational deflection angle with fixed values of parameters a and l_0 for the hairy black hole, as demonstrated in Figs. 2 and 3.
- As shown in Figs. 6 and 5, When the parameter linked to the inhomogenius of the plasma medium growths, the rejection angle of light rays around a compact object also growths.

REFERENCES

1. E. Contreras, J. Ovalle, and R. Casadio, Phys. Rev. D 103, 044020 (2021).
2. C. A. R. Herdeiro and E. Radu, Phys. Rev. Lett 112, 221101 (2014).
3. C. A. R. Herdeiro and E. Radu, Int. J. Mod. Phys. D 24, 1542014-219 (2015).
4. C. Herdeiro, E. Radu, and H. Rúnarsson, Class. Quant. Grav. 33, 154001 (2016).
5. Y.-X. Gao and Y. Xie, Phys. Rev. D 103, 043008 (2021).
6. P. V. P. Cunha, C. A. R. Herdeiro, E. Radu, and H. F. Rúnarsson, Phys. Rev. Lett. 115, 211102 (2015).
7. P. V. P. Cunha, C. A. R. Herdeiro, E. Radu, and H. F. Rúnarsson, Int. J. Mod. Phys. D 25, 1641021 (2016).
8. M. Afrin, R. Kumar, and S. G. Ghosh, Mon. Not. R. Astron. Soc. (2021), [13] M. S. Volkov and D. V. Galt'sov, Phys. Rep. 319, 1 (1999).
9. B. P. Abbott, LIGO Scientific Collaboration, and Virgo Collaboration, Phys. Rev. Lett. 116, 061102 (2016).
10. K. Akiyama and et al. (Event Horizon Telescope Collaboration), Astrophys. J. 875, L1 (2019), arXiv:1906.11238 [astroph.GA].
11. K. Akiyama and et al. (Event Horizon Telescope Collaboration), Astrophys. J. 875, L6 (2019), arXiv:1906.11243 [astroph.GA].
12. K. Akiyama and et al., Astrophys. J. Lett 930, L12 (2022).
13. G. S. Bisnovatyi-Kogan and O. Y. Tsupko, Mon. Not. R. Astron. Soc 404, 1790 (2010), arXiv:1006.2321 [astro-ph.CO].
14. G. Z. Babar, F. Atamurotov, and A. Z. Babar, Phys. Dark Univ. 32, 100798 (2021).
15. G. S. Bisnovatyi-Kogan and O. Y. Tsupko, Mon. Not. R. Astron. Soc 404, 1790 (2010), arXiv:1006.2321 [astro-ph.CO].
16. G. S. Bisnovatyi-Kogan and O. Y. Tsupko, Mon. Not. R. Astron. Soc 404, 1790 (2010), arXiv:1006.2321 [astro-ph.CO].
17. F. Atamurotov, A. Abdujabbarov, and J. Rayimbaev, Eur. Phys. J. C 81, 118 (2021).
18. I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, A. Jeffrey, and D. Zwillinger, Table of Integrals, Series, and Products (2007).



УДК: 520.16

Сафарали ТУРСУНКУЛОВ,

Младший научный сотрудник Института астрономии РАН

E-mail: safarli@astrin.uz

Юсуф ТИЛЛАЕВ,

Старший научный сотрудник Института астрономии Академии наук Республики Узбекистан

Рецензент д.ф.-м.н А.Абдужаббаров

ASSESSMENT OF THE NIGHT-TIME SEEING AT THE MAIDANAK OBSERVATORY AND SUFFA PLATEAU

Annotation

This article presents an analysis of the optical atmospheric conditions at two major astronomical observation sites in Uzbekistan – the Maidanak Observatory and the Suffa Plateau. Data obtained with a modernized DIMM device at Maidanak Observatory in 2007 showed a median nighttime image quality of 0.66". Observations conducted at the Suffa Plateau between 2006 and 2008 indicated median and mean image quality values ranging from 1.05" to 1.11". The study revealed that Maidanak Observatory offers more favorable conditions for optical observations, while the Suffa Plateau is a promising site for radio astronomy research. The paper includes a comparative analysis of observational data collected at different installation heights and examines seasonal variations.

Key words: DIMM, night image quality, turbulence, arc seconds.

MAYDANAK OBSERVATORIYASI VA SUFFA PLATOSINING TUNGI TASVIR SIFATINI BAHOLASH

Annotatsiya

Ushbu maqolada O‘zbekiston hududidagi asosiy astronomik kuzatuv punktlari – Maydanak observatoriyasi va Suffa platosida kechgan optik atmosferik sharoitlar tahlil qilingan. Maydanak observatoriyasida 2007-yilda modernizatsiya qilingan DIMM qurilmasi yordamida olingan ma’lumotlar kechasi yulduz tasvirlarining o‘rtacha sifat ko‘rsatkichi 0,66" ni tashkil etganini ko‘rsatdi. Suffa platosida 2006–2008 yillarda olib borilgan kuzatuvlar esa 1,05"–1,11" oralig‘ida qiymatlar bilan baholandi. Tadqiqotlar natijasida Maydanak observatoriyasi optik kuzatuvlar uchun yanada qulay sharoitlarga ega ekani, Suffa platosi esa, o‘z navbatida, radioastronomik tadqiqotlar uchun istiqbolli maydon sifatida belgilandi. Maqola atmosferadagi turli balandliklarda turib olib olingan kuzatuv ma’lumotlarining taqqoslovi, shuningdek, mavsumiy farqlanishlar tahlilini o‘z ichiga oladi.

Kalit so‘zlar: DIMM (Differensial Yulduz Tasvirlarining Silkinishini O‘lchovchi Qurilma), tungi tasvir sifati, turbulentlik, burchak soniyalari.

ОЦЕНКА КАЧЕСТВА НОЧНОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ ОБСЕРВАТОРИИ МАЙДАНАК И ПЛАТО СУФФА

Аннотация

В данной статье представлен анализ оптических атмосферных условий на двух основных астрономических наблюдательных пунктах Узбекистана – обсерватории Майданак и плато Суффа. Данные, полученные с использованием модернизированного прибора DIMM в обсерватории Майданак в 2007 году, показали медианное качество ночного изображения 0,66". Наблюдения, проведённые на плато Суффа в 2006–2008 годах, продемонстрировали медианные и средние значения качества изображения в диапазоне от 1,05" до 1,11". Исследование показало, что обсерватория Майданак обладает более благоприятными условиями для оптических наблюдений, тогда как плато Суффа является перспективной площадкой для радиоастрономических исследований. В статье также представлено сравнительное исследование данных, полученных на различных высотах установки оборудования, и рассмотрены сезонные колебания атмосферных условий.

Ключевые слова: DIMM (Измеритель дифференциального дрожания изображений звезд), качество ночного изображения, турбулентность, угловые секунды.

Введение. На территории Узбекистана расположено несколько пунктов с благоприятными условиями для астрономических наблюдений благодаря уникальному сочетанию географических, климатических и атмосферных факторов. Это обеспечивает высокое качество наблюдений и делает страну важным центром астрономии в Центральной Азии.

Одним из крупнейших научных объектов является Майданакская обсерватория, где с использованием современных оптических телескопов проводятся исследования как ближних, так и дальних космических объектов: астероидов, космического мусора, квазаров, блазаров и скоплений галактик.

На плато Суффа реализуется проект создания радиоастрономической обсерватории с радиотелескопом РТ-70 (диаметр антенны – 70 метров), одной из мощнейших установок региона, предназначенной для изучения сверхновых, нейтронных звезд и структуры межзвёздной среды.

В последние годы в Узбекистане активизировались исследования в области слежения за искусственными спутниками Земли, определения их параметров, изучения астероидной опасности и концентрации космического мусора,

что особенно важно в условиях роста космической активности. Эти задачи требуют не только современного оборудования, но и постоянного мониторинга атмосферных параметров, влияющих на качество наблюдений.

Ключевым фактором успешных наблюдений является качество астрономического изображения, зависящее от атмосферной турбулентности и характеризуемое параметром ϵ_{FWHM} (полная ширина на половине максимальной интенсивности). Он показывает диаметр изображения звезды в фокальной плоскости телескопа при длине волны 500 нм.

Для измерения ϵ_{FWHM} применяется прибор DIMM (Differential Image Motion Monitor), ставший стандартом оценки качества изображения [1-3]. В 2007 году DIMM был модернизирован: заменена ПЗС-камера, разработано новое программное обеспечение с удобным графическим интерфейсом и автоматическим управлением слежением за звездой.

Экспериментальные исследования. После модернизации прибора DIMM в августе и сентябре 2007 года на Майданакской обсерватории было проведено в общей сложности 24 дня наблюдений, что позволило собрать достаточное количество данных для анализа и получения надежных результатов. В ходе этих наблюдений было установлено, что медианное качество ночного изображения на обсерватории составило $0.66''$ угловых секунды (Рис. 1), что является хорошим показателем и подтверждает высокую эффективность работы модернизированного прибора.

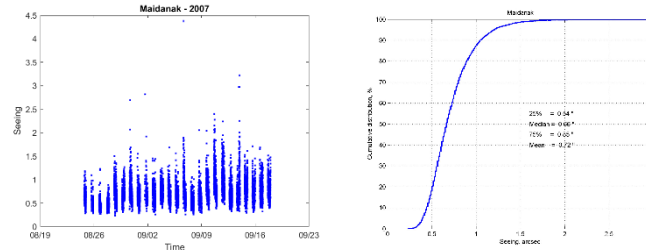


Рис.1. Полный ряд наблюдений и кумулятивное распределение оценок качества изображения 2007 г.

Для улучшения работы системы слежения, создаваемого на плато Суффа уникального прецизионного радиотелескопа РТ-70 необходима информация о качестве ночного изображения в месте его установки. Общие сведения об атмосферных условиях на плато Суффа, расположенном в Зааминском районе Джизакской области, даны в работе [4-5]. В июле–августе 2006 года на плато Суффа с помощью установленного на земле прибора DIMM были проведены измерения для оценки качества ночного оптического изображения. В результате анализа наблюдательных данных было выявлено, что медианные и средние значения качества ночного изображения (seeing) составляют соответственно $1.17''$ и $1.26''$ угловых секунд.

В 2007 году наблюдения были продолжены на специальной платформе высотой 5 метров. Наблюдения охватывают период с 7 ноября 2007 года по 14 июля 2008 года [6]. Медианное и среднее значение качества изображения за весь период наблюдений составили $1.05''$ и $1.11''$, соответственно. Несмотря, на благоприятные условия для проведения наблюдений в радиодиапазоне, плато Суффа уступает Майданаку в оптическом диапазоне.

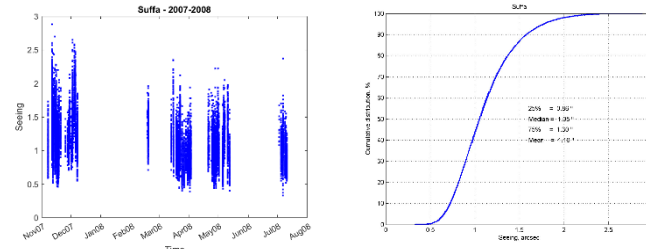


Рис.2. Полный ряд наблюдений и кумулятивные кривые качества ночного изображения на плато Суффа в период 2007-2008 гг.

Измерения, проведенные на плато Суффа в период с 2007 г. по 2008 гг., позволили исследовать влияние высоты установки прибора на точность и стабильность измерений. На рисунке 3 представлены полная последовательность наблюдений и кумулятивные кривые качества изображения, составленные на основе наблюдений, проведенных на плато Суффа в 2006 году, а также в 2007–2008 годах. Из рисунка видно, что оценки качества изображения, полученные при установке наблюдательного прибора на разных высотах, значительно различаются. В частности, результаты, полученные при установке прибора на платформу высотой 5 метров, оказались примерно на 7% лучше по сравнению с результатами, полученными на поверхности земли. Это указывает на наличие атмосферной турбулентности в приземном слое.

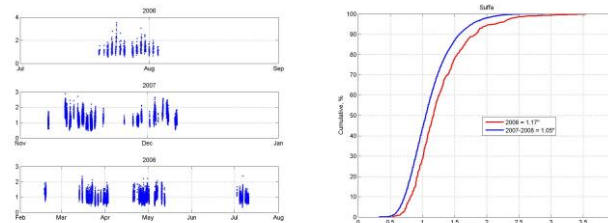


Рис.3. Полный ряд наблюдений и кумулятивные кривые качества ночного изображения на плато Суффа.

Таблица 1.

Статистический анализ месячного распределения качества изображений на плато Суффа (2007–2008 гг.).

Месяцы	Количество ночей	Количество данных	Медианное значение ϵ_{FWHM} (угл. сек)
--------	------------------	-------------------	---

Февраль	2	372	1.28
Март	12	3032	0.93
Апрель	12	2648	0.97
Май	6	1314	1.03
Июль	23	2916	0.97
Август	2	113	1.05
Ноябрь	15	4973	1.14
Декабрь	10	1972	1.37
Всего	82	17340	1.05

Для более глубокого анализа качества изображения был рассмотрен статистический анализ полученных данных. В таблице 1 показано распределение качества изображения по месяцам в различных сезонах года. Учитывая сезонные колебания атмосферы, можно отметить, что наблюдения в зимний период демонстрируют несколько более стабильные результаты по сравнению с летними месяцами. Это явление может быть связано с уменьшением интенсивности турбулентности в холодное время года, когда атмосфера менее подвержена конвективным потокам.

Количество наблюдательных ночей, продолжительностью более 4 часов за весь период наблюдений, составило 64 из общего числа 82 ночи. Это указывает на высокую эффективность наблюдательного процесса, поскольку продолжительные ночи обеспечивают более точные и достоверные данные, позволяя выявить устойчивые тенденции в изменении качества изображения.

Медианное и среднее значения качества изображения за весь период наблюдений составили 1".05 и 1".11 соответственно. Эти значения указывают на высокое качество атмосферных условий для астрономических наблюдений в данной местности. Показатель 1".05 соответствует довольно низкому уровню турбулентности, что является важным параметром при проведении наблюдений, особенно для высокоточных астрономических инструментов [7].

Дополнительно стоит отметить, что данные наблюдений с DIMM-прибора позволили создать базу для дальнейших исследований качества атмосферы на плато Суффа. Эти исследования имеют важное значение для планирования будущих астрономических миссий и установки нового оборудования на данной территории.

На основе проведенных нами детальных наблюдений и экспериментов, мы провели всесторонний анализ качества ночных изображений, полученных в обсерваториях Майдаанак и на плато Суффа. Оба этих мест представляют собой уникальные астрономические пункты, но различаются по множеству факторов, включая климатические условия, высоту над уровнем моря, а также расположение. На рисунке 4 представлена общая кривая качества изображения для астрономических объектов, полученных на этих двух наблюдательных пунктах. Как показали наши результаты [8], горная обсерватория Майдаанак существенно превосходит плато Суффа как по количеству ясных ночных часов, так и по качеству полученных снимков. Это объясняется несколькими причинами, среди которых можно выделить более стабильные атмосферные условия, меньшую загрязненность воздуха и, как следствие, более чистое и стабильное небо, что в свою очередь способствует получению более четких и точных астрономических данных. Данные, полученные на плато Суффа, также имеют свою ценность, однако количество ясных ночей и качество изображений там заметно уступает Майдаанак, что особенно важно для проведения длительных наблюдений за астрономическими объектами, требующих стабильных и качественных снимков.

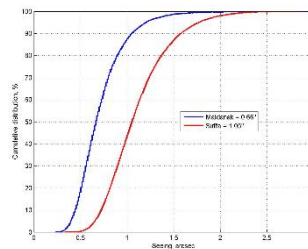


Рис.4. Сводная кумулятивная кривая качества изображения, на горе Майдаанак и на плато Суффа.

На рисунке 4 показано, что разрешение астрономических изображений в ночное время в обсерваториях Майдаанак и Суффа составило 0,66" и 1,05" угловых секунд соответственно. Атмосферные условия на первой обсерватории более благоприятные, поскольку обсерватория Майдаанак расположена на высоте 2650 м над уровнем моря, а плато Суффа - на высоте 2300 м. В результате качество ночных астрономических снимков на плато Суффа относительно ниже. Тем не менее, обсерватория Суффа способна конкурировать с некоторыми ведущими обсерваториями мира.

Закключение. Проведенные исследования качества астрономического изображения в обсерватории Майдаанак и на плато Суффа позволили получить ценные данные о стабильности атмосферных условий на этих территориях. Результаты наблюдений показали, что Майдаанакская обсерватория обладает лучшими характеристиками для оптических наблюдений благодаря низкому уровню атмосферной турбулентности и высокому количеству ясных ночей. В то же время плато Суффа, несмотря на уступающие оптические условия, является перспективной площадкой для радиоастрономических исследований, что делает его важным объектом для будущих научных проектов.

Сравнительный анализ данных подтвердил, что показатели качества изображения на плато Суффа остаются стабильными независимо от высоты установки DIMM-прибора, что свидетельствует о высокой однородности атмосферных условий. Это особенно важно для планируемой установки радиотелескопа РТ-70, который позволит проводить уникальные исследования в области радиоастрономии.

Данные наблюдений также показали, что качество ночного изображения варьируется в зависимости от сезона, при этом зимние месяцы демонстрируют более стабильные показатели. Эти результаты подчеркивают важность дальнейших исследований и мониторинга атмосферных условий в астрономических обсерваториях Узбекистана.

Таким образом, полученные результаты не только углубляют понимание особенностей атмосферы на исследуемых астрономических обсерваториях, но и являются ценным ресурсом для будущих научных миссий, включая установку новых телескопов и развитие международного сотрудничества в области астрономии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Sarazin M., Roddier F., The ESO differential image motion monitor // J. Astron. Astrophys., 1990, v. 227, p. 294.
2. Ильясов С.П., Байжуманов А.К., Сарацин М., Султанов Х.Б., Эгамбердиев Ш.А. Измерение качества ночного изображения на горе Майданак с помощью монитора дифференциальных дрожаний Европейской южной обсерватории // Письма в Астрономический журнал, 1999, т.25, №2, с.156-160.
3. Ehgamberdiev S., Bayjumanov A., Ilyasov S., Sarazin M., Tillayev Y., Tokovinin A., Ziad A. The astroclimate of Maidanak observatory in Uzbekistan // Astron. Astrophys. Suppl. Ser., 2000, v.145, p.293-304.
4. Y. Tillayev, S. Ehgamberdiev, S. Ilyasov. Preliminary results of site testing campaigns at Samarkand and Suffa observatories in Uzbekistan // Proceedings of the First Symposium on Seeing, 20 - 22 March 2007, Kona, Hawaii, page 153.
5. Семьянинов Р.В. и др. // Доклады АН РУз, 2004, № 5, с.26.
6. Тиллаев Ю.А., Турсункулов С.Б., Раупов Д.А., Ильясов С.П., Эгамбердиев Ш.А., Слуцкий В.Е., Шанин Г.И. Предварительные результаты измерения качества ночного изображения на плато Суффа, Материалы II Республиканской конференции молодых физиков Узбекистана, Ташкент, 25-26 ноября 2008 г., стр. 269-271.
7. Тиллаев Ю.А., Железнякова А. И., Ильясов С.П., Раупов Д.А., Слуцкий В. Е., Турсункулов С.Б., Шанин Г.И., Эгамбердиев Ш.А. Исследование астроклиматических параметров на плато Суффа // ДАН РУз, №1, с.44-47, 2011 г.
8. Турсункулов С.Б., Тиллаев Ю.А. Сравнение качества астрономического изображения в обсерваториях Узбекистана. // ЎзР ФА 70 йиллигига бағишланган. // Республика ёш олимлар илмий-амалий конференцияси маъруза тезислари тўплами. Тошкент, 26 декабр, 2013 й., 139 б.



UDK: 530.12:531.51

Dilmurod UMAROV,
Undergraduate Student at National University of Uzbekistan
E-mail: dilmurodumarov666@gmail.com
Mirjavohir MIROV,
Researcher at National Research University TIAME
E-mail: mirjavohirfaxriddinovich@gmail.com
Shavkat KARSHIBOEV,
Lecturer at Uzbek-Finnish Pedagogical Institute
E-mail: shavkat.qarshiboyev.89@bk.ru

Based on the review of professor F. Atamurotov, Inha University in Tashkent

GRAVITATIONAL LENSING OF SEN BLACK HOLES IN PLASMA MEDIUM

Annotation

We investigate the optical properties of the spacetime surrounding a Sen black hole, focusing on the photon sphere and weak gravitational lensing. Our analysis reveals that the effective charge of the Sen black hole significantly influences these phenomena. Specifically, an increase in the effective charge leads to a contraction in the radius of the photon sphere. Additionally, the bending angle of light rays diminishes as the effective charge increases. Our study provides observational bounds on the effective charge based on these optical characteristics. Our findings offer new insights into the impact of effective charge and plasma on the observational signatures of Sen black holes.

Key words: Sen black hole, plasma effects, photon motion, weak gravitational lensing

ГРАВИТАЦИОННОЕ ЛИНЗИРОВАНИЕ ЧЁРНЫХ ДЫР СЕНА В ПЛАЗМЕННОЙ СРЕДЕ

Аннотация

Мы исследуем оптические свойства пространства-времени вокруг черной дыры Сена, сосредотачиваясь на фотонной сфере и слабом гравитационном линзировании. Наш анализ показывает, что эффективный заряд черной дыры Сена существенно влияет на эти явления. В частности, увеличение эффективного заряда приводит к уменьшению радиуса фотонной сферы. Кроме того, угол отклонения световых лучей уменьшается с увеличением эффективного заряда. Наше исследование предоставляет наблюдательные ограничения на эффективный заряд, основанные на этих оптических характеристиках. Наши результаты дают новые представления о влиянии эффективного заряда и плазмы на наблюдаемые характеристики черных дыр Сена.

Ключевые слова: черная дыра Сена, эффекты плазмы, движение фотонов, слабое линзирование

SEN QORA TUYNUKLARINING GRAVITATSION LINZALANISHI PLAZMA MUHITIDA

Annotatsiya

Biz Sen qora tuynugi atrofidagi fazo-vaqtning optik xususiyatlarini o'rganamiz va foton orbitasi hamda zaif gravitatsion linzalanganlikka e'tibor qaratamiz. Tahlilimiz shuni ko'rsatadiki, Sen qora tuynugidagi samarali zaryad ushbu hodisalarga sezilarli ta'sir ko'rsatadi. Xususan, samarali zaryadning oshishi foton sferasining radiusining kamayishiga. Bundan tashqari, yorug'lik nurlarining egilish burchagi samarali zaryad ortishi bilan kamayadi. Tadqiqotimiz ushbu optik xususiyatlarga asoslangan holda samarali zaryad bo'yicha kuzatuv cheklovlarini taqdim etadi. Natijalarimiz Sen qora tuynugidagi samarali zaryad va plazmaning kuzatiladigan belgilarga ta'siri bo'yicha yangi tushunchalarni taqdim etadi.

Kalit so'zlar: Sen qora tuynugi, plazma ta'siri, foton harakati, zaif gravitatsion linzalanganlik

Introduction. Gravitational lensing, a key prediction of Einstein's general relativity, occurs when light bends around a massive object like a black hole [1]. This effect was first confirmed by Eddington's observation of light bending around the Sun, highlighting its importance in astrophysics [2]. In black hole studies, gravitational lensing is particularly interesting due to strong gravitational fields [3]. Weak gravitational lensing, where light is slightly deflected at large distances from the black hole, provides valuable insights into their properties and helps test gravity theories [4]. It is also crucial for detecting dark matter and dark energy [5,6]. Studies on weak lensing by different black hole types, including rotating ones, have been extensively conducted [7,8]. Near black holes, surrounding plasma—such as from an accretion disk—can further affect light bending. Plasma modifies lensing properties and alters the black hole's shadow [9]. Perlick, Bisnovaty-Kogan, and Tsupko have made significant contributions to understanding these effects [10-13]. These studies are particularly relevant for interpreting high-resolution observations, such as those from the Event Horizon Telescope (EHT), which provide new insights into gravity in extreme conditions [14,15].

Dynamics around black hole. A. Sen Black Hole. The action describing the spacetime of the Sen black hole in the string frame is presented as follows:

$$S = \int d^4x \sqrt{-g} e^{-\Phi} \mathcal{L} \quad (1)$$

The metric function derived in this configuration was found by Sen in Ref. [21] and reads:

$$f(r) = 1 - \frac{2M}{r + q_m^2/M}, \quad (2)$$

where q_m is an effective charge measured by a static observer at infinity, which characterizes specific hair. It is not difficult to notice that at $q_m = 0$, the Sen metric of the black hole coincides with the Schwarzschild metric. Here, we introduced a new variable like $q_m^2 = q$ just for convenience.

B. Null geodesic in dyonic Sen spacetime. In this subsection, we examine the dynamics of photon motion near a black hole when it is surrounded by plasma. To analyze this scenario, we can conveniently utilize the Hamilton-Jacobi equation, which is given by:

$$H(x^\alpha, p_\alpha) = \frac{1}{2} \tilde{g}^{\alpha\beta} p_\alpha p_\beta. \quad (3)$$

Here, x^α describes the spacetime coordinates. We can use definition of the effective metric tensor $\tilde{g}^{\alpha\beta}$ as

$$\tilde{g}^{\alpha\beta} = g^{\alpha\beta} - (n^2 - 1)u^\alpha u^\beta, \quad (4)$$

where u^β represents the four-velocity of the photon, and n signifies the refractive index of the medium. It can be determined using the following formula

$$n^2 = 1 - \frac{4\pi e^2 N(r)}{m_e \omega(r)^2}, \quad (5)$$

where e and m_e represent the electron's charge and mass, respectively, and N denotes the electron number density. The photon frequency $\omega(r)$, as observed by a stationary observer, is determined using the gravitational redshift equation

$$\omega(r) = \frac{\omega_0}{\sqrt{f(r)}}. \quad (6)$$

Here $\omega_0 = \text{const}$ is the frequency measured by observer at infinity. Light can propagate in plasma only when its frequency is greater than the plasma frequency, therefore $n > 0$ condition must be done. The orbital radius of light encircling a black hole, specifically the one forming a photon sphere with a radius r_{ph} , is obtained by solving the following equation

$$\left. \frac{d(h^2(r))}{dr} \right|_{r=r_{ph}} = 0 \text{ and } h^2(r) \equiv r^2 \left[\frac{1}{f(r)} - \frac{\omega_p^2(r)}{\omega_0^2} \right]. \quad (7)$$

C. Homogeneous plasma. First, we consider a homogeneous (uniform) plasma case with $\omega_p^2(r) = \text{const}$. In this case we can solve Eq. (8) analytically and it is written as

$$\frac{r_p}{M} = \frac{\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2}\right) \left(2 - \frac{q}{M^2}\right) + \sqrt{\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2}\right) \left(2 - \frac{q}{M^2}\right) + \frac{1}{4} - \frac{1}{2}}}{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2}}. \quad (8)$$

From Fig. 1 (upper panel) it is easy to see that in the case of homogeneous plasma radius of photon sphere decreases with increasing parameter q/M and increases with increasing plasma frequency.

D. Inhomogeneous plasma. In this subsection we study photonic spheres in the presence of inhomogeneous plasma, where the plasma frequency must satisfy a simple power law of the form

$$\omega_p^2(r) = \frac{z_0}{r^k}, \quad (9)$$

Where z_0 and $k > 0$ are free parameters. From Fig. 1 (middle and lower panels) it is easy to see that in the case of inhomogeneous plasma photon sphere radius decreases with increasing parameter q/M and the parameter k , and increases with increasing ratio $z_0/M\omega_0^2$.

Effects of plasma medium on Gravitational weak lensing. The gravitational effects in the weak-field approximation can be analyzed by applying the following decomposition of the spacetime around a dense object [14]

$$g_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta} + h_{\alpha\beta}, \quad (10)$$

Now we want to examine the plasma effects on the bending angle of the light rays. In the case of plasma medium, the deflection angle can be written as

$$\hat{\alpha}_i = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(h_{33} + \frac{h_{00}\omega^2 - K_e N(x^i)}{\omega^2 - \omega_e^2} \right)_{,i} dz \quad (11)$$

where b is the impact parameter, which is characterized by the radius-vector $r^2 = b^2 + z^2$. Next, we analyze the influence of the plasma medium in conjunction with the gravitational field of the Sen black hole as an application of the previously outlined formalism. In the Cartesian coordinates, the components $h_{\alpha\beta}$ can be expressed as

$$h_{00} = \frac{R_s}{r} - \frac{2q}{r^2}, h_{ik} = \left(\frac{R_s}{r} - \frac{2q}{r^2} \right) n_i n_k, h_{33} = \left(\frac{R_s}{r} - \frac{2q}{r^2} \right) \cos^2 x \quad (12)$$

where $R_s = 2M$, $\cos x = z/\sqrt{b^2 + z^2}$ and $r = \sqrt{b^2 + z^2}$, b is the impact parameter signifying the closest approach of the photons to the black hole. By utilizing the previously stated expressions in equation (10), one can determine the light deflection angle in relation to b for a black hole enveloped by plasma:

$$\hat{\alpha}_b = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{2r} \left(\partial_r \left(\left(\frac{R_s}{r} - \frac{2q}{r^2} \right) \cos^2 x \right) + \partial_r \left(\frac{R_s}{r} - \frac{2q}{r^2} \right) \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_e^2} - \frac{K_e}{\omega^2 - \omega_e^2} \partial_r N \right) dz \quad (13)$$

A. Deflection angle in the presence of plasma. It is evident from Eq. (13) that the expression accounts for both gravitational and plasma effects. Here, we reformulate the integral representation of the deflection angle by distinguishing these

effects
follows:

$$\hat{\alpha}_1 = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{r} \left(\frac{dh_{33}}{dr} \right) dz, \hat{\alpha}_2 = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{r} \left(\frac{1}{1 - \omega_e^2/\omega^2} \frac{dh_{00}}{dr} \right) dz, \hat{\alpha}_3 = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{r} \left(\frac{K_e}{\omega^2 - \omega_e^2} \frac{dN(r)}{dr} \right) dz \quad (14)$$

Now, we calculate the integrals for the deflection angle for the different configurations of the plasma distribution.

B. Uniform plasma. First, we examine the influence of uniform plasma. We begin by computing the terms associated solely with the effects of spacetime curvature.

$$\hat{\alpha}_1 = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{r} \left(\frac{dh_{33}}{dr} \right) dz = -\frac{R_s}{b} + \frac{\pi q}{2b^2}. \quad (15)$$

One can see from Eq. (15) that when $q = 0$ we will get $\hat{\alpha}_1 = R_s/b$. The second term is a combined expression that represents the interaction between spacetime and plasma effects and is given by the following form:

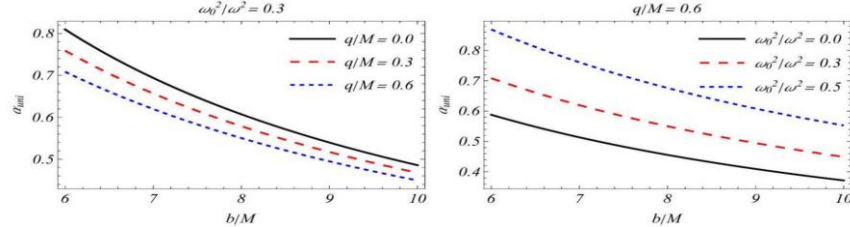


FIG. 1: Dependence of the deflection angle of the light rays in the presence of uniform plasma on impact parameter for different values of charge q and plasma frequency.

$$\hat{\alpha}_2 = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{r} \left(\frac{1}{1 - \omega_e^2/\omega^2} \frac{dh_{00}}{dr} \right) dz = -\frac{R_s}{b(1 - \omega_0^2/\omega^2)} + \frac{\pi q}{b^2(1 - \omega_0^2/\omega^2)}. \quad (16)$$

Where $\omega_0^2 = \omega_e^2 = \text{const}$. The Eq. (16) also turns to $\hat{\alpha}_2 = R_s/b$ at $q = 0$. Thus, one may get the expression for the deflection

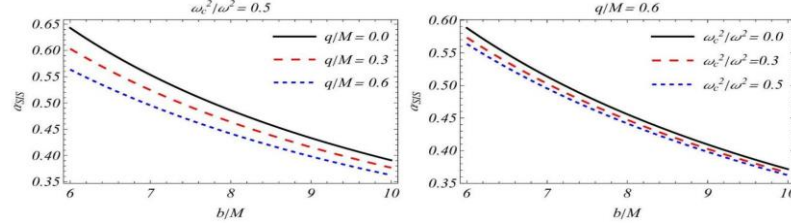


FIG. 2: Dependence of deflection angle of the light rays on impact parameter for different values of charge q and plasma frequency.

angle for Schwarzschild case $\hat{\alpha}_b = 2R_s/b$ when $q = 0$. The deflection angle of light from Eq. (14) in the case of uniform plasma around the Sen black hole can be expressed as

$$\hat{\alpha}_{\text{uni}} = \left(1 + \frac{1}{1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2}} \right) \frac{R_s}{b} - \left(1 + \frac{2}{1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2}} \right) \frac{\pi q}{2b^2}. \quad (17)$$

Fig. 1 illustrates the photon deflection angle $\hat{\alpha}_{\text{uni}}$ as a function of the impact parameter b for various values of the coupling constant q (left panel) and the plasma parameter $\frac{\omega_0^2}{\omega^2}$ (right panel). An increase in the impact parameter and effective charge leads to a decrease in the deflection angle. Moreover, the deflection angle can be larger in the presence of uniform plasma compared to the vacuum scenario.

C. Singular isothermal sphere. The Singular Isothermal Sphere (SIS) serves as the most appropriate model for analyzing the properties of a photon's gravitational lens. It was initially proposed to study lensing behavior and galaxy clusters. The SIS represents a spherical gas cloud characterized by a density that extends infinitely at its core. The plasma frequency is expressed in the following form [14]

$$\omega_e^2 = K_e N(r) = \frac{K_e \sigma_v^2}{2\pi k m_p r^2}. \quad (20)$$

Here, m_p represents the proton mass, and k is a dimensionless constant typically linked to the dark matter universe. Now, the deflection angle can be determined in the presence of plasma with the SIS distribution surrounding the Sen black hole by applying Eq. (14). In this case, we have decomposed the deflection angle as in Eq. (14) and represented it as follows.

$$\hat{\alpha}_{\text{SIS}} = \hat{\alpha}_{\text{SIS}}^{(1)} + \hat{\alpha}_{\text{SIS}}^{(2)} + \hat{\alpha}_{\text{SIS}}^{(3)}. \quad (21)$$

As the first term excludes the influence of plasma, it retains the same structure as Eq. (14)

$$\hat{\alpha}_{\text{SIS}}^{(1)} = \hat{\alpha}_1$$

$$\hat{\alpha}_{\text{SIS}}^{(2)} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{r} \left(\frac{1}{1 - \omega_e^2/\omega^2} \frac{dh_{00}}{dr} \right) dz = -\frac{R_s}{b} + \frac{3qR_s^2 \omega_c^2}{4b^4 \omega^2} - \frac{2}{3} \frac{R_s^3 \omega_c^2}{b^3 \pi \omega^2} + \frac{\pi q}{b^2}$$

To comprehend the impact of the SIS on the photon's path, we have graphed the deflection angle $\hat{\alpha}_{\text{SIS}}$ as a function of the impact parameter b , see Fig. 2. Interestingly, we observe that both the uniform plasma and the SIS medium exhibit similar characteristics concerning the parameter b . From Fig. 2, it can be seen that the deflection angle $\hat{\alpha}_{\text{SIS}}$ decreases due to plasma inhomogeneity

exerting an opposing influence, which is significantly stronger than in a vacuum. We found that $\hat{\alpha}_{\text{SIS}}$ diminishes as $\frac{\omega_c^2}{\omega^2}$ increases (left panel), and conversely, $\hat{\alpha}_{\text{SIS}}$ decreases as q grows (right panel). Therefore, the presence of the SIS around the black hole notably affects the trajectory of passing massless particles.

Conclusion. We have studied how weak gravitational lensing and the photon sphere of Sen black holes change in a plasma medium. Our results show that the black hole's effective charge has a strong influence on these optical effects. We discovered that as the effective charge of a Sen black hole increases, the radius of the photon sphere decreases. The effective charge also influences the bending angle of light rays. Our results indicate that as the effective charge increases, the bending angle diminishes. In particular, we have taken into account uniformly distributed plasma and a singular isothermal sphere medium. We also demonstrated that the deflection angle grows as the plasma frequency rises in the case of a homogeneous plasma due to the medium's refractive properties. However, when the plasma is inhomogeneous (SIS), the deflection angle decreases with increasing plasma frequency.

REFERENCES

1. A. S. Eddington, Space, time and gravitation, an outline of the general relativity theory (1920).
2. F. W. Dyson, A. S. Eddington, and C. Davidson, Phil. Trans. R. Soc. 220, 291 (1920).
3. V. Perlick, Living Rev. Relativ. 7, 9 (2004).
4. K. S. Virbhadra, Phys. Rev. D 79, 083004 (2009), 0810.2109.
5. C. M. Will, Class. Quant. Grav. 32, 124001 (2015), 1409.7812.
6. R. A. Vanderveld and et al., Phys. Rev. D 85, 103518 (2012).
7. P. Schneider, J. Ehlers, and E. E. Falco, Gravitational Lenses (1992).
8. A. O. Petters, H. Levine, and J. Wambsganss, Singularity theory and gravitational lensing (2001).
9. K. S. Virbhadra and G. F. R. Ellis, Phys. Rev. D. 62, 084003 (2000).
10. V. Bozza, S. Capozziello, G. Iovane, and G. Scarpetta, Gen. Rel. Grav. 33, 1535 (2001).
11. M. Sereno, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. 344, 942 (2003).
12. V. Perlick, Ray Optics, Fermat's Principle, and Applications to General Relativity, vol. 61 (2000).
13. O. Y. Tsupko and G. S. Bisnovaty-Kogan, Grav. Cosmol. 15, 184 (2009).
14. G. S. Bisnovaty-Kogan and O. Y. Tsupko, Mon. Not. R. Astron. Soc. 404, 1790 (2010).



Rustam USANOV,
Samarqand davlat universiteti assistenti
E-mail: usanov.rustam1989@gmail.com
Uchkun ASHIROV,
Samarqand davlat universiteti tayanch doktoranti
Tolganoy SHARAFOVA,
Samarqand davlat universiteti tayanch doktoranti
Alisher NURIMOV,
Samarqand davlat universiteti tayanch doktoranti

PhD I.Turapov taqrizi asosida

ELECTRICAL PROPERTIES AND ELECTRONIC STRUCTURE OF ZN DIFFUSION COMPENSATED AND STRONGLY COMPENSATED SILICON

Annotation

This scientific article presents the synthesis of heavily compensated p(n)-Si<P, Zn> substrates with various conductivity types and a wide range of specific electrical resistances at room temperature by diffusing Zn into the semiconductor substrate to form additional levels in the energy diagram of MOS structures. The aim is to enhance the sensitivity of the substrate to external influences. The experimental results provide values for mobility, charge carrier concentration, and specific resistance, based on which certain additives were introduced into the energy diagram of the silicon substrate, considering the experimental data.

Key words: compensated silicon, diffusion, thermal evaporation in vacuum, electron beam evaporation, thin film.

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ZN-ДИФФУЗИОННО-КОМПЕНСИРОВАННОГО И СИЛЬНОКОМПЕНСИРОВАННОГО КРЕМНИЯ

Аннотация

В данной научной статье представлено синтезирование сильно компенсированных подложек p(n)-Si<P,Zn> с различными типами проводимости и широким диапазоном удельного электрического сопротивления при комнатной температуре. Это достигается диффузией Zn в полупроводниковую подложку с целью формирования дополнительных уровней на энергетической диаграмме МОП-структур и повышения её чувствительности к внешним воздействиям. В результатах эксперимента приведены значения подвижности, концентрации носителей заряда и удельного сопротивления, на основе которых в энергетическую диаграмму кремниевой подложки были внесены определённые добавки с учётом экспериментальных данных.

Ключевые слова: компенсированный кремний, диффузия, термическое испарение в вакууме, электронно-лучевое испарение, тонкая плёнка.

SO/SiO₂/SI<P,ZN> GIBRID STRUKTURASI UCHUN KUCHLI KOMPENSIRLANGAN SI<P,ZN> TAGLIKLARNING ELEKTRIK XOSSALARI VA ENERGETIK DIAGRAMMASI

Annotatsiya

Ushbu ilmiy maqolada MOY strukturalarining energetik diagrammasida yarimo'tkazgich taglikka Zn diffuziya qilish orqali uning tashqi ta'sirlarga sezgirligini oshirish maqsadida turli o'tkazuvchanlik turi va xona haroratida keng oraliqdagi solishtirma elektr qarshiligiga ega bo'lgan kuchli kompensirlangan p(n)-Si<P,Zn> tagliklarini sintez qilish, ularning elektr xossalari o'zgarishining tajribaviy natijalari va tahlillari keltirilgan. Tajriba natijalarida harakatchanlik, zaryad tashuvchilar konsentratsiyasi va solishtirma qarshilik qiymatlari keltirilgan va ular asosida kremniy taglikning energetik diagrammasiga tajriba natijalariga asoslangan holda ma'lum qo'shimchalar kiritilgan.

Kalit so'zlar: kompensirlangan kremniy, diffuziya, vakuumda termik bug'latish, elektron nurli bug'latish, yupqa qatlam.

Kirish. Spintronika, biotibbiyot fizikasi, magnitooptika kabi sohalar ehtiyoji uchun zarur bo'lgan diskret asboblardan xotiralar, turli xil tashqi ta'sirlarga nisbatan o'ta sezgir bo'lgan sensorlar va h.k.larni yaratishda xilma-xil gibridd strukturalardan foydalanish muammolarini tadqiq qilish jadal sur'atlar bilan davom yetmoqda [1]. Mana shunday gibridd strukturalar orasida monokristall kremniy asosida hosil qilingan metall-diyelektrik-yarimo'tkazgich (MDY) yoki metall-oksid-yarimo'tkazgich (MOY) strukturalar istiqbolli hisoblanadi [2]. Ma'lumki MDY strukturalar asosida allaqachon transistorlar, magnit xotiralar va sensorlar, turli integral hamda diskret qurilmalar yaratilgan va ular zamonaviy elektronika sanoati ishlab chiqarishiga salmoqli hissa qo'shib kelmoqda [3]. Shunga qaramasdan ularning sezgirligi, barqaror ishlash darajasi va h.k.lar kabi asosiy parametrlarini yaxshilash bo'yicha ilmiy tadqiqotlar davom etmoqda [4]. Shu paytgacha o'rganilgan MDY yoki MOY strukturalarda yarimo'tkazgichli taglik parametrlariga chuqur e'tibor qaratilmaganligini, ayniqsa kompensirlangan va kuchli kompensirlangan yarimo'tkazgichlardan

umuman foydalanilmagan, yarimo'tkazgichli taglik sifatida kompensirlangan kremniy materialidan foydalanish yaxshi natijalar berish mumkin.

Ushbu ishda monokristall kremniy taglikka Zn atomlarini diffuziya qilish va uning taglik xossalari tasiri haqida so'z yuritilgan. Rux atomlarini kremniyga yuqori temperaturali diffuziya usulida kiritish birinchi marotaba [6] ishda qaralgan. Unga ko'ra rux atomlari kremniyda ionlashish energiyasi $E_v+0,31$ eV bo'lgan akseptor va ionizatsiya energiyalari $E_v+0,08$, $E_i+0,09$ va $E_v+0,13$ eV bo'lgan hamda rux atomlarining kimyoviy elementlar davriy tizimining III guruh elementlari bilan komplekslariga tegishli deb qaralgan, sayoz akseptor sathlarini kuzatishgan. Keyinroq, Karlson [7] tomonidan rux atomlarining kremniydagi holatini o'rganish bo'yicha nisbatan keng qamrovli tadqiqotlar o'tkazilgan. Uning tadqiqotlariga ko'ra rux atomlari avval [6] tomonidan qayd qilingan $E_v+0,31$ sathdan tashqari yana bitta $E_c-0,55$ eV akseptor sathi hosil qilishini aniqlagan. Si<P,Zn> namunalari bunday sathlarining paydo bo'lishi uning o'tkazuvchanlik turiga bog'liq bo'lar yekan. Masalan, n – tipli namunalarda $E_c-0,55$ eV akseptor sathi namoyon bo'lsa, p – tipli namunalarda esa har ikkala akseptor sath ham o'zini namoyon qilar ekan. [8] ish mualliflari tomonidan n-Si<P,Zn> namunalari optik yutilishlar bo'yicha o'tkazilgan tadqiqotlar haqiqatan ham unda ikkita chuqur energetik sath borligini ko'rsatgan va muallif bu sathlarni [6] ish mualliflaridan farqli o'laroq rux atomlari yoki "rux-vakansiya" komplekslari bilan bog'langan. 1200 °C temperaturada diffuziya qilingan va keyinchalik 900 °C da 2 soat davomida qayta ishlov berilgandan keyin Si-Zn qattiq qorishmasining yemirilishi natijasida yuzaga kelgan ikkita donor $E_c-0,1\pm0,03$ eV va $E_c-0,4\pm0,03$ eV sathlarni ham qayd qilishgan va ularni yemirilish tufayli yuzaga keladigan komplekslar yoki tugunlar orasidagi rux atomlariga tegishli deb hisoblashgan. Bu sathlardan tashqari ionizatsiya energiyasi $E_v+0,17$ eV [9], [10] bo'lgan yana bitta sath qayd qilishgan va bu sathni rux atomlarining III guruh elementlari bilan hosil qilgan komplekslariga tegishli deb hisoblashgan.

Tajriba tafsilotlari. Yuqorida ta'kidlanganidek xona haroratida turli o'tkazuvchanlik turi va solishtirma qarshilikka ega bo'lgan, diffuziya usuli bilan legirlangan Si<P,Zn> namunalari [11] ishda keltirilgan, diffuzant gazi elastik bosimini hisobga oluvchi usul yordamida olindi. Yuqori haroratli diffuziya jarayonida yuzaga kelgan kremniy sirtidagi rux bilan boyigan qatlamlarni olib tashlash uchun mexanik va kimyoviy ishlov berish usulidan foydalanildi va namunaning har bir yon tomonidan o'rta hisobda 50 μ m qalinlikdagi qatlam olib tashlandi. Natijada nisbatan bir jisli legirlangan, o'tkazuvchanligi n – yoki p – tipli, solishtirma qarshiligi xona temperaturasida $10^2\div10^4$ $\Omega\cdot$ cm oraliqda yotuvchi, kuchli kompensirlangan Si<P,Zn> namunalari ega bo'lindi. Olingan bu namunalar asosida MDY strukturalar tayyorlandi. Yarimo'tkazgichli taglik sifatida rux atomlari bilan kuchli kompensirlangan kremniy monokristallaridan foydalanildi. Taglikdagi aralashmalar konsentratsiyasi va o'tkazuvchanlik turi diffuziya jarayonida rux atomlarining parni bosimini o'zgartirish orqali boshqarildi. Dastlabki taglik sifatida o'sish jarayonida fosfor atomlari bilan legirlangan, geometrik o'lchamlari $8\times3\times1$ mm³, xona haroratida solishtirma qarshiligi 1 $\Omega\cdot$ cm atrofida, uzun tomonining kristallografik yo'nalishi [111] bo'lgan, monokristall kremniy (n-Si<P>) namunalari tanlab olindi. Tanlab olingan n-Si<P> namunalari rux atomlarini diffuziya qilish uchun tozaligi 99.96 % bo'lgan Zn elementidan foydalanildi. Rux atomlarining kremniydagi diffuziya koeffitsiyenti va eruvchanligining temperaturaga bog'liqlik ifodalaridan foydalangan holda turli solishtirma qarshilikli va o'tkazuvchanlik turiga ega bo'lgan namunalarni olish uchun diffuziya temperaturasi va vaqti [11] ishdagi kabi aniqlandi. Diffuziya jarayoni quyidagi ketma-ketlikda amalga oshirildi:

1). n-Si<P> bo'lagi sirtida mavjud bo'lgan tabiiy oksid qatlamini olib tashlash uchun namunalar fluorid kislotasi (HF) ga botirilib 15 s davomida ushlab turildi.

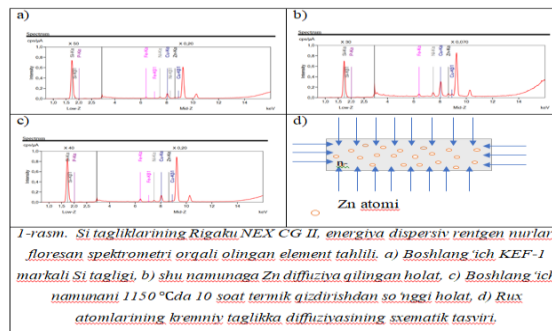
2). Rux atomlarining kremniy difuziyasini amalga oshirish uchun diffuziya haroratidagi rux bug'larning elastik bosimini aniqlash uchun rux massasi va absolyut temperaturani bilgan holda ideal gazlar uchun Medeleyev-Klaypeyron tenglamasidan foydalanildi.

3). Massasi o'lchangan Zn elementining bo'lagi haroratga chidamli, bir uchi kavsharlangan kvarts shisha naycha ichiga n-Si<P> bilan birgalikda joylashtirildi va uning ichidagi havo bosim $5\cdot10^{-4}$ mm Hg ustuniga teng bo'lgunga qadar so'rib olindi.

4). Kvarts naychani ochiq uchi qizdirish yo'li bilan kavsharlab yopiladi va u 1150 °C haroratni ± 0.5 °C aniqlikda ushlab tura oladigan gorizontal diffuzion pechga joylashtirildi. Berilgan sharoitlarda rux atomlarining kremniyga diffuziyalanish vaqti 10 soatni tashkil qildi.

5). Diffuziya jarayonidan so'ng namunalarning xona haroratidagi qarshiliklari 188 va 348 $\Omega\cdot$ cm ga teng bo'lib, ular kovakli o'tkazuvchanlikka ega bo'ldi.

Natijalar va muhokama. Yangi avlod energiya dispersli rentgen nurlari floresan spektrometrlari bu ikkinchi avlod Energiya dispersiv rentgen-fluoresans (EDXRF) spektrometrlari bo'lib, ular tez, sifatli va miqdoriy ko'rsatkichlarni ta'minlaganligi bois biz ushbu ilmiy tadqiqot ishida foydalanilgan Si tagliklarimizning element tahlilini Rigaku NEX CG II spektrometri orqali tahlil qildik (1-rasm). Spekt tahlilidan ko'rinib turibdiki boshlang'ich kremniy taglikda Zn miqdori 0.0010 % massa ulushga ega. Bu miqdor o'zgarishi diffuziyadan qariyb 3 baravar oshib, 0.0033 % ga etganligini (b) rasmda keltirilgan rentgen spektr tahlilidan ko'rish mumkin. Demak, bundan ko'rinadiki boshlang'ich kremniy namunasiga Zn atomlari diffuziya qilinishiga erishilgan. Biroq, (1-b rasm) spektr tahlilida ko'rishimiz mumkinki diffuziyadan so'ng Fe, Ni, va Cu atomlarining ham massa ulushlarining kichik ortishini ko'rish mumkin. Bu o'zgarish kremniy taglik namunasining solishtirma qarshiligiga ta'sirini o'rganish maqsadida kremniy taglikning yakka o'zi alohida ampulada, tashqi sharoit diffuziya qilingan boshqa ampulalarnikidek, termik qizdirildi. Ushbu kremniy taglikning Spektral talili (c) rasmda keltirilgan bo'lib, undan ko'rish mumkinki kvarts ampula va atrof muhitning iflosligi hisobiga kremniy taglikda begona atomlarning ulushi biroz oshgan, xususan Ni 0.0019 %, Fe 0.0021 %, Cu 0.0069 %, ammo uning solishtirma qarshiligi deyarli o'zgarishsiz qolgan.



Bundan kelib chiqqan holda, diffuziya qilingan kremniy taglikning solishtirma qarshiligi va tashuvchilar tipi o'zgarishi Zn atomlarining diffuziyasi bilangina bog'liq ekanligini aytish mumkin bo'ladi. Si tagliklarga Zn atomlarini diffuziya qilish natijasida solishtirma qarshilikni keng diapazonda o'zgartirish va o'tkazuvchanlik tipini ham boshqarish imkoniga ega bo'ldik.

Tekshirilayotgan namunalarning diffuziya jarayonidan oldingi va keyingi asosiy parametrlari (solishtirma elektr qarshiligi, harakatchanligi, zaryad tashuvchilar konsentratsiyasi) ularda Xoll effektini o'lchash orqali aniqlandi. Dastlabki namunalardagi oksid qatlami, diffuziya qingandan keyingi namunalarda rux atomlari bilan boyigan qatlamlar olib tashlangandan keyin namunalar yon tomonlariga kumush asosidagi o'tkazuvchan yelimdan foydalangan holda omik kontaktlar hosil qilindi va tegishli o'lchashlar [12] ishda ko'rsatilgani kabi amalga oshirildi.

Kremniy namunalarning diffuziya jarayonidan oldingi va keyingi holatlardagi parametrlari quyidagi 1 – jadvalda keltirilgan. Ushbu jadvalda berilgan diffuziya sharoitida o'ta kompensasiyalangan namunalarni olishga muvoffaq bo'linganligi ko'rinib turibdi. Kompensirlangan yoki kuchli kompensirlangan namunalar olish uchun diffuziya jarayonining boshqa parametrlarini o'zgartirmasdan diffuziya temperaturasini bir oz pasaytirish kerak bo'ladi.

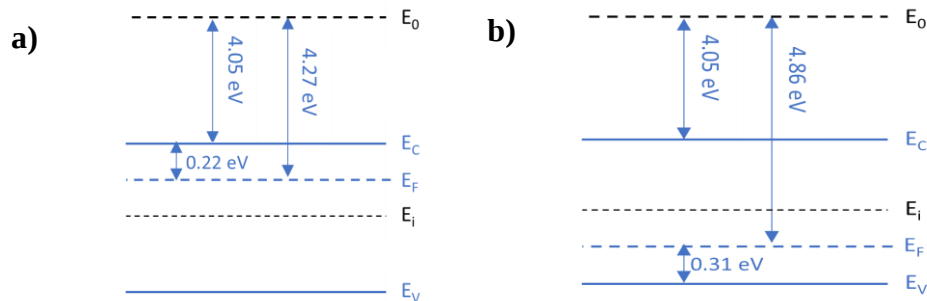
1-jadval

Namuna	$\rho, \Omega \cdot \text{cm}$	$\mu, \text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$	n, sm^{-3}
n-Si<P>	1,27	1334	$4,63 \cdot 10^{15}$
p-Si<P,Zn>	348,07	338,33	$5,24 \cdot 10^{13}$
p-Si<P,Zn>	188,44	242,79	$1,35 \cdot 10^{14}$

Shuni alohida ta'kidlash kerakki kremniydan elektronlarning chiqish ishi legirolovchi aralashma turi va uning konsentratsiyasiga bog'liq bo'ladi. Ushbu tadqiqotlarda biz fosfor atomlari bilan o'sish jarayonida legirlangan KEF-1 rusumli sanoat kremniysidan tayyorlangan taglik hamda yuqori temperaturali diffuziya usulida olingan kuchli kompensirlangan p-Si<P,Zn> namunalaridan foydalandik. Kremniydan elektronlarning chiqish ishini quyidagi tenglama orqali baholash mumkin:

$$q\varphi_s = q\chi_{Si} + (E_C - E_F), \quad (1)$$

bu yerda $q\chi_{Si} = 4,05 \text{ eV}$ –kremniy atomining elektronga yaqinligi energiyasi va $E_C - E_F$ –Fermi sathidan o'tkazuvchanlik sohasining chegarasigacha bo'lgan energetik masofa. n-Si<P> hoida $E_C - E_F = kT \ln(N_C/N_D)$ ifoda bilan aniqlanadi, bu yerda N_C o'tkazuvchanlik zonasining chegarasidagi holatlarning effektiv zichligi bo'lib, u 300 K temperaturada $N_C = 2,8 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ga teng, N_D esa xona temperaturasida namunadagi elektronlar konsentratsiyasi.



2-rasm. p-Si<P> (a) va p-Si<P,Zn> (b) namunalari uchun hisoblash natijalariga asoslangan energetik soha diagrammasi.

Solishtirma qarshiligi $\rho = 1,27 \Omega \cdot \text{cm}$ li n-Si<P> (111) namunasi uchun $N_D = 4,63 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ va $E_C - E_F = 0,22 \text{ eV}$ bo'lib elektronlarning chiqish ishi esa $4,27 \text{ eV}$ ga teng bo'ladi. p-Si<P,Zn> (111) namunalari uchun esa $E_C - E_F = E_g - E_F - E_V$ bo'lib E_g –kremniy monokristallining taqiqlangan sohasi kengligi, $E_F - E_V$ – esa $E_F - E_V = kT \ln(N_V/N_A)$ formula bilan hisoblangan (bu formuladagi N_V valent sohasining chegarasidagi holatlarning effektiv zichligi bo'lib, u 300 K temperaturada $N_V = 1,0 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ga teng, N_A esa xona temperaturasida namunadagi kovaklar konsentratsiyasi. Xona haroratidagi solishtirma elektr qarshiligi $\rho = 348,07 \Omega \cdot \text{cm}$ bo'lgan p-Si<P,Zn> namunasida $N_A = 5,24 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ $E_F - E_V = 0,31 \text{ eV}$ bo'lib namuna uchun elektronlarning chiqish ishi $4,86 \text{ eV}$ ga teng (2-rasm). MOY strukturalarda vujudga keladigan "o'rnatilgan potensial" metall va yarimo'tkazgichlarning chiqish ishlari ayirmasiga teng bo'ladi. Kremniyning chiqish ishi, ya'ni Fermi sathidan to vakum chizig'igacha bo'lgan energiya oralig'i, unga legirlangan kirishma turi va konsentratsiyasiga bog'liq bo'ladi. n-Si<P> kremniy taglikning chiqish ishi va harakatchanlik tipini unga Zn atomini yuqori haroratda diffuziya qilish orqali boshqarish mumkin ekanligini va bu bilan MOY strukturalarda hosil bo'ladigan. O'rnatilgan potensial qiymatini va uning yo'nalishini boshqarish imkoniyati paydo bo'layotganini da'vo qilish mumkin. 1a-rasmga ko'ra, n-Si<P> kremniy taglikning o'tkazuvchanlik turi n-tip bo'lib, chiqish ishi $4,27 \text{ eV}$ ga teng bo'ladi, ya'ni ushbu taglik asosida chiqish ishi $4,27 \text{ eV}$ dan katta bo'lgan metallardan foydalangan holda MOY strukturasini hosil qilganda, Shottki to'siqli struktura vujudga keladi. Ammo, ushbu taglikka Zn atomlari diffuziya qilish orqali kuchli kompensirlangan kremniy sintez qilingan uning o'tkazuvchanlik turi p-tip va chiqish ishi $4,86 \text{ eV}$ ga teng bo'lgan va ushbu kuchli

kompensirlangan kremniy taglik asosida chiqish ishi 4.86 eV dan kichkina bo'lgan metallar bilan MOY struktura olinganda Shottki to'siqli, biroq dastlabki holatdagiga nisbatan teskari yo'nalgan potentsial maydon hosil qilish mumkin bo'ladi.

Xulosa. Solishtirma qarshiligi $\sim 1 \Omega \cdot \text{cm}$ bo'lgan n-Si<P> kremniy tagligiga vakuumda Zn atomlarini diffuziya qilish orqali solishtirma qarshiligi $\sim 348 \Omega \cdot \text{cm}$ bo'lgan kuchli kompensirlagan kremniy, o'tkazuvchanlik turi n-tipdan p-tipga o'zgargan, va bu bilan uning chiqish ishi ham 4.27 eV dan 4.86 eV ga o'zgaradi. Bunday kuchli kompensirlangan kremniy tagliklar yordamida o'rnatilgan potentsial kattaligi va potentsial maydon yo'nalishi turlicha bo'lgan gibrid MOY strukturalar hosil qilish mumkin bo'ladi.

ADABIYOTLAR

1. N.V. Volkov, A.S. Tarasov, D.A. Smolyakov, S.N. Varnakov, and S.G. Ovchinnikov, "Bias-voltage-controlled ac and dc magnetotransport phenomena in hybrid structures," *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 383, pp. 69–72, Jun. 2015, doi: 10.1016/j.jmmm.2014.11.014.
2. N.V. Volkov, A.S. Tarasov, D.A. Smolyakov, A.O. Gustaitsev, V.V. Balashev, and V.V. Korobtsov, "The bias-controlled giant magnetoimpedance effect caused by the interface states in a metal-insulator-semiconductor structure with the Schottky barrier," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 104, no. 22, p. 222406, Jun. 2014, doi: 10.1063/1.4881715.
3. Z. Liang *et al.*, "A review of doped metal oxide semiconductors in the stability of thin film transistors," *J. Alloys Compd.*, vol. 1010, p. 177434, Jan. 2025, doi:10.1016/j.jallcom.2024.177434.
4. T.J. Theka, H.C. Swart, and D.E. Motaung, "Recent trends, advances, and challenges in MOF-derived metal oxide semiconductor-based sensors for BTEX detection: A review," *Inorg. Chem. Commun.*, vol. 168, p. 112884, Oct. 2024, doi: 10.1016/j.inoche.2024.112884.
5. К.С. Аюпов, М.К. Бахадирханов, Н.Ф. Зикриллаев, Х.М. Илиев "Физические явления в кремнии в крайне неравновесном состоянии". *Lambert Academic Publishing*, Group 17 Meldrum Street. Beau Bassin 71504. 2019
6. C.S. Fuller and F.J. Morin, "Diffusion and Electrical Behavior of Zinc in Silicon," *Phys. Rev.*, vol. 105, no. 2, pp. 379–384, Jan. 1957, doi: 10.1103/PhysRev.105.379.
7. R.O. Carlson, "Double-Acceptor Behavior of Zinc in Silicon," *Phys. Rev.*, vol. 108, no. 6, pp. 1390–1393, Dec. 1957, doi: 10.1103/PhysRev.108.1390.
8. М.К. Бахадирханов, Б.И. Болтакс, Т.Дж. Джафаров, Г.С. Куликов, "Оптическое поглощения в кремнии с примесями Co и Zn." *ФТТ*, vol. T. 11. B. 12., pp. 36–42.
9. J.M. Herman III and C.T. Sah, "Thermal ionization rates and energies of holes at the double acceptor zinc centers in silicon," *Phys. Status Solidi A*, vol. 14, no. 2, pp. 405–415, 1972, doi: 10.1002/pssa.2210140203.
10. В.М. Арутюнян "Физические свойства и функциональные возможности для кремниевых структур компенсированным цинком," *Микроэлектроника*, vol. T. 11. B. 6., pp. 45–54, 1982.
11. "М.К. Бахадирханов, Н.Ф. Зикриллаев, Э.У. Арзикулов, "Влияние упругости паров диффузанта на концентрацию электроактивных атомов и степень компенсации образцов Si{Zn}", *Письма в ЖТФ*, 17:12 (1991), 1–4.
12. Е.В. Кучис, "Гальваномагнитные. эффекты и методы. их исследования," *Радио И Связь*, vol. . – 264 с: pp. 140-147;., Москва: Редакция литературы по электронике, 1990.



UDK: 537.534.8

Sharifa UTAMURADOVA,

*O'zbekiston Milliy universiteti huzuridagi Yarimo'tkazgichlar fizikasi
va mikroelektronika ilmiy-tadqiqot instituti direktori, f.m.f.d, professor*
E-mail: sh-utamuradova@yandex.ru

Abdulaziz MAVLYANOV,

*O'zbekiston Milliy universiteti huzuridagi Yarimo'tkazgichlar fizikasi
va mikroelektronika ilmiy-tadqiqot instituti katta ilmiy xodimi, PhD*

Samar ABDURAIMOV,

*O'zbekiston Milliy universiteti huzuridagi Yarimo'tkazgichlar fizikasi
va mikroelektronika ilmiy-tadqiqot instituti tayanch doktoranti*

Gulhayo ABDURAZZOQOVA,

*O'zbekiston Milliy Universiteti huzuridagi Yarimo'tkazgichlar fizikasi
va mikroelektronika ilmiy-tadqiqot instituti tayanch doktoranti*

Toshkent davlat texnika universiteti professori, f.m.f.d, G'.Mavlonov taqrizi asosida

QUANTUM-CHEMICAL CALCULATION OF Si_2MnS IN THE MATRIX OF SILICON

Annotation

Model of Si_2MnS (hypothetical) structure similar to the cubic structure of $\text{F43m-}\beta\text{-MnS}$ has been proposed and quantum-mechanically calculated. $E_g \approx 0.22$ eV energy gap of the Si_2MnS structure obtained in the course of quantum chemical numerical calculation of position of electrons and the level $E_i \approx 0.226$ eV revealed during the study of the photoconductivity of the $\text{Si}<\text{Mn}, \text{S}>$ sample, were compared. Further thorough theoretical studies, detailed quantum chemical calculations and experiments in the field of engineering a novel class of hybrid compounds with a cubic lattice of diamond type with the participation of elements of groups IV/III-V and IV/II-VI, could help predict new structures.

Key words: Model, quantum-mechanical calculation, nonisovalent compound, singly crystal silicon, manganese, Sulphur, photoconductivity.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ Si_2MnS В БАЗОВОЙ МАТРИЦЕ КРЕМНИЯ

Аннотация

Представлена модель и результаты квантово-химических расчетов структуры (гипотетической) Si_2MnS по аналогии с кубической структурой $\text{F43m-}\beta\text{-MnS}$. Сравнены полученные при квантово-химическом численном расчете положения электронов размер щели $E_g \approx 0,22$ эВ структуры Si_2MnS и уровень $E_i \approx 0,226$ эВ, выявленный при исследовании фотопроводимости образца $\text{Si}<\text{Mn}, \text{S}>$. По мнению авторов углубленные теоретические исследования, детальные квантово-химические расчеты и эксперименты в области создания нового класса гибридных соединений с кубической решеткой типа алмаза с участием элементов групп IV/III-V и IV/II-VI позволят в дальнейшем спрогнозировать новые структуры.

Ключевые слова. Модель, квантово-химический расчет, неизоэлектронное соединение, монокристаллический кремний, марганец, сера, фотопроводимость.

KREMNIY KRISTALL PANJARASIDA Si_2MnS STRUKTURASINING KVANT-KIMYOVIY HISOBI

Annotatsiya

Ushbu maqolada Si_2MnS (faraz sifatida) strukturasining modeli va kvant-kimyoviy hisoblash natijalari $\text{F43m-}\beta\text{-MnS}$ kubik strukturasiga o'xshashlik asosida taqdim etilgan. Kvant-kimyoviy hisoblash natijasida olingan elektronlarning joylashuvi, Si_2MnS strukturasining $E_g \approx 0,22$ eV taqiqlangan soha energiya va fotoo'tkazuvchanlik bo'yicha o'tkazilgan tadqiqotda aniqlangan $E_i \approx 0,226$ eV sathi taqqoslangan. Olmos turidagi kubik panjaraga ega IV/III-V va IV/II-VI guruh elementlari ishtirokidagi yangi gibril birikmalar sinfini yaratish sohasida chuqur nazariy tadqiqotlar, batafsil kvant-kimyoviy hisoblashlar va tajribalar kelgusida yangi strukturalarni bashorat qilish imkonini beradi.

Kalit so'zlar. Model, kvant-kimyoviy hisob, izovalent bo'lmagan birikma, monokristall kremniy, marganes, oltingugurt, fotoo'tkazuvchanlik.

Kirish. So'nggi vaqtlarda kichik miqdordagi nuqsonlardan tashkil topgan komplekslarni maqsadli shakllantirish, asosiy material va kiritilgan kirishma atomlarning asosiy panjaradagi tartibli joylashuvi hamda ular o'rtasidagi qisman ionli va qisman kovalent o'zaro ta'sirlashuvlar tufayli yarimo'tkazgich tuzilmalarining funksional parametrlari yaxshilanishi va ularning xususiyatlarini boshqarish imkonini bermoqda.

Jumladan, istiqbolli yo'nalishlardan biri monokristall kremniyning funksional imkoniyatlarini izovalent bo'lmagan birikmalar yordamida kengaytirish hisoblanadi. Mazkur jarayonda $\text{Si}_2\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{VI}}$ turidagi fazalarga ega kubik panjara kremniy (Si) va sfalerit (ZnS, kubik modifikatsiya) gibrilini ifodalaydi.

Nazariy tadqiqotlar, kvant-kimyoviy hisoblashlar va tajribalar dunyoning yetakchi universitetlari va ilmiy-tadqiqot markazlarida, olmos turidagi kubik panjaraga ega yangi gibrid komplekslar sinfini yaratish sohasida olib borilmoqda. Jumladan, [1, 2]-manbalarda Si-IV/III-V va Si-IV/II-VI birikmalarini noan'anaviy sharoitlarda o'stirish orqali kremniy asosidagi optik sezgir materiallarni olish imkoniyatlari ko'rib chiqilgan. Ushbu ishlarda tadqiqotchilar, Si_2AlP yoki Si_2ZnS kabi «gibrid» fazalar asosiy matritsaning panjara doymiyliklariga yaqin bo'lib, Si atomi atrofidagi mahalliy kimyoviy tartibni boshqariladigan mukammal materiallar bo'lishini taxmin qilmoqdalar. Yuqorida qayd etilgan ishlarda birlamchi tamoyillar asosida hisoblashlar olib borilib, kimyoviy tartibning izovalent bo'lmagan qattiq eritmalarini elektron va optik xususiyatlariga ta'siri muhokama qilingan. Shu munosabat bilan, ushbu tadqiqotda mualliflar $\text{F43m-}\beta\text{-MnS}$ (sink sulfidi) kubik strukturasi ga o'xshash Si_2MnS (1-rasm) faraziy strukturasi uchun model yaratish va kvant-mexanik hisoblashlarni amalga oshirishni maqsad qilib qo'yganlar.

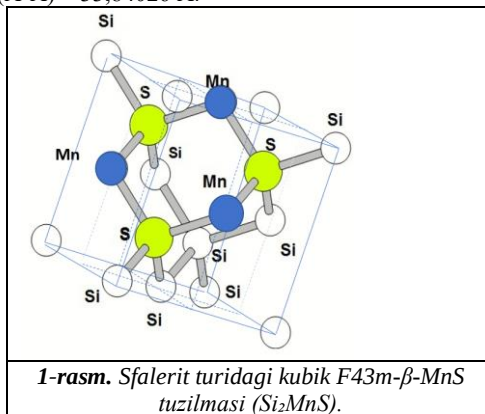
Mualliflarni bu kabi hisoblashlarni amalga oshirish va solishtirma tahlilga ilhomlantirgan omil mazkur yo'nalishda olib borilgan qator qiziqarli ishlar bo'lgan. Jumladan, [3]-manbada SiN/Mn past darajada legirlangan eritmalarini modellashtirish uchun $(N+1)$ -qatlamli tetragonal o'tapanjara ishlatilgan, ular N ta kremniy bir qatlamidan va bitta marganes molekulyar qatlamidan iborat edi. Hisoblashlar uch xil strukturaviy konfiguratsiya uchun bajarilgan bo'lib, marganesning joylashuvi va molekulyar holati o'zgarib borilgan. Bunda marganes atomlari tugunlarni (1-konfiguratsiya), tugunlararo bo'shliqlarni (2-konfiguratsiya) va aralash joylarni (3-konfiguratsiya) egallagan. Qatlam qalinligi $N = 7, 11, 15, \dots$ ya'ni, marganesning molekulyar qatlamlari 7 dan 31 gacha o'zgarib borgan. Elementar panjara birligi vektorlari a, b va c kristallografik $[110]$, $[110]$ va $[001]$ o'qlariga muvofiq yo'naltirilgan, bunda $a = b = a_{\text{Si}}/\sqrt{2}$ va $c = a_{\text{Si}}(N + 1)/4$, bu yerda $a_{\text{Si}} = 5,46 \text{ \AA}$ – olmos turidagi kubik tuzilma uchun kremniyning muvozanatli panjara doymiyisi. [3]-manbada maqbullashtirish uchun Vienna ab initio Simulation Package (VASP) dasturiy modeli qo'llanilgan bo'lib, bunda almashuv-korrelyatsion potentsialga umumlashtirilgan gradient yaqinlashuvi qo'llanilgan. Elektron-ion o'zaro ta'sirlari qo'shilgan tekis to'liqlik psevdopotensiallar orqali elektron to'liqlik funksiyalari esa 500 eV energiya chegarasiga ega tekis to'liqliklar yordamida tasvirlangan. Ushbu ishda mualliflar bunday eritmalarining magnit va struktura xususiyatlari o'rtasidagi bog'liqlikni o'rganish uchun maqbullashtirishdan so'ng mualliflar uchta konfiguratsiyada Mn atomlarining joylashuvida siljishlarni aniqlashdi. Siljishlar esa o'z navbatida materialning strukturaviy xususiyatlarini o'zgartirdi. Magnit xususiyatlarni tadqiq qilishda almashuv o'zaro ta'sirlari ham hisobga olingan. Uchta konfiguratsiya uchun spin-polyarizatsiyalangan elektron holatlarining zichliklari hisoblangan.

Model yaratish va tadqiqot usullari. Yuqorida ta'kidlanganidek, modellashtirish va kvant-mexanik hisoblashlar uchun $\text{F43m-}\beta\text{-MnS}$ (sink sulfidi) kubik tuzilmasini - Si_2MnS faraziy strukturasi (1-rasm) tanlab olindi.

Hisoblashlar quyidagi dasturlar yordamida amalga oshirildi: zichlik funksional usuli (DFT) uchun mo'ljallangan bepul dasturiy ta'minot Abinit, yarimempirik hisoblashlar uchun notijorat GAMESSPC dasturi, shuningdek erkin tarqatiladigan ViewMol3D va Molekel dasturlari. Tekshirilayotgan strukturani grafik shaklda yaratish uchun Hyper Chem Lite 3.0.1 evaluation dasturi ham ishlatildi.

Mavjud kvant-kimyoviy va molekulyar-dinamik usullardan foydalangan holda kub ichiga joylashtirilgan, muntazam tetraedrning uchlari joylashgan to'rtta atomi bilan olmos panjarasining Si tuguni, shuningdek, olmos turidagi panjara strukturasi qurildi. Si uchun quyidagi panjara parametrlari o'rnatildi:

$a = 5,43095 \text{ \AA}$, $d(\text{A-A}) = 2,35167 \text{ \AA}$, $d(\text{A-A}) = 33,84026 \text{ \AA}$.



Natijalar va muhokama. Ma'lumki, izolyatsiya qilingan Mn ioni magnit momenti $3 \mu\text{B}$ ga teng bo'lib, odatda Si panjarasida tetraedr ichida tugunlararo joyni egallaydi va donor sifatida harakat qiladi. Ayni paytda, agar Mn panjaraning tugunlarini egallasa, u 3d holatlarini Si ning 3 (s,p) holatlari bilan kuchli gibridlashtirib, akseptor sifatida namoyon bo'ladi [4–6]. Biroq, past darajada legirlangan Si:Mn eritmalar holati ancha murakkab va aniq bir talqinga ega emas. Ushbu materiallar ularning ferromagnit holati taxminan 400 K atrofida haroratlarda ko'rib chiqilganidan so'ng o'ziga xos qiziqish uyg'otgan [7].

Past va o'rtacha Mn tarkibli (0,5 dan 17,5 a. E. % gacha) past darajada legirlangan Si:Mn qattiq eritmalarining magnit va rentgen-strukturaviy xususiyatlarini yanada sinchkovlik bilan o'rganish, legirlash jarayonini nazorat qilishning imkonsizligi va natijalarni qayta takrorlash qiyinligi sababli ushbu tizimlar keng oraliqda notekis bo'lishi ko'rsatadi. Natijada, Mn ionlari nafaqat panjaraning tugunlarini va tugunlararo joylarni egallashi, balki turli xil molekulyar klasterlar va qattiq fazadagi birikmalarni hosil qiladi.

VI-guruh elementlaridan biri sifatida, almashtirish holatida joylashgan oltingugurt (S), atrofida to'rtta kremniy atomi bilan sp^3 -gibrid bog' hosil qiladi. Shu bilan birga, ortiqcha ikkita elektron kremniyning taqiqlangan sohasiga ikkita sathini kiritadi.

Shunday qilib, quyidagilar:

1. Olmos turidagi kremniy kubik panjarasiga o'xshash tabiatda mavjud $\text{F43m-}\beta\text{-MnS}$ (sink sulfidi) kubik tuzilmasi;
2. Mn va S atomlarining Si kristall panjarasi tugunlarini almashtirish holatlarini tasdiqlovchi tajriba dalillar;
3. Hisoblash resurslari va kvant-mexanik uskunalarining mavjudligi;

4. Legirlash jarayonlarini boshqarish usullarining takomillashuvi (ayniqsa, yaqin o'tmishda δ -legirlash deb nomlanuvchi usul yordamida legirlovchi aralashmaning joylashuvini yuqori aniqlik bilan boshqarish texnikalari ishlab chiqilgan bo'lib, bunda aralashma materialning asosiy matritsasiga panjara doymiyliklariga muvofiq holatda kiritiladi [8])

ushbu kabi strukturalarni nazariy modellashirish, hisoblash, kremniy marganes va oltingugurt bilan tajribada legirlash, tajriba ma'lumotlarni hisoblash natijalari bilan taqqoslash va kelajakda shunga o'xshash strukturalarni bashorat qilish imkonini beradi.

Kvant-kimyoviy hisoblash natijalari va tahlillar. Katta hajmli kremniy panjarasida (QMK) kvant-kimyoviy hisoblashlar paytida, bo'shliqda joylashgan tetraedr tugunlaridagi atomlar va $\text{Si}_2\text{A}^{\text{IV}}\text{B}^{\text{VI}}$ turidagi izovalent birikmalar bo'lgan mahalliy elementar panjaralar «gibrid» kremniy kubik panjarasi (Si) va sphalerit (ZnS , kubik modifikatsiya) birikmasini ifodalaydi. Shuningdek, $\text{Si}_2\text{A}^{\text{IV}}\text{B}^{\text{VI}}$ birinchi koordianatsion sohada alohida mahalliy katakcha va butun shartli cheksiz davriy panjara o'rtasidagi hisoblashlar bir xil deb taxmin qilinadi.

Biroq, monokristall kremniy ichida izovalent bo'lmagan aralashmalarga ega alohida elementar yacheykalarda atomlar orasidagi masofa to'liq hajmli, legirlangan davriy strukturadagi atomlar orasidagi masofadan farq qiladi. Bu o'z navbatida xaqiqiy tajribalarda kuzatiladigan holatga mos keladi. Bundan tashqari, cheksiz kremniy panjarasidagi mahalliy Si_2MnS yacheykalarda, oltingugurtning $3p^2$ elektronlari marganes atomiga o'tishi natijasida yuzaga keladigan zaryad farqi qo'shni atomlar bilan o'zaro ta'sir orqali qoplanadi. Ammo alohida Si_2MnS yacheykalarida bu zaryad farqi qo'shni atomlar bilan koplanmaydi, shuning uchun bu holat kvant-mexanik hisoblashlarda alohida e'tiborga olinishi zarur.

O'tkazilgan hisoblashlar natijasida Si_2MnS yacheykalarlariga ega Si panjarasi zaryad holatlari va elektrostatik potensial qiymatlari negiz Si panjarasidan sezilarli farq qilishini ko'rsatdi. Mn atomlari tugunlarda manfiy zaryad, S atomlari esa musbat zaryad oladi, bu esa ikki atom orasida ion xususiyatlariga ega bo'lgan bog' hosil bo'lishiga olib keladi. Natijalar ushbu birikmalardagi bog'ning qisman ionli va qisman kovalent xususiyatga ega ekanligi haqidagi nazariyani tasdiqlaydi.

Shuningdek, Si_2MnS strukturasi uchun elektron spektr hisoblashlarni o'tkazilib, yutilish cho'qqisi 2,65 eV, 2,39 eV, 2,28 eV, 2,0 eV, 1,8 eV va 1,01 eV energiyalarga to'g'ri kelishi aniqlandi. Valent elektronlarning holati bo'yicha o'tkazilgan hisoblashlar Si_2MnS strukturasiidagi taqiqlangan soha energiyasi $E_g = 0,22$ eV ga teng ekanligini ko'rsatdi. Bu HOMO (0,1431 eV) va LOMO (0,0811 eV) orbitallarining qiymatlari bilan tasdiqlanadi.

Shuningdek $\text{Si} < \text{Mn}, \text{S} >$ namunalarining (boshlang'ich material KDB-1, $\rho = 1 \text{ Om} \cdot \text{cm}$) fotoo'tkazuvchanligining spektr bog'liqligini ham o'rganib chiqdilar. Namunalarning fotoo'tkazuvchanligi qorong'ilikda va odatiy chiroq nuri ta'sir qilganda tashqi kuchlanish 2 V bo'lganda nurlanish energiyasi $h\nu \approx 0,226$ eV da boshlanishi kuzatildi [8].

Natijalar Si_2MnS strukturasi kvant-kimyoviy hisoblash natijasida aniqlangan taqiqlangan soha energiyasining qiymati $E_g = |\text{LOMO} - \text{HOMO}| \approx 0,22$ eV tajriba natijalarida, ya'ni fotoo'tkazuvchanlik tadqiqotida aniqlangan $E_g \approx 0,226$ eV sathi bilan ma'lum darajada mos kelishini ko'rsatadi. Mazkur sath donor sathidan o'tkazuvchanlik sohasiga elektronni o'tishi bilan bog'liq bo'ladi.

Xulosa. Olmos turidagi kubik panjaraga ega, IV/III-V va IV/II-VI guruh elementlari ishtirokidagi yangi gibrid birikmalar sinfini yaratish sohasida chuqur nazariy tadqiqotlar, batafsil kvant-kimyoviy hisoblar va tajribalar kelgusida yangi strukturalarni bashorat qilish imkonini beradi.

Mazkur yo'nalishda bunday birikmalarning xususiyatlarini matematik modellashirish va sonli hisoblash usullari yordamida yanada chuqur o'rganish va bashorat qilish katta ilmiy ahamiyatga ega.

Shu bilan birga, monokristall kremniy asosidagi bunday materiallarning struktura va elektr-fizik xususiyatlarini tajribada tadqiq qilish, Si-IV/III-V va Si-IV/II-VI turidagi birikmalarni faraziy hosil qiluvchi aralashma atomlar bilan legirlangan kremniy parametrlarining imkoniyatlarini kengaytirishga xizmat qiladi. Bundan tashqari, mazkur yondashuv kremniy materiali asosida impuls fazoviy chegarasida mutloq minimum koordinatalarga ega bo'lgan materialni olish ehtimolini oydinlashtirishga yordam beradi.

Shu bilan birga, bunday strukturalarning elektron xususiyatlari kremniy panjarasida aralashma atomlarining tartibli yoki tasodifiy joylashuviga qarab farq qilishini hisobga olish lozim.

ADABIYOTLAR

1. Liying Jiang, Toshihiro Aoki, David J. Smith, Andrew V. G. Chizmeshya, Jose Menendez, and John Kouvetakis. Nanostructure-Property Control in $\text{AlPSi}_3/\text{Si}(100)$ Semiconductors Using Direct Molecular Assembly: Theory Meets Experiment at the Atomic Level // C Chem. Mater. 2014, 26, 4092-4101.
2. Joongoo Kang, Ji-Sang Park, Pauls Stradins, and Su-Huai Wei. Nonisovalent Si-III-V and Si-II-VI alloys: Covalent, ionic, and mixed phases // PHYSICAL REVIEW B 96, 045203 (2017), PP. 045203-1- 045203-5.
3. M. M. Otrokov, A. Ernst, V. V. Tugushev, S. Ostanin, P. Buczek, L. M. Sandratskii, G. Fischer, W. Hergert, I. Mertig, V. M. Kuznetsov, and E. V. Chulkov. *Ab initio* study of the magnetic ordering in Si/Mn digital alloys // PHYSICAL REVIEW B 84, 144431 (2011) p. 144431-1-144431-11.
4. T. Jungwirth, J. Sinova, J. Masek, J. Kucera, and A. H. MacDonald // Rev. Mod. Phys. 78, 809 (2006).
5. T. Dietl, Modern Aspects of Spin Physics, Lecture Notes in Physics, Vol. 712, edited by W. Potz, U. Hohenester, and J. Fabian (Springer, Berlin/Heidelberg, 2007), pp. 1-46.
6. K. Sato *et al.*, Rev. Mod. Phys. 82, 1633 (2010).
7. M. Bolduc, C. Awo-Affouda, A. Stollenwerk, M. B. Huang, F. G. Ramos, G. Agnello, and V. P. LaBella // Phys. Rev. B 71, 033302 (2005).
8. Mavlyanov A.Sh. Aminov N.Sh., Sultanova Yu.A., Khujaniyazova A. Photoconductivity spectrum of Silicon doped by Manganese and Sulfur // Austrian Journal of Technical and Natural Sciences, № 1-2 2019, pp. 52-55.



UDK: 535.6: 535.32

Ориф ФАЙЗУЛЛАЕВ,

Преподаватель Джизакского филиала Национального университета Узбекистана,

E-mail: oriffayzullayev4005@gmail.com

Дилишода ЕРГАШОВА,

Студентка Джизакского филиала Национального университета Узбекистана,

Доктор философии по физико-математическим наукам, на основе рецензии Ш. Норберкова

ELECTRONIC SPECTRA AND PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES OF 7-HYDROXYCOUMARIN DERIVATIVES USING DFT AND TD-DFT METHODS

Annotation

Using DFT and TD-DFT methods with the B3LYP/6-311++G (d,p) hybrid functional, the dye molecule was optimized, and the charge distribution and dipole moments in the ground (μ_g) and excited (μ_e) states were calculated. Additionally, the chemical potential (μ), electronegativity (χ), and chemical hardness (η) were evaluated. The low values of the chemical potential for the cationic form of 7-hydroxycoumarin indicate that the cation is more stable and less reactive compared to other forms. The calculations show that the neutral form of the dye molecule has a high chemical hardness, which indicates its low donor ability in this form.

Key words. 7-Hydroxycoumarin, cation, anion, tautomer, charge, dipole moment, DFT, electrophile, nucleophile.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ 7- ГИДРОКСИКУМАРИНА, ИССЛЕДОВАННЫЕ МЕТОДАМИ DFT И TD-DFT

Аннотация

С помощью методов DFT и TD-DFT с использованием гибридного функционала B3LYP/6-311++G(d,p) была оптимизирована молекула красителя, рассчитано распределение зарядов и дипольные моменты в основном (μ_g) и возбужденном (μ_e) состояниях. Также были оценены химический потенциал (μ), электроотрицательность (χ) и химическая жесткость (η). Низкие значения химического потенциала катионной формы 7-гидроксикумарина указывают на то, что в сравнении с другими формами молекула в катионном состоянии является более стабильной и менее реакционноспособной. Расчёты показывают, что нейтральная форма молекулы красителя обладает высокой химической жёсткостью, что свидетельствует о низкой донорной способности молекулы в данной форме.

Ключевые слова. 7-гидроксикумарин, катион, анион, таутомер, заряд, дипольный момент, DFT, электрофил, нуклеофил.

DFT VA TD-DFT USULLARI YORDAMIDA 7-GIDROKSIKUMARIN HOSILALARINING ELEKTRON SPEKTRLARI VA FIZIK-KIMYOVIY TAVSIFI

Annotatsiya

DFT va TD-DFT usullari yordamida B3LYP/6-311++G (d,p) gibrid funksionalidan foydalangan holda bo'yoq molekulasi optimallashtirildi, zaryadlarning taqsimlanishi va dipol momentlari asosiy (μ_g) va uyg'ongan (μ_e) holatlarda hisoblab chiqildi. Shuningdek, kimyoviy potensial (μ), elektrmanfiylik (χ) va kimyoviy qattqlik (η) baholandi. 7-gidroksikumarin kation shaklining kimyoviy potensialining past qiymatlari ushbu shaklning boshqa turlarga nisbatan barqarorroq va kamroq reaktiv ekanligini ko'rsatadi. Hisoblashlar bo'yoq molekulasining neytral shaklida kimyoviy qattqlik yuqori ekanligini ko'rsatadi, bu esa ushbu shaklda molekulaning donorlik qobiliyatining pastligidan dalolat beradi.

Kalit so'zlar. 7-Gidroksikumarin, kation, anion, toutamer, zariyad, dipol moment, DFT, elektrofil, nukleofil.

Введение. 7-гидроксикумарин и его производные находятся в центре многочисленных теоретических и экспериментальных исследований благодаря их широкой области применения и чувствительности к растворителю. Эти соединения обладают способностью поглощать в ближнем ультрафиолетовом диапазоне и флуоресцировать в синее-зеленой области. Поэтому они активно используются в различных областях в качестве флуорофоров, включая биологические зонды, лазерные красители, солнечные панели и химические сенсоры [1,2]. Кроме того, их электронные и оптические свойства значительно зависят от воздействия растворителя, что может приводить к структурным изменениям, особенно в кислых и основных средах [3,4].

Различные формы молекулы 7-гидроксикумарина (нейтральная, катионная, анионная и таутомерная) могут подвергаться спектральным и фотохимическим изменениям под воздействием окружающей среды. Например, катионная форма с большей вероятностью образуется в кислой среде, тогда как анионная форма преобладает в щелочных условиях. Такие процессы протонирования и депротонирования могут значительно влиять на оптические свойства молекулы.

Методы DFT и TD-DFT являются современными вычислительными подходами, позволяющими точно моделировать электронную структуру и оптические свойства, и их применение в исследованиях продолжает расширяться [5]. Подход TD-DFT демонстрирует хорошее соответствие с экспериментальными данными и обеспечивает надежные

результаты при определении спектральных характеристик. В данном исследовании проведены квантово-химические расчеты, а полученные результаты сопоставлены с экспериментальными данными, имеющимися в литературе.

Этот теоретический метод моделирования позволяет глубже понять спектральные и фотохимические свойства молекулы. Полученные результаты помогут изучить влияние растворителя и состояния протонирования на молекулярную структуру, а также объяснить экспериментальные наблюдения. Более того, результаты исследования могут иметь практическое значение для разработки оптических материалов, биологических сенсоров и флуорофорных систем.

Методика и техника эксперимента. Расчеты выполнены с использованием программы Gaussian09. Для изучения оптимизации молекулярной геометрии в основном (S_0) и возбужденном (S_1) электронных состояниях применялся метод DFT (функционал B3LYP и базисный набор 6-311++G(d,p)). Для анализа оптических свойств проведены расчеты методом TD-DFT. Влияние растворителей моделировалось с использованием метода PCM [6]. На рис.1 представлена химическая структура исследованных соединений 7-гидроксикумарина.

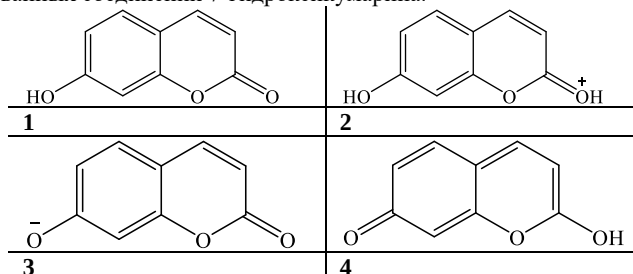


Рисунок 1. Химические структуры молекул 7-гидроксикумарина, использованных в исследовании: нейтральная форма (1), катионная форма (2), анионная форма (3), таутомерная форма (4).

Результаты и обсуждение. Для объяснения природы наблюдаемых явлений сначала проанализируем распределение электронной плотности и порядок связей между различными формами молекулы 7-гидроксикумарина на основе результатов квантово-химических расчетов (Таблица 1).

Результаты расчетов показывают, что в нейтральной форме распределение зарядов на атомах является относительно стабильным, тогда как в ионных формах наблюдаются значительные изменения. В анионной форме введение дополнительных электронов приводит к увеличению отрицательного заряда на некоторых атомах, тогда как в катионной форме потеря электронов вызывает усиление положительного заряда. В частности, изменения плотности заряда наблюдаются на атомах кислорода в карбонильной и гидроксильной группах, что оказывает непосредственное влияние на химические и физические свойства молекулы.

Сравнение длин связей показало, что процесс ионизации оказывает значительное влияние на структурные параметры молекулы. В нейтральной форме длины связей C1–C2 и C2–C3 составляют 1.415 Å и 1.385 Å соответственно, тогда как в катионной форме эти связи остаются практически неизменными. В анионной форме же они удлиняются до 1.462 Å и 1.448 Å (таблица 1). Эти изменения связаны с перераспределением π -электронной системы, при котором в анионной форме усиливается делокализация, что приводит к удлинению связей. В катионной форме длина связи C2–O12, соединяющей карбонильный атом кислорода, сокращается по сравнению с нейтральной формой, что связано со снижением плотности электронов в данной группе и ослаблением π -резонансного эффекта. В таутомерной форме длина этой связи уменьшается еще больше, что отражает перераспределение электронной плотности в результате переноса протона. При этом некоторые связи бензопиранового кольца удлиняются, что свидетельствует о возрастании делокализации электронов.

Анализ валентных углов также показал значительные изменения между ионными и таутомерными формами. В нейтральной форме угол C2–C1–C6 составляет 119.56°, тогда как в анионной форме он увеличивается до 122.22°. Это расширение может быть связано с перераспределением электронной плотности в анионной форме, при котором молекула стремится стабилизировать свою пространственную конфигурацию. В то же время угол C1–C2–C3 в нейтральной форме равен 120.80°, остается практически неизменным в катионной форме, но уменьшается до 115.10° в анионной форме (таблица 1). Это свидетельствует о деформации геометрии молекулы вследствие локализации электронов.

В таутомерной форме валентные углы изменяются еще более заметно, особенно в области карбонильной и гидроксильной групп. Например, угол O7–C8–O11 в нейтральной форме составляет 117.53°, тогда как в таутомерной форме он сокращается до 109.56° (таблица 1). Это указывает на перестройку молекулярной структуры вследствие протонного переноса и повышение реакционной способности гидроксильной группы.

Таблица 1. Заряды, длины связей и валентные углы 7-гидроксикумарина в основном состоянии

Atom	Neutral	Kation	Anion	Tautomer	Atom	Neutral	Kation	Anion	Tautomer
C1	0.211	0.299	0.256	0.367	C1 – C2	1.415	1.418	1.462	1.475
C2	-0.580	-0.594	-0.651	-0.606	C1 – C6	1.402	1.372	1.367	1.352
C3	-0.604	-0.715	-0.479	-0.505	C2 – C3	1.385	1.399	1.448	1.461
C4	-1.853	-1.881	-1.528	-1.580	C2 – O12	1.364	1.335	1.255	1.233
C5	2.307	2.294	1.984	2.059	C3 – C4	1.403	1.376	1.372	1.352
C6	-0.002	-0.106	-0.172	-0.394	C4 – C5	1.461	1.416	1.425	1.444
O7	-0.116	-0.063	-0.156	-0.087	C4 – O7	1.327	1.382	1.382	1.394
C8	0.208	0.288	0.154	0.062	C5 – C6	1.398	1.417	1.422	1.440
C9	-0.053	-0.042	-0.208	-0.047	C5 – C10	1.421	1.409	1.406	1.372
C10	-0.194	-0.021	-0.066	0.033	O7 – C8	1.505	1.322	1.395	1.327
O11	-0.284	-0.130	-0.381	-0.173	C8 – C9	1.409	1.392	1.437	1.365
O12	-0.207	-0.146	-0.444	-0.320	C8 – O11	1.207	1.305	1.220	1.336
					C9 – C10	1.407	1.381	1.374	1.419

Atom	Neutral	Kation	Anion	Tautomer
C2 – C1 – C6	119.56	120.30	122.22	122.40
C1 – C2 – C3	120.80	120.81	115.10	115.95
C1 – C2 – O12	122.18	122.71	121.91	121.58
C3 – C2 – O12	117.02	116.48	122.99	122.47

C2 – C3 – C4	118.78	117.53	121.41	120.04
C3 – C4 – C5	121.78	123.67	122.65	123.91
C3 – C4 – O7	117.17	117.48	118.03	118.12
C5 – C4 – O7	121.05	118.85	119.33	117.96
C4 – C5 – C6	117.99	117.10	116.82	116.41
C4 – C5 – C10	117.55	118.18	117.89	118.77
C6 – C5 – C10	124.45	124.71	125.29	124.82
C1 – C6 – C5	121.07	120.58	121.80	121.28
O7 – C8 – C9	115.92	122.60	116.34	123.29
O7 – C8 – O11	117.53	115.42	116.73	109.56
C9 – C8 – O11	126.54	121.98	126.93	127.14
C8 – C9 – C10	121.55	117.75	120.78	117.75
C5 – C10 – C9	120.94	121.14	122.01	121.04

Дипольные моменты также отражают различия между ионными и таутомерными формами молекулы. В нейтральной форме дипольный момент составляет 6.725 Дебай, что характеризует уровень поляризации молекулы. В катионной форме дипольный момент уменьшается до 2.370 Дебай, что связано с потерей электронов и снижением общей поляризуемости молекулы. В анионной форме дипольный момент увеличивается до 6.982 Дебай, что обусловлено влиянием дополнительных электронов на общее распределение заряда. В таутомерной форме дипольный момент достигает 9.822 Дебай, что объясняется значительными изменениями электронной плотности при переносе протона и увеличением общей поляризуемости молекулы.

Поглощение и люминесценция. Согласно результатам квантово-химических расчетов, анионная форма **3** должна поглощать и люминесцировать на более длинных волнах по сравнению с нейтральной формой **1**. Это обусловлено наличием в хромофоре свободно движущихся зарядов, которые снижают энергию возбуждения [10]. Расчеты показывают, что спектр поглощения нейтральной формы **1** ($\lambda = 300$ нм) по сравнению с анионной формой смещен bathochromно на 73 нм (таблица 2).

Таутомерная форма **4**, поскольку большая часть ее хромофора имеет киноноидную структуру, должна демонстрировать еще большее bathochromное смещение по сравнению с исходной формой **1**. Квантово-химические расчеты показывают, что форма **4** смещена на 90 нм bathochromно по сравнению с анионной формой **3** (рис.2).

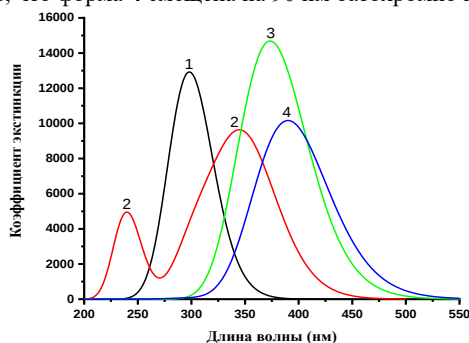


Рисунок 2. Спектры поглощения различных форм 7-гидроксикумарина: нейтральной (1), катионной (2), анионной (3) и таутомерной (4).

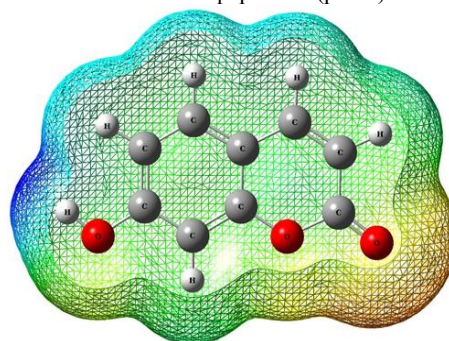


Рисунок 3. Распределение электронной плотности в молекуле 7-гидроксикумарина согласно базисному набору 6-311++G(d,p).

Растворитель-зависимые спектральные изменения. 7-гидроксикумарин является слабой кислотой, и в полярных растворителях он может частично существовать в анионной форме. Однако результаты квантово-химических расчетов показывают, что в растворах DMF и воды не наблюдается полосы поглощения, соответствующей анионной форме **3**. Кроме того, экспериментальные данные показывают, что в водных и DMF растворах 7-гидроксикумарина выполняется закон Ламберта-Бера, что означает отсутствие агрегации молекул в растворе [10]. Спектральные свойства анионной формы. Согласно квантово-химическим расчетам, полоса поглощения катионной формы **2** по сравнению с анионной формой **3** смещена всего на 22 нм. Это правильно отражает тенденции спектрального сдвига, наблюдаемые в последовательности ионизации и таутомеризации $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4$ (рис.2).

Карта молекулярного электростатического потенциала (МЭП) (рис.3) позволяет определить области молекулы с наибольшей локализацией положительного и отрицательного заряда, что помогает выявить потенциальные зоны протонирования. На карте красный цвет указывает на области с высокой электронной плотностью (электрофильные центры), а синий – на области с низкой электронной плотностью (нуклеофильные центры). Как видно из рис.3, максимальный отрицательный заряд сосредоточен на атоме кислорода карбонильной группы, что делает его более основным по сравнению с другими аналогичными атомами в молекуле 7-гидроксикумарина [8].

Графическое представление высшей заполненной молекулярной орбитали (HOMO) и нижней свободной молекулярной орбитали (LUMO) производного 7-гидроксикумарина в газовой фазе показано на рис.4. Видно, что в основном состоянии электронная плотность равномерно распределена по всей молекуле, но при переходе в возбужденное состояние она смещается в сторону карбонильной группы и бензопиранового кольца. Знание значений энергий E_H и E_L позволяет оценить параметр химической жесткости (η), который определяет химическую стабильность молекулы. На основе этих энергий также могут быть рассчитаны химический потенциал (μ) и электроотрицательность (χ) (Таблица 2) с помощью следующих выражений [11,12].

$$\eta = \frac{E_{LOMO} - E_{HOMO}}{2}; \quad \mu = \frac{E_{LOMO} + E_{HOMO}}{2}; \quad \chi = -\frac{E_{LOMO} + E_{HOMO}}{2}$$

Таблица 2. Рассчитанные значения, сила осциллятора E_{HOMO} , E_{LUMO} , разница энергии (E_g), дипольный момента (ρ), электроотрицательность (χ), химический потенциал (μ), химическая твердость (η) и время жизни возбужденного состояния (τ) молекулярной структуры 7-гидроксикумарина в газовой фазе и различных растворителях.

Форма	λ_{max}	f	$E_{HOMO}(eV)$	$E_{LUMO}(eV)$	$E_g(eV)$	$\mu(eV)$	$\eta(eV)$	$\chi(eV)$	$\rho(D)$	$\tau(ns)$
Нейтраль	300	0.31	-6.589	-2.136	4.447	-4.36	2.224	4.36	6.725	0.29
Катион	351	0.21	-10.93	-7.085	3.847	-9.01	1.924	9.01	1.428	0.56
Анион	373	0.36	1.514	1.593	0.439	3.47	0.220	-3.47	5.968	0.41
Таутомер	390	0.25	-5.929	-2.663	3.266	-4.30	1.633	4.30	9.106	0.71

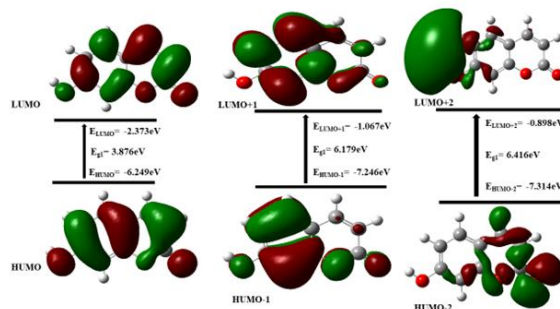


Рисунок 4. Графическое представление высшей занятой (НОМО), низшей свободной (LUMO) молекулярных орбиталей, НОМО–1, LUMO+1, НОМО+2, LUMO+2, энергетического зазора между НОМО и LUMO (E_{g1}), энергетического зазора между НОМО–1 и LUMO+1 (E_{g2}) и энергетического зазора между НОМО+2 и LUMO+2 (E_{g3}) для замещенного 7-гидроксикумарина в газовой фазе на основе метода B3LYB/6-311++G (d, p).

Анализ данных показывает, что более низкие значения химического потенциала (μ) катиона в газовой фазе указывают на меньшую вероятность отделения электронов от его молекулярной структуры. Следовательно, катион **2** является более стабильным по сравнению с другими формами и обладает минимальной реакционной способностью. Кроме того, электроотрицательность (χ) катиона **2** выше, что означает его большую способность притягивать электроны от других соединений [13]. Результаты расчетов также показывают, что значение химической жесткости нейтральной формы 7-гидроксикумарина **1** высокое, что свидетельствует о низкой способности этой молекулы к донорству электронов (Таблица 2).

Заключение. Таким образом, выявленные особенности электронного строения и спектрально-флуоресцентных свойств замещенного 7-гидроксикумарина открывают новые перспективы для целенаправленного синтеза. Полученные данные позволяют прогнозировать и контролировать свойства получаемых красителей, варьируя заместители в молекуле 7-гидроксикумарина. Это позволит создавать красители с заранее заданными абсорбционными и излучательными характеристиками и параметрами фотостабильности в различных средах.

ЛИТЕРАТУРА

- Lakshmikantham, M.V., Brittain H.G. (2004). Coumarins in solution: Spectral properties and solvent effects. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*. 162(2-3), 339-345.
- Д.И. Бугаско, А.В. Карчава, З.А. Юнусова, М.А. Юровская. *Химия гетероциклических соединений*. **55**, No6. 483–489. (2019).
- M.H. Elnagdi, S.O. Abdallah, K.M. Ghoneim, E.M. Ebied, K.N. Kassab. *J. Chemistry Reserch*. No 2. 44-45. (1997). <https://doi.org/10.1039/A603731C>
- M. Souilah, M. Hachi, A. Fitri, A.T. Benjelloun, M. Benzakour, M. Mcharfi, H. Zgou. *Chemical Data Collections*. **45**, No2. 101017 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.cdc.2023.101017>
- Gavrilovic, I., Gruden-Pavlovic, M., & Zlatar, M. (2017). TD-DFT study of solvent effects on absorption and fluorescence spectra of coumarin derivatives. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19(8), 5872-5882.
- José P. Cerón-Carrasco, M. Fanuel, A. Charaf-Eddin, D. Jacquemin. Interplay between solvent models and predicted optical spectra: A TD-DFT study of 7-OH-coumarin. *Chemical Physics Letters*. 556 (2013) 122-126 <http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2012.11.075>
- A. A. Ishchenko, *Structure and Spectral Luminescence Properties of Polymethine Dyes* [in Russian], Naukova Dumka, Kiev (1994).
- A. A. Ishchenko, V. A. Svidro, N. A. Derevyanko, Yu. L. Slominskii, and A. I. Tolmachev, *Opt. i Spektr.*, 66, 1302–1306 (1989).
- A. V. Kulnich, N. A. Derevyanko, and A. A. Ishchenko, *J. Photochem. Photobiol. A*, 188, 207–217 (2007).
- Файзуллаев О. Т. СОЛЬВАТОХРОМИЯ И СОЛЬВАТОФЛЮОРОХРОМИЯ В РАСТВОРАХ 7-ГИДРОКСИКУМАРИНА // *Polish Journal of Science*. – 2021. – №. 38-1. – С. 31-33.
- M. Y. Tu, Y. Yang, Y. Li, C. He. *Pharmacological Research*. **169**, 105615 (2021). <http://dx.doi.org/10.1016/j.phrs.2021.105615>
- Ch. R. Sahoo, J. Sahoo, M. Mahapatra, D. Lenka, P.K. Sahu, B. Dehury, R.N. Padhy, S.K. Paidesetty. *Arab. J. Chem*. 14, No2. 1-58 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2020.102922>
- S. A. Gawad, M. Sakr. *J. Mol. Struc*. 1248 131413 (2022). <http://dx.doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.131413>



UDK: 530.12:531.51

Vokhid KHAMIDOV,
Associate Professor at Tashkent University of Information Technologies, PhD
E-mail: vkhamidov@tuit.uz
Sojida MANNOBOVA,
Student at National University of Uzbekistan
Gulzoda RAKHIMOVA,
Tashkent State Technical University

Based on the review of professor F. Atamurotov, Inha University in Tashkent

COLLISION OF CHARGED PARTICLES IN THE VICINITY OF SCHWARZSCHILD-LIKE BLACK HOLE

Annotation

This work is devoted to the study of the nature of the collision of charged test particles moving around a Schwarzschild-like black hole surrounded by a uniform magnetic field. The equations of motion are derived in an immeasurable form. To study the effect of a black hole on the acceleration of particle in the case of colliding particles around ISCO with different charges was obtained.

Key words: black holes, stable orbit, horizon, ISCO, collision, center of mass-energy.

СТОЛКНОВЕНИЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В БЛИЗОСТИ ЧЕРНОЙ ДЫРЫ ШВАРЦШИЛЬДА-ЛАЙК

Аннотация

Работа посвящена изучению характера столкновения заряженных пробных частиц, движущихся вокруг черной дыры типа Шварцшильда, окруженной однородным магнитным полем. Уравнения движения выведены в неизмеримой форме. Для изучения влияния черной дыры на энергию центра масс системы сталкивающихся частиц рассмотрен случай столкновения: столкновение частиц, вращающихся вокруг ISCO с разными зарядами.

Ключевые слова: чёрные дыры, стабильная орбита, горизонт, ISCO, столкновение, центр масс-энергии.

SCHWARZSCHILD-LIKE QORA TUYNUK YAQINIDA ZARYADLANGAN ZARRALARNING TO'QNASHISHI

Annotatsiya

Ushbu tadqiqot bir jinsli magnit maydon bilan o'ralgan Schwarzschild-like qora tuynuk atrofiga harakatlanuvchi zaryadlangan sinov zarralarining to'qnashuvi tabiatini o'rganishga bag'ishlangan. Harakat tenglamalari o'lchovsiz shaklda olinadi. Qora tuynukning to'qnashuvchi zarralar tizimining massa-energiya markaziga ta'sirini o'rganish uchun to'qnashuv holati ko'rib chiqiladi: ISCO atrofiga turli zaryadli aylanuvchi zarraclarning to'qnashuvi.

Kalit so'zlar: qora tuynuklar, stabil orbita, gorizont, ISCO, to'qnashuv, massa-energiyalar markazi.

Introduction. There is a belief that a black hole is the source of the most energetic objects in the universe, such as active galactic nuclei, ultra-luminous X-ray binaries, gamma-ray bursts, etc. The leading dynamo of the energetics of these objects is the gravity surrounding the black holes. Some of the energy extraction mechanisms from black holes are based on the matter accretion onto the central object. Another way is to extract the thermodynamical energy of the black hole (which is also defined through the gravitational energy of the compact object). In Refs. [1-5] were observed cases of thermodynamics of the spacetime in different gravities.

Black hole also can be as a particle accelerator. Banados, Silk, and West have studied the center of mass energy of the particles falling into rotating black holes and observed that the latter may reach ultra-high values [6]. Moreover, it has been shown that for the fine-tuned values of the angular momentum of the particles, the center of mass energy of colliding particles at the horizon of an extremely rotating black hole may diverge [6]. The center of mass energy and energetic processes of the particles around black holes in different gravity models have been extensively studied in Refs. [7-10].

Additionally, we will examine the interactions between these particles and the surrounding field and the collisions that occur. A novel solution for the metric tensor describing a regular black hole of Bardeen type has been proposed in [11]. The outline of the paper is as follows: we present the dynamics of a particle in a dimensionless form in order to study the characteristic features of its motion. After that we discuss the case of particle collisions in the vicinity of a black hole. Finally, we summarize the main conclusions and results obtained during the research.

Dimensionless form of dynamical equations. We are interested in the case of collision of charged particles in the electromagnetic field in the vicinity of Schwarzschild-like black hole. In spherical symmetric Boyer-Linquist coordinate system (t, r, θ, ϕ) described by the metric [12, 13]:

$$ds^2 = -f(r)dt^2 + \frac{1}{f(r)}dr^2 + r^2d\theta^2 + r^2\sin^2\theta d\phi^2 \quad (1)$$

where:

$$f(r) = 1 - \frac{2Me^{-a/r}}{r} \quad (2)$$

Corresponding Eq. (1), metric has of two Killing vectors:

$$\xi_{(t)} = \xi_{(t)}^\mu = \partial_t, \xi_{(\phi)} = \xi_{(\phi)}^\mu = \partial_\phi, \quad (4)$$

where $\xi_{(t)}^\mu = (1, 0, 0, 0)$ and $\xi_{(\phi)}^\mu = (0, 0, 0, 1)$. In this section, we will derive the basic equations of motion for a charged particle around a Schwarzschild-like black hole in dimensionless form. For clarity and to facilitate further investigation, we will assume a value of M equal to 1. Since our metric resembles that of a Schwarzschild-like solution, as described in Eq. (1), and due to the presence of two Killing vectors in Eq. (4), we can express the constants of motion using the 4-momentum in the following form [14]:

$$E = -\xi_{(t)}^\mu p_\mu = m \frac{dt}{d\tau} f \quad (5)$$

$$L = \xi_{(\phi)}^\mu p_\mu = \left[m \frac{d\phi}{d\tau} r^2 + \frac{1}{2} qB(r^2 - 2a) \right] \sin^2 \theta \quad (6)$$

where p_μ is the generalization of 4-momentum. For more convenient use, we use the following dimensionless versions of $\mathcal{E}, \mathcal{L}, \tau, b$:

$$\rho = \frac{r}{r_h e^a}, \sigma = \frac{\tau}{r_h e^a}, l = \frac{L}{m r_h e^a},$$

$$\mathcal{E} = \frac{E}{m}, b = \frac{qB r_h e^a}{2m}, f = 1 - \frac{e^{-a}}{\rho}.$$

Where r_h is the radius of the horizon of our metric from Eq. (3). We use the expression for 4-momentum of the particle $u^\mu u_\mu = -1$, and obtain the resulting dimensionless equations:

$$\left(\frac{d\rho}{d\sigma} \right)^2 = \mathcal{E}^2 - U \quad (7)$$

$$\frac{d\sigma}{d\sigma} = \frac{\mathcal{E}\rho}{\rho - e^a} \quad (8)$$

$$\rho \frac{d\phi}{d\sigma} = \beta, \beta = \frac{1}{\rho} \left(l + \frac{2ab}{(r_h e^a)^2} \right) - b\rho \quad (9)$$

where U is the effective potential given by the equation:

$$U = \left(1 - \frac{e^{-a}}{\rho} \right) (1 + \beta^2) \quad (10)$$

The equations $U_{,\rho} = 0$ and $U_{,\rho\rho} = 0$ define the innermost stable circular orbits (ISCO). By solving this system of equations, we obtain an explicit expression for l and :

$$b_\pm^2 = \frac{9 \mp N - e^a \rho (4e^{2a} \rho^2 - 21e^a \rho + 30)}{8\rho^2 (e^a \rho - 1)^2 (4e^{2a} \rho^2 - 10e^a \rho + 3)} \quad (11)$$

$$l_\pm = b_\pm e^{-2a} \frac{e^{2a} \rho^2 r_h^2 N \pm 2a(e^a \rho - 3)^2}{(e^a \rho - 3)^2 r_h^2} \quad (12)$$

where

$$N = \sqrt{(1 - 3e^a \rho)(e^a \rho - 3)^3} \quad (13)$$

In the case of Schwarzschild spacetime, the equation exists within the interval $\rho \in (1/3, 3]$.

COLLISION OF CHARGED PARTICLES

We study the energy of particles that collide around a black hole in the Schwarzschild-like metric using Frolov's method [15]. It is well known that particles moving along ISCO have a minimum magnitude of energy and angular momentum, and their velocities become close to light speed. Because of this, we get the nonzero components of the momentum of the particles found in the form:

$$p^t = m\gamma e_{(t)}^t \quad (14)$$

$$p^\phi = m\gamma v e_{(\phi)}^\phi \quad (15)$$

$$e_{(t)}^t = \sqrt{\eta_{tt} g^{tt}} = \frac{1}{\sqrt{f}} \quad (16)$$

$$e_{(\phi)}^\phi = \sqrt{\eta_{\phi\phi} g^{\phi\phi}} = \frac{1}{r}, \quad (17)$$

where Eq. (16) and Eq. (17) are orthonormal tetrad components in equatorial motion around fixed orbit. Here v (which can be both positive and negative) is a velocity of the particle with respect to a rest frame, and γ is the Lorentz gamma factor:

$$\frac{d\phi}{d\tau} = \frac{p^\phi}{m} = \frac{v\gamma}{r} \quad (18)$$

From Eq. (5) one may easily get the following

$$\frac{d\phi}{d\tau} = \frac{\beta}{r}, \gamma = \sqrt{1 + \beta^2}. \quad (19)$$

Here we can use expressions (11), (12) and rewrite β as:

$$\gamma_\pm = \sqrt{\frac{-9 \pm N + e^a \rho (4e^{2a} \rho^2 - 21e^a \rho + 30)}{(e^a \rho - 3)(4e^{2a} \rho^2 - 10e^a \rho + 3)}} \quad (20)$$

The dependence of the gamma factor on ρ for fixed values of a is shown in Figs. 2 and 3.

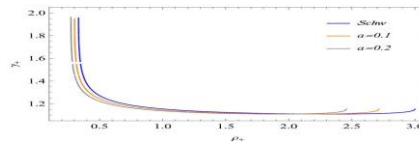


FIG. 2: The dependence of the factor γ_+ from ρ_+ for fixed values of a .

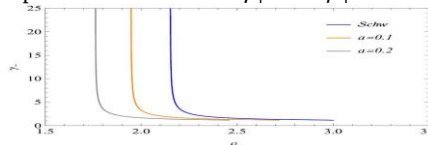


FIG. 3: The dependence of the γ_- at the position of the ISCO ρ_- .

As we can observe in Fig. 2, the gamma factor takes values slightly greater than 1, but in Fig. 3 γ_- assumes quite high values. For γ_+ , the energy cannot be high, as γ_+ is not significantly different from 1. However, for γ_- , the energy increases significantly. It can be seen from Figs. 3 and 2 that the black hole parameter a helps to reduce the radius, while having little effect on the values of γ . In Table I shown the numerical results for the maximum and minimum values of the quantities of $\rho_{\pm}$ and $\gamma_{\pm}$, for various values of the parameter a .

We learn a state of a collision of two particles with the same mass m , with charges $+q, -q$, and moving along the same circular orbit in opposite directions. After the collision the four-momentum will be equal to:

$$P^0 = 2m\gamma \frac{1}{\sqrt{f}}. \quad (21)$$

$a = 0$	$a = 0.1$	$a = 0.2$
$\rho_{+max} = 3$ $\rho_{+min} = 0.333$ $\rho_{-max} = 3$ $\rho_{-min} = 2.151$	$\rho_{+max} = 2.714$ $\rho_{+min} = 0.302$ $\rho_{-max} = 2.715$ $\rho_{-min} = 1.947$	$\rho_{+max} = 2.456$ $\rho_{+min} = 0.273$ $\rho_{-max} = 2.456$ $\rho_{-min} = 1.761$
$\gamma_{+max} = 1.959$ $\gamma_{+min} = 1.1541$ $\gamma_{-max} = 200$ $\gamma_{-min} = 1.155$	$\gamma_{+max} = 1.951$ $\gamma_{+min} = 1.154$ $\gamma_{-max} = 586$ $\gamma_{-min} = 1.155$	$\gamma_{+max} = 1.963$ $\gamma_{+min} = 1.154$ $\gamma_{-max} = 503$ $\gamma_{-min} = 1.155$

TABLE I: Maximum and minimum values of $\rho_{\pm}$ and $\gamma_{\pm}$ at fixed values of a .

The value of the center of mass-energy after the collision:

$$\mathcal{M} = 2m\gamma \quad (22)$$

From analysis given in Tab.I, it can be seen that in some cases it is possible to observe high energies in a collision corresponding to large gamma values. In this case, we gave a similar result to previous work [15]. We do not consider high gamma values, as a particle in an ISCO orbit would need to possess such energy even at a great distance from the black hole in order to maintain a stable orbit.

Conclusion. Now, the energy within a center of mass system can reach significant values even with relatively low initial energies for the colliding particles. Under certain conditions, scattering may result in a significant increase in the energy of one particle, significantly exceeding its initial value. This confirms the effectiveness of acceleration mechanisms, although their implementation depends on interaction parameters, such as the energy and direction of particle motion. We can conclude that the collision energy is low when two particles collide along the same trajectory near the innermost stable circular orbit (ISCO) in opposite directions. However, the collision energy can be high if a particle falling from infinity collides with a charged particle orbiting around the ISCO. A black hole can serve as an effective particle accelerator, contributing to high collision energies, but the success of this process depends on the interaction parameters, such as the energy and direction of motion of the colliding particles. Our analysis is somewhat simplified, as we used a basic model of particle motion and collision without considering plasma and other relevant effects. In the future, we intend to investigate the impact of this parameter on other physical phenomena. It is crucial to acknowledge that the results presented in this article are primarily based on the parameter involved in the black hole solution, which has a minimal effect.

REFERENCES

1. G. Rakhimova, F. Atamurotov, F. Javed, A. Abdujabbarov, and G. Mustafa, Nucl. Phys. B 996, 116363 (2023).
2. G. Mustafa, A. Ditta, F. Javed, F. Atamurotov, I. Hussain, and B. Ahmedov, Chin. J. Phys. 90, 494 (2024).
3. Y. Ladghami, B. Asfour, A. Bouali, A. Errahmani, and T. Ouali, Phys. Dark Univ. 44, 101470 (2024).
4. S.-P. Wu and S.-W. Wei, Phys. Rev. D 110, 024054 (2024).
5. A. Ditta, F. Javed, G. Mustafa, S. K. Maurya, D. Sofuoğlu, and F. Atamurotov, Chin. J. Phys. 88, 287 (2024).
6. M. Bañados, J. Silk, and S. M. West, Phys. Rev. Lett. 103, 111102 (2009).
7. E. Hackmann, H. Nandan, and P. Sheoran, Phys. Lett. B 810, 135850 (2020).
8. O. B. Zaslavskii, Phys. Rev. D 100, 024050 (2019).
9. Z. Stuchlík, M. Blaschke, and J. Schee, Phys. Rev. D 96, 104050 (2017).
10. B. Turimov, S. Shaymatov, and S. Hayitov, Eur. Phys. J. Plus 138, 1022 (2023).
11. T. Berry, A. Simpson, and M. Visser, Universe 7, 2 (2020).
12. A. Simpson and M. Visser, Universe 6, 8 (2019).
13. A. Simpson and M. Visser, Phys. Rev. D 105, 064065 (2022).
14. R. M. Corless, G. H. Gonnet, D. E. G. Hare, D. J. Jeffrey, and D. E. Knuth, Adv. Comput. Math. 5, 329 (1996).
15. V. Frolov, Phys. Rev. D 85, 024020 (2012).



УДК: 539.196

Дилфуза ХАСАНОВА,

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий, Ташкент, Академия наук Республики Узбекистан

E-mail: dilmahusanova75@gmail.com

Сиражиддин МИРЗАЕВ,

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий, Ташкент, Академия наук Республики Узбекистан

Умид ХАЛИЛОВ,

Университет Антверпена, Антверпен, Бельгия

На основе отзыва Г. Эшанкулова

НАЧАЛЬНЫЕ ЭТАПЫ ПРЕНУКЛЕАЦИИ ПЕРИЛЕНА НА РАЗЛИЧНЫХ ПОДЛОЖКАХ

Аннотация

Понимание кластеризации перилена на поверхностях как стадии пренуклеации имеет важное значение для органической электроники. В работе исследуется влияние различных поверхностей на начальную организацию перилена. Метод молекулярной динамики (MD) с использованием пакета LAMMPS и потенциала ReaxFF применялся для изучения адсорбции и кластеризации перилена на Si(100){2×1}, Ni(111) и Ni(331). Результаты демонстрируют, что адсорбция перилена существенно различается в зависимости от поверхности: выравнивание вдоль рядов (Si(100)), планарная конфигурация (Ni(111)) и различные ориентации (Ni(331)). Эти режимы адсорбции, определяемые структурой поверхности, влияют на пренуклеацию. Исследование подчеркивает ключевую роль структуры поверхности в определении пренуклеации при росте нанокристаллов перилена, предоставляя фундаментальную основу для проектирования органических наноструктур.

Ключевые слова: перилен, пренуклеация, зародышеобразования, кластеризация, кремний, никель, поверхность, адсорбция, молекулярная динамика.

ТУРЛИ ЮЗАЛАРДА ПЕРИЛЕН ПРЕНУКЛЕАЦИЯСИНИНГ ИЛК БОСҚИЧЛАРИ

Annotatsiya

Sirtlarda nukleatsiyaoldi bosqichi sifatida perilen klasterlanishini tushunish organik elektronika uchun muhim ahamiyatga ega. Ushbu ishda turli xil sirtlarning perilenning dastlabki tartiblanishiga qanday ta'sir ko'rsatishi o'rganiladi. Perilenning Si(100){2×1}, Ni(111) va Ni(331) sirtlarida adsorbsiyasi va klasterlanishini tadqiq qilish uchun LAMMPS dasturiy paketi va ReaxFF potentsiali asosida molekulyar dinamika (MD) usuli qo'llanildi. Natijalar shuni ko'rsatdiki, perilenning adsorbsiyasi sirt turiga qarab sezilarli darajada farq qiladi: Si(100) sirtida qatorlar bo'ylab tekis joylashish, Ni(111) sirtida planar (yassi) konfiguratsiya va Ni(331) sirtida turli xil orientatsiyalar kuzatildi. Sirt tuzilishiga bog'liq bo'lgan adsorbsiya rejimlari perilenning nukleatsiyaoldi bosqichiga ta'sir ko'rsatadi. Tadqiqot sirt tuzilishining perilen nanokristallari o'sishidagi nukleatsiyaoldi jarayonini aniqlashdagi hal qiluvchi rolini alohida ta'kidlab, organik nanostrukturalarni samarali dizayn qilish uchun fundamental asos yaratadi.

Kalit so'zlar: perilen, nukleatsiyaoldi, nukleatsiya, klasterlanish, kremniy, nikel, sirt, adsorbsiya, molekulyar dinamika.

INITIAL STAGES OF PERYLENE PRENUCLEATION ON VARIOUS SUBSTRATES

Annotation

Understanding the clustering of perylene on surfaces as a pre-nucleation stage is crucial for organic electronics. This work investigates the influence of different surfaces on the initial organization of perylene. Molecular dynamics (MD) simulations, using the LAMMPS package and the ReaxFF potential, were employed to study the adsorption and clustering of perylene on Si(100){2×1}, Ni(111), and Ni(331) surfaces. The results demonstrate that perylene adsorption varies significantly depending on the surface: alignment along rows (Si(100){2×1}), a planar configuration (Ni(111)), and diverse orientations (Ni(331)). These adsorption regimes, dictated by the surface structure, influence pre-nucleation. The study highlights the crucial role of surface structure in determining pre-nucleation during perylene nanocrystal growth, laying a fundamental basis for designing organic nanostructures.

Key words: perylene, pre-nucleation, nucleation, clustering, silicon, nickel, surface, adsorption, molecular dynamics.

Введение. Интеграция органических материалов в электронные устройства открывает перспективы для создания гибких, устойчивых и экономически эффективных технологий нового поколения. Органические светоизлучающие диоды (OLED), гибкие фотоэлектрические элементы и органические полевые транзисторы (OFET) демонстрируют потенциал этих материалов [1, 2]. Для эффективной работы органических электронных устройств важно понимать взаимосвязь между молекулярной структурой и функциональными свойствами, в частности, переносом заряда и оптическими характеристиками, особенно на начальных этапах формирования тонких пленок, а именно, в процессе кластеризации, который представляет собой стадию пренуклеации при формировании кристаллов [3]. В этом контексте, перилен, полициклический ароматический углеводород с развитой π -сопряженной системой, служит модельной системой для

изучения молекулярной организации и электронного поведения, включая процессы самоорганизации и формирования зародышей, которые начинаются с кластеризации молекул. Высокая подвижность носителей заряда и эффективная люминесценция делают его перспективным кандидатом для оптоэлектронных приложений.

В тонкопленочных устройствах ориентация молекул перилена, межмолекулярные взаимодействия и взаимодействие с подложкой критически влияют на характеристики устройств, особенно на стадии пренуклеации (кластеризации), когда формируются начальные зародыши кристаллической структуры. Поэтому исследование механизмов формирования наноструктур, включая кинетику кластеризации и адсорбцию на поверхности, имеет фундаментальное значение для развития органической электроники. Однако, несмотря на значительный прогресс в изучении роста тонких пленок перилена на металлических подложках [4], адсорбция на окисленных [5] и полупроводниковых поверхностях [6] исследована недостаточно, особенно в контексте ранних стадий кластеризации, которые определяют последующий рост кристаллов. Необходимость систематического изучения поведения перилена на пассивированных и полупроводниковых поверхностях обусловлена уникальными физико-химическими свойствами этого материала, а также важностью понимания механизмов пренуклеации, то есть процесса кластеризации.

Традиционно, кремниевые диэлектрики используются в органической электронике [2]. Тем не менее, растущий интерес к органическим изоляторам [7] и металлическим оксидам, таким как Al_2O_3 , ZrO_2 и La_2O_3 [8], расширяет горизонты в области проектирования материалов. Никель (Ni), обладающий каталитической активностью и высокой теплопроводностью, представляет собой перспективную платформу для изучения взаимодействия перилена с поверхностью, особенно в контексте начальных стадий кластеризации, являющихся пренуклеацией. Морфология поверхностей Ni(111) и Ni(331) оказывает существенное влияние на адсорбцию и кластеризацию молекул перилена [3]. Кремний (Si) также предлагает настраиваемый интерфейс для изучения этих процессов [9], однако термодинамические и кинетические факторы, контролирующие нуклеацию перилена на этих поверхностях, особенно в стадии пренуклеации (кластеризации), остаются неясными.

В настоящей работе методом молекулярной динамики (MD) исследуется кластеризация (пренуклеация) молекул перилена на поверхностях Si(100){2×1}, Ni(111) и Ni(331) при комнатной температуре для выявления фундаментальных механизмов начальных стадий формирования нанокристаллов перилена.

Методика и детали моделирования. Для исследования процессов кластеризации молекул перилена на поверхностях Si(100){2×1}, Ni(111) и Ni(331) использовался метод реактивной молекулярной динамики (MD). Межатомные взаимодействия моделировались с помощью потенциала ReaxFF, параметризованного Zoи для системы Ni-C-H [10] и Newsome для системы Si-C-H [11]. Модельная система состояла из молекулы перилена ($\text{C}_{20}\text{H}_{12}$) и монокристаллических поверхностей Si(100){2×1}, Ni(111) и Ni(331) (Рис. 1).

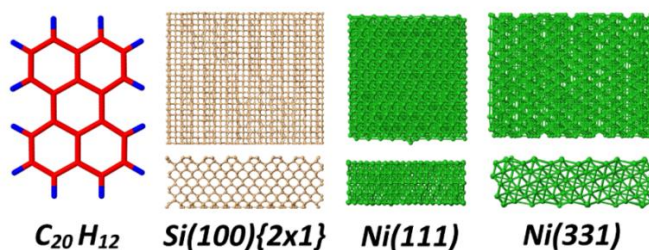


Рис. 1. Молекула перилена ($\text{C}_{20}\text{H}_{12}$) и поверхности Si(100){2×1}, Ni(111), Ni(331).

Перилен ($\text{C}_{20}\text{H}_{12}$, молекулярная масса 252 а.е.м.) был выбран в качестве модельной органической молекулы ввиду его хорошо изученной структуры и значительной подвижности носителей заряда при комнатной температуре (300 К). Геометрические модели поверхностей были созданы с использованием программного обеспечения VESTA [12]. Размеры поверхностей составили: Si(100){2×1} – $54\times 46 \text{ \AA}^2$, Ni(111) – $25\times 26 \text{ \AA}^2$, Ni(331) – $33\times 25 \text{ \AA}^2$. Периодические граничные условия были применены в плоскости xy для аппроксимации бесконечной поверхности.

Протокол моделирования включал: (i) минимизацию энергии системы с использованием последовательного применения алгоритмов steepest-descent и conjugated gradients; (ii) контролируемый нагрев до 300 К в NpT-ансамбле с использованием баростата Нозе-Гувера (Nose-Hoover) [13] и последующую термостабилизацию в NVT-ансамбле; (iii) осаждение молекул перилена на поверхности при 300 К в NVT-ансамбле. Термостатирование осуществлялось с использованием термостата Нозе-Гувера [13] с временным шагом контроля температуры 100 фс. Интегрирование уравнений движения выполнялось с временным шагом 0,25 фс, общая продолжительность моделирования составила 2,0 нс. Для обеспечения статистической достоверности результатов каждое состояние было смоделировано пять раз, с последующим усреднением полученных данных.

Результаты и их обсуждение.

На Рис. 2 представлены результаты моделирования процессов адсорбции и начальной кластеризации молекул перилена на поверхностях Si(100){2×1}, Ni(111) и Ni(331).

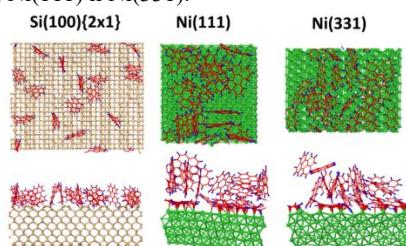


Рис. 2. Адсорбция молекулы перилена на различные поверхности.

Анализ данных, представленных на Рис. 2, выявил значительные различия в адсорбционных характеристиках, обусловленные как спецификой межмолекулярных взаимодействий, так и структурными и морфологическими особенностями исследуемых подложек. Локальная атомная организация поверхности играет ключевую роль в определении механизмов адсорбции и последующей самоорганизации молекул перилена. На поверхности Si(100){2×1} молекулы перилена ориентируются параллельно рядам кремниевых димеров. Формирование организованных структур обусловлено межмолекулярными π - π взаимодействиями. Эти результаты согласуются с наблюдениями Рады и соавторов [14] методом сканирующей туннельной микроскопии также зафиксировали образование цепочечных структур молекул перилена на Si(100){2×1}. Ориентация молекул объясняется взаимодействием π -электронной системы перилена с поверхностными димерными связями. Адсорбционная конфигурация, характеризующаяся минимальной свободной энергией Гиббса, термодинамически благоприятна для упорядоченного расположения молекул и инициирования нуклеации. Для расчета энергии взаимодействия молекулы с поверхностью используется следующая формула [13]:

$$E = E_{\text{пов+мол}} - (E_{\text{мол}} + E_{\text{пов}}) \quad (1)$$

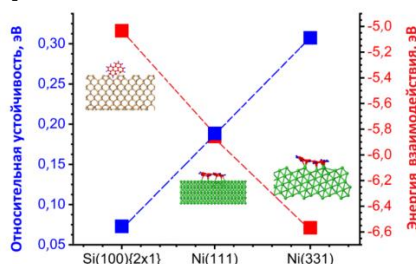
здесь $E_{\text{пов+мол}}$ - полная энергия системы “поверхность + молекула”, $E_{\text{мол}}$ - энергия изолированной молекулы перилена, $E_{\text{пов}}$ - энергия изолированной поверхности. На поверхности Si(100){2×1} энергия взаимодействия составляет -5,033 эВ, что указывает на умеренно сильное взаимодействие молекул перилена с подложкой (см. Рис. 3). Стабильность (относительная устойчивость) агрегации молекул оценивается по молярной свободной энергии Гиббса (ΔG_m), которая рассчитывается как [13]:

$$\Delta G_m = E_{\text{ког}} - \sum \chi_i \mu_i \quad (2)$$

где $E_{\text{ког}}$ - энергия когезии системы “поверхность + молекула”, χ_i — относительная концентрация атома типа i (C, H, Ni или Si), μ_i - химический потенциал соответствующего атома. Молярная свободная энергия Гиббса на Si(100){2×1} составляет 0,073 эВ, что подтверждает термодинамическую стабильность конфигурации и её определяющую роль в формировании упорядоченных органических слоёв. Направленные взаимодействия с рядами кремниевых димеров и межмолекулярные π - π взаимодействия способствуют формированию линейных структур, влияя на кинетику роста и морфологию тонких пленок.

На поверхности Ni(111) наблюдается планарная адсорбция молекул перилена, обусловленная оптимизацией π -d орбитального перекрытия. Энергия адсорбции составляет -5,857 эВ, что указывает на более сильное взаимодействие по сравнению с Si(100){2×1}. Однако молярная свободная энергия Гиббса (0,189 эВ) выше, чем на Si(100){2×1} (0,073 эВ), что свидетельствует о меньшей термодинамической стабильности кластеров на Ni(111). Данное явление может быть объяснено энтропийным вкладом в свободную энергию Гиббса, связанным с более сложной электронной структурой Ni(111). Сильные π -d взаимодействия обеспечивают электронную сопряженность, важную для переноса заряда в органических электронных устройствах и согласуются с исследованиями Еремченко и соавторов [4], подтверждающими роль синергетического взаимодействия между молекулой, подложкой и межмолекулярными силами в формировании упорядоченных структур.

Ступенчатая морфология поверхности Ni(331) приводит к адсорбции молекул перилена под различными углами, адаптируясь к краям ступеней и дефектам. Энергия адсорбции достигает максимального значения (-6,567 эВ), что указывает на наиболее сильное взаимодействие среди исследуемых поверхностей. Однако значение молярной свободной энергии Гиббса (0,307 эВ) является самым высоким, что свидетельствует о наименьшей термодинамической стабильности формирующихся кластеров. Отсутствие корреляции между энергией адсорбции и термодинамической стабильностью подчеркивает важность морфологии подложки. Ступенчатая структура Ni(331) создает множество потенциальных сайтов адсорбции, что приводит к полиморфизму молекулярной ориентации. Аналогичные эффекты наблюдались на Ag(110) [14] и в исследованиях роста графена [15].

**Рис. 3.** Зависимость энергии взаимодействия и относительной устойчивости молекул перилена от поверхности.

Полученные данные подчеркивают необходимость учета морфологии и атомной организации поверхности при исследовании процессов адсорбции и самоорганизации молекул перилена. Ключевым выводом, полученным в результате проведенного анализа, является установление обратной корреляции между энергией взаимодействия молекул перилена с поверхностями и относительной термодинамической стабильностью формирующихся адсорбированных слоев. Несмотря на то, что энергия адсорбции на Ni(331) достигает максимального значения (-6,567 эВ) и возрастает в последовательности Si(100){2×1} < Ni(111) < Ni(331), наибольшая молярная свободная энергия Гиббса (0,307 эВ), являющаяся индикатором термодинамической стабильности среди исследуемых поверхностей, убывает в той же последовательности (0,073 эВ для Si(100){2×1}, 0,189 эВ для Ni(111) и 0,307 эВ для Ni(331)) (см. Рис. 3). Данный эффект обусловлен энтропийным вкладом в свободную энергию, поскольку множественные энергетически различающиеся адсорбционные сайты на поверхности Ni(331) приводят к увеличению статистической энтропии системы и, следовательно, снижению её термодинамической стабильности. В свою очередь, сильные π -d взаимодействия на поверхности Ni(111) способствуют большей термодинамической стабильности планарной конфигурации адсорбированных молекул, что обуславливает значимость данной поверхности для применений в органической электронике [5, 6]. При этом, поверхность Si(100){2×1}

демонстрирует наиболее высокую термодинамическую стабильность среди исследуемых подложек, характеризующуюся низким значением молярной свободной энергии Гиббса (0,073 эВ), упорядоченным расположением адсорбированных молекул перилена и умеренной энергией взаимодействия с подложкой. Данные характеристики делают поверхность Si(100){2×1} предпочтительной для формирования устойчивых и высокоорганизованных молекулярных структур. Наблюдаемый полиморфизм молекулярной ориентации на поверхности Ni(331) представляет собой важный аспект, требующий дальнейшего детального изучения с целью оптимизации управления свойствами тонких пленок, применяемых в оптоэлектронике и сенсорике.

Закключение. Методами реактивной молекулярной динамики (MD) были исследованы процессы адсорбции и кластеризации молекул перилена на поверхностях Si(100){2×1}, Ni(111) и Ni(331). Установлено, что характер взаимодействия перилена с подложкой определяется морфологией поверхности: на Si(100){2×1} формируются ориентированные структуры, на Ni(111) - планарная укладка, а на Ni(331) - вариативные конфигурации из-за ступенчатой топографии. Показано, что с увеличением энергии взаимодействия молекул с поверхностью снижается их термодинамическая стабильность, определяемая по молярной энергии Гиббса. Такая обратная корреляция между энергией адсорбции и стабильностью кластеров подчёркивает роль не только силы межфазного взаимодействия, но и энтропийных факторов. Полученные результаты расширяют понимание процессов пренуклеации и могут быть использованы при проектировании устойчивых органических наноструктур.

ЛИТЕРАТУРА

1. Katz, H.E.; Lovinger, A.J.; Johnson, J.; Kloc, C.; Siegrist, T.; Li, W.; Lin, Y.-Y.; Dodabalapur, A. A Soluble and Air-Stable Organic Semiconductor with High Hole Mobility. *Nature* 404 (2000) 478.
2. Horowitz, G. Organic field-effect transistors. *J. Mater. Res.* 19 (2004) 1946.
3. Bai, Y.; Kirvassilis, D.; Xu, L.; Mavrikakis, M. Atomic and molecular adsorption on Ni(111). *Surf. Sci.* 679 (2019) 240.
4. Eremtchenko, M.; Schaefer, J. A.; Tautz, F. S. Molecular orientation in self-assembled monolayers. *Nature* 425 (2003) 602-606.
5. Söhnchen, S.; Hänel, K.; Birkner, A.; Witte, G.; Wöll, C. Growth of perylene on Ag(111): Influence of substrate temperature. *Chem. Mater.* 17 (2005) 5297.
6. Unwin, P.J.; Jones, T.S. Structure and growth of perylene on Ag(111). *Surf. Sci.* 532 (2003) 1011.
7. Halik, M.; Klauk, H.; Zschieschang, U.; Schmid, G.; Dehm, C.; Schütz, M.; Maisch, S.; Effenberger, F.; Brunnbauer, M.; Stellacci, F. Fast self-assembly of highly ordered, device-quality organic monolayers. *Nature* 431 (2004) 963.
8. Dimitrakopoulos, C.D.; Purushothaman, S.; Kyminis, J.; Callegari, A.; Shaw, J.M. Low-voltage organic transistors enabling flexible polymer-on-foil electronics. *Science* 283 (1999) 822.
9. Fujimoto, H.; Uda, T. Theoretical Study on Adsorption Structures and Electronic States of Organic Molecules on Si (100) Surfaces. *J. Phys. Chem. C* 115 (2011) 6125.
10. Zou, C.; Van Duin, A.C.T.; Huang, L. Development of a ReaxFF reactive force field for nickel and nickel oxide. *J. Phys. Chem. A* 117 (2013) 3296.
11. Newsome, D.A.; Sengupta, D.; Foroutan, H.; Russo, M. F.; Van Duin, A.C.T. Oxidation of silicon carbide by O₂ and H₂O: a ReaxFF reactive Molecular Dynamics study, Part I. *J. Phys. Chem. C* 116 (2012) 16111.
12. Momma K. & Izumi, F. VESTA: a three-dimensional visualization system for electronic and structural analysis. *J Appl Cryst* 41 (2008) 653.
13. Husanova, D.; Ochilov, J.; Khalilov, U. Formation Onset of Flat-Perylene Prenucleation Clusters in Vacuum. *Chemical Physics* 579 (2024) 112191.
14. Rada, T.; Chen, Q.; Richardson, N. Adsorption of Perylene on Ag(111). *Phys. Status Solidi B* 241 (2004) 2353.
15. Lu, Y.; Yang, X. Molecular simulation of graphene growth by chemical vapor deposition on nickel using polycyclic aromatic hydrocarbons. *Carbon* 81 (2015) 312.



UDK: 57.022.023.577.11.12

O'tkir XOLIQOV,

Termiz muhandislik texnologiyalari instituti assisenti, fizika-matematika fanlari nomzodi

E-mail: v.arustamov@iplt.uz

Sherali XOJIYEV,

Toshkent davlat tibbiyot univesiteti dotsenti, fizika-matematika fanlari doktori

Isroil KOSIMOV,

Bioorganik kimyo instituti yetakchi muhandisi, PhD

Ilyos KHUDAYQULOV,

Ion plazmasi va lazer texnologiyalari instituti katta ilmiy xodimi, PhD

Boburjon KAXRAMONOV,

Ion plazmasi va lazer texnologiyalari instituti katta ilmiy xodimi, PhD

F.-m.f., PhD., k.i.x M. Adilov taqrizi asosida

Si/ZnO SIRTIDA MAGNETRONLI CHANGLATISH USULIDA QUYOSH ELEMENTI SIFATIDA YUPQA MIS OKSIDI QATLAMINI O'STIRISH VA TAVSIFLASH

Annotatsiya

Ushbu maqolada magnetron changlatish usuli orqali Si/ZnO taglik sirtida CuO va Cu₂O asosidagi yupqa qatlamli geterostrukturalar sintez qilindi. Tadqiqotda taglik sirtiga harorat va ionli tozalashning ta'siri o'rganildi. Uch xil holatda qizdirilmagan, 600 °C haroratda qizdirilgan va miltillama razryad ionlari bilan tozalangan CuO va Cu₂O qatlamlari o'stirildi. Hosil bo'lgan qatlamlarning kristallografik tuzilishi, fazaviy holati, sirt morfologiyasi, element tarkibi va Raman spektroskopik xossalari tegishli analitik usullar yordamida tahlil qilindi. Natijalar shuni ko'rsatdiki, yuqori haroratda qizdirish va ionli tozalash orqali bir jinsli, zich va kristallik darajasi yuqori bo'lgan qatlamlar hosil bo'ladi. Olingan CuO/Cu₂O geterostrukturalar quyosh elementlari yaratishda istiqbolli material sifatida tavsiya etiladi.

Kalit so'zlar: magnetron changlatish, geterostruktura, kristallik-amorflik, kristallitlar o'lchami, quyosh elementi, ruh oksidi.

ВЫРАЩИВАНИЕ И ХАРАКТЕРИСТИКА ТОНКОГО СЛОЯ ОКСИДА МЕДИ В КАЧЕСТВЕ СОЛНЕЧНОГО ЭЛЕМЕНТА МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО НАПЫЛЕНИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ Si/ZnO

Аннотация

В данной работе тонкопленочные гетероструктуры на основе CuO и Cu₂O были синтезированы на поверхности подложки Si/ZnO методом магнетронного распыления. В исследовании изучалось влияние температуры и ионной очистки на поверхность подложки. Слои CuO и Cu₂O выращивались в трех различных условиях: без нагрева, с нагревом до 600°C и с очисткой ионами импульсного разряда. Кристаллографическую структуру, фазовое состояние, морфологию поверхности, элементный состав и спектроскопические свойства комбинационного рассеяния света полученных слоев анализировали с использованием соответствующих аналитических методов. Результаты показали, что высокотемпературный нагрев и ионная очистка приводят к образованию однородных, плотных и высококристаллических слоев. Полученные гетероструктуры CuO/Cu₂O рекомендуются в качестве перспективных материалов для создания солнечных элементов.

Ключевые слова: магнетронное распыление, гетероструктура, кристалличность-аморфизм, размер кристаллитов, солнечный элемент, оксид спирта.

GROWTH AND CHARACTERIZATION OF A THIN COPPER OXIDE LAYER AS A SOLAR CELL USING THE MAGNETRON SPRAYING METHOD ON A Si/ZnO SURFACE

Annotaion

In this paper, CuO and Cu₂O-based thin-film heterostructures were synthesized on a Si/ZnO substrate by magnetron sputtering. The effect of temperature and ion cleaning on the substrate surface was studied in the study. CuO and Cu₂O layers were grown in three different conditions: unheated, heated at 600°C, and cleaned with flash discharge ions. The crystallographic structure, phase state, surface morphology, elemental composition, and Raman spectroscopic properties of the resulting layers were analyzed using appropriate analytical methods. The results showed that high-temperature heating and ion cleaning produced homogeneous, dense, and highly crystalline layers. The resulting CuO/Cu₂O heterostructures are recommended as promising materials for creating solar cells.

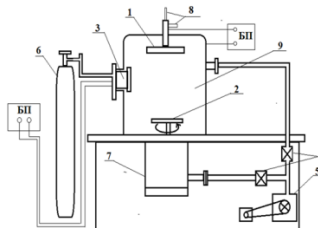
Key words: magnetron sputtering, heterostructure, crystallinity-amorphism, crystallite size, solar cell, spirit oxide.

Kirish. Hozirgi kunda energiyani olish, uni saqlash va samarali yetkazib berish dunyo miqyosida eng dolzarb muammolardan biri hisoblanadi. Bu boradagi ilmiy izlanishlar energiya hosil qiluvchi, saqlovchi va yetkazib beruvchi manbalarni arzon va samarali materiallar asosida ishlab chiqishga qaratilgan.

So'nggi bir necha o'n yilliklarda mis (Cu) yarimo'tkazgichlar texnologiyasida kontakt metall sifatida keng qo'llanib kelinmoqda. U avval qo'llanilgan alyuminiyning o'rnini bosuvchi material sifatida, shu bilan birga, yuqori haroratga bardoshli yarimo'tkazgichli qurilmalarning asosiy elementi sifatida ham muhim ahamiyat kasb etadi. Bundan tashqari, mis atomlari kremniy va germaniy kabi materiallarga nisbatan yuqori diffuziyanish qobiliyatiga ega [1]. Yarimo'tkazgichli mis oksidi (Cu_2O) quyosh batareyalari uchun istiqbolli materiallardan biri hisoblanadi. Cu_2O yuqori optik yutilish qobiliyati, yuqori barqarorlik, zaharli emasligi, ishlab chiqarishda Ni, Ag va Au kabi materiallarga nisbatan arzonligi, tabiatda keng tarqalganligi, hamda yuqori optik, elektr, magnit va katalitik xossalari tufayli muhim quyosh elementlari qatoriga kiradi [2–5]. Avvalroq magnetron changlatish usulida tayyorlangan CuO va Cu_2O yupqa plyonkalari bo'yicha tadqiqotlar amalga oshirilgan bo'lsa-da [6–10], biroq Si tayanchini 600°C haroratda qizdirib, miltillama razryad ionlari bilan tozalash orqali plyonka o'stirish bo'yicha tadqiqotlar ilk bor amalga oshirildi. Mis oksidi yupqa plyonkalarini olish uchun bir necha texnologiyalar — zol-gel, impulsli lazerli cho'kma, piroliz, kimyoviy bug'lanish va yuzada bir xillikka erishishda magnetronli changlatish usullari qo'llaniladi [11–15].

Ushbu tadqiqot ishida magnetron changlatish usuli orqali ZnO/Si tagligi 600°C haroratda qizdirib, miltillama razryad ionlari bilan tozalash orqali CuO/ZnO/Si va $\text{Cu}_2\text{O/ZnO/Si}$ geterostrukturalari hosil qilindi. Olingan geterostrukturalarning xossalari qizdirish va gamma nurlanish ta'sirida rentgen fazaviy tahlil, skanerlovchi elektron mikroskopiya va boshqa bir necha usullar orqali baholandi.

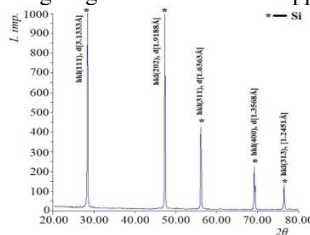
Tadqiqot metodologiyasi. Magnetron changlatish usulida o'stirilgan Cu_2O va ZnO geterostrukturalarining elektron xususiyatlariga qizdirishning ta'siri o'rganildi. Getra-birikmada ZnO p- tipli va Cu_2O n-tipli yarimo'tkazgich sifatida ishlatilgan. Yuzaning bir xilligiga hamda silliqligiga erishish uchun taglik Si ni 600°C haroratda qizdirish hamda miltillama razryad ionlari ta'sirida tozalashning optimal rejimi ishlab chiqildi. Namunalar o'zgarmas tok oqimida ishlaydigan magnetronli changlatish usulida katod elementi- Cu, Ar va O_2 (inert gaz) aralashmasi muhitida o'stirilgan 1-rasm.



1-rasm. Magnetron changlatish qurilmasining sxematik tuzilishi. 1- magnetron, 2- nishon, 3- ionizator, 4- elektromagnit klapan, 5- for nasos, 6- ballon, 7- diffuzion nasos, 8- sovitish tizimi, 9- vakuum kamerasi.

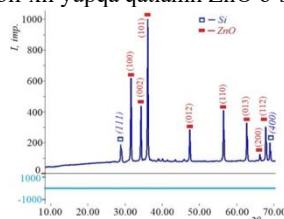
Tadqiqot ishimizda uch xil sharoitda katod elementi- Cu, Ar va O_2 (inert gaz) aralashmasi muhitida Si/ZnO taglikka CuO va Cu_2O yupqa qatlam magnetron changlatish yo'li bilan o'stirildi. Birinchi holda Si/ZnO taglikka hech qanday ta'sir qilmasdan to'g'ridan-to'g'ri, ikkinchi holda faqatgina taglik 600°C qizdirildi va uchinchi holatda esa Si/ZnO taglikni 600°C haroratda qizdirib miltillama razryad ionlari ta'sirida tozalab CuO va Cu_2O qatlamlari o'stirildi. Bu uch xil sharoitda o'stirilgan yupqa plyonkalarining rentgen struktura (rigaku) usuli yordamida kristallografik tuzilishi, rentgen faza tahlili yordamida esa kristall- amorflik darajalari, kristallitlar o'lchamlari, skanerlovchi elektron mikroskopda yuz emissiyasi, qatlam hosil bo'lganligi, Raman spektroskopiya usulida esa materialning tuzilishi va xususiyatlaridagi o'zgarishlari, elektrofizik va optik xususiyatlari aniqlandi.

Tahlillar va natijalar. Tadqiqot ishimizda bir qatlamli epitaksial strukturali KDB 0.5- 1bk 2(III) standart kremniy taglikdan foydalanilgan. Ushbu taglikning rentgen faza tahlili (2-rasm)da keltirilgan bo'lib, bunda difraksiya burchaklari $2\theta \approx 28.5^\circ, 48.2^\circ, 57.3^\circ, 69.8^\circ, 76.7^\circ$ larda tekisliklar aro masofasi-dhkl $\approx 3.13 \text{ \AA}, 1.91 \text{ \AA}, 1.63 \text{ \AA}, 1.35 \text{ \AA}, 1.24 \text{ \AA}$ ga teng ekanligi hamda Miller indeksleri-(hkl) 111, 202, 311, 400, 313 bo'yicha Si ga tegishli xarakterli cho'qqilar namoyon bo'lganligi kuzatildi.



2-rasm. Si taglik namunaning rentgen faza tahlili.

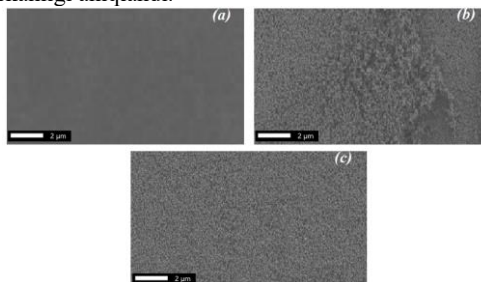
Bu natijalarlardan xulosa qilishimiz mumkinki Si taglik tarkibida qo'shimcha elementlar fazalari yo'qligi taglik namunasi sof (toza) ekanligidan dalolat beradi. Dastlab ushbu Si taglik 300°C haroratda qizdirilib, sirtiga magnetron changlatish usuli yordamida bir xil sharoitda 3ta bir xil yupqa qatlamli ZnO o'stirildi va rentgen faza tahlili qilindi (3-rasm).



3-rasm. Si taglik sirtiga magnetron changlatish usuli yordamida bir xil sharoitda o'stirilgan yupqa qatlamli ZnO plyonkaning rentgen faza tahlili.

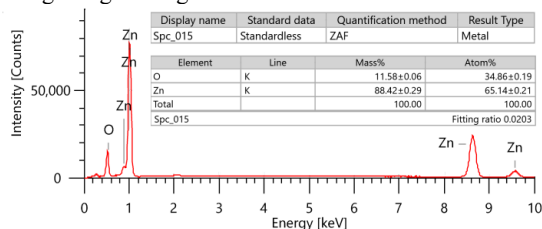
Rentgen faza tahlilidan 3-rasmda Si/ZnO namunada Si fazasining difraksiyasi burchaklari $2\theta \approx 28.5^\circ, 48.2^\circ$ bo'yicha tekisliklar aro masofasi -dhkl $\approx 3.13 \text{ \AA}, 1.36 \text{ \AA}$ ga, Miller indeksleri hkl $\approx (111), (400)$ ga teng ekanligi, ZnO fazasiga tegishli

difraksiyasi burchaklari $2\theta \approx 31.8^\circ, 34.4^\circ, 36.3^\circ, 47.5^\circ, 56.6^\circ, 62.8^\circ, 66.4^\circ, 68^\circ, 69.1^\circ, 77^\circ$ bo'yicha tekisliklar aro masofasi -dhkl $\approx 2.81 \text{ \AA}, 2.60 \text{ \AA}, 2.47 \text{ \AA}, 1.91 \text{ \AA}, 1.24 \text{ \AA}, 1.48 \text{ \AA}, 1.41 \text{ \AA}, 1.38 \text{ \AA}, 1.24 \text{ \AA}$ va Miller indeksleri mos ravishda hkl $\approx (100), (002), (101), (012), (110), (013), (200), (112), (202)$ ekanligi aniqlandi.



4-rasm. (a) Si taglik (b) 300 °C haroratda qizdirilgan (c) 600 °C haroratda qizdirilgan Si taglik sirtida o'stirilgan Si/ZnO ning mikroskopik tasviri.

4(abc) rasmda uch xil sharoitda qizdirilmagan, 300 °C va 600 °C haroratda qizdirilib ZnO qatlam o'stirilgan namunalarning SEM tasviri keltirilgan. Bunda Si taglikka ZnO yupqa qatlami 4-a rasm qizdirilmagan Si namunaga tegishli bo'lib yuza silliq va tekis tartiblangan, 4-b rasm 300 °C haroratda qizdirilib o'stirilgan ZnO ga tegishli bo'lib, SEM tasviridan yuzada ZnO nanozarrachalari betartib, hamda notekis joylashganligini ko'rishimiz mumkin. 4-c rasmda esa 600 °C haroratda qizdirilib o'stirilgan ZnO namunada yuza tartiblangan holda yaxshi adgeziyalarga, hamda zich sharsimon shaklda tuzilmalar namoyon bo'lgan. Bunda sirt bir xil o'lchamli taqsimotga ega bo'lgan sof tarkibdagi nanozarrachalar bilan to'liq qoplanganligini ko'rsatadi. Buning yana bir tasdig'i sifatida 5-rasmda EDS tahlilidan ZnO uchun sirtida ~O-35% Zn-65% atomlari joylashganligini hamda, massalari bo'yicha O- 11.6%, Zn-88.4% ga teng ekanligini ko'rishimiz mumkin.



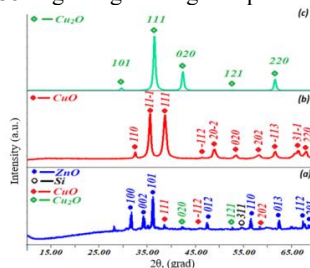
5-rasm. Si taglik sirtiga o'stirilgan ZnO yupqa plyonkaning EDS ma'lumoti.

Buni Si/ZnO strukturaning 6-a rasmda rentgen faza miqdori tahlilidan Zn-74.6%, O-18.2%, Si-7.2% ni tashkil etishi va 1-jadvaldagidek zarrachalar o'rtacha o'lchami Debye Scherrer formulasi yordamida hisoblanganida ~28-35 nm ga teng ekanligi aniqlangan. Demak taglikni dastlab 600 °C haroratda qizdirib magnetron changlatish usulida ZnO nano qatlam o'stirish maqsadga muvofiq hisoblanar ekan. Chunki bu rejimda taglik sirti tartiblangan, yaxshi adgeziyalangan, hamda zich sharsimon shaklda tuzilmalar paydo bo'lib sof tarkibli ZnO yupqa qatlam bilan to'liq qoplanar ekan.

Tadqiqot imizga qo'yilgan asosiy maqsad yuqorida tayyorlab olingan namuna Si/ZnO sirtida quyosh elementi sifatida yupqa Mis oksid qatlam o'stirish va ular asosida tadqiqot ishlarini amalga oshirishdan iborat. Ushbu qo'yilgan maqsadga erishish uchun quyidagi ishlar amalga oshirildi.

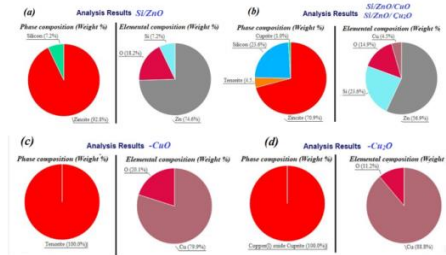
Si/ZnO namunaga uch xil sharoitda 6-rasmda (a)-qizdirilmagan, (b) 500 °C haroratda qizdirilgan va (c) 800 °C haroratda qizdirilib CuO va Cu₂O yupqa qatlamli plyonkalari o'stirildi. Rentgen faza tahlili yordamida CuO va Cu₂O namunalarning difraksiya burchaklari bo'yicha tekisliklar aro masofasi, miller indeksleri, kristall zarrachalari o'rtacha o'lchami, fazaviy miqdor va sifat tahlili, kristallik amorflik darajalari aniqlangan.

Si/ZnO plyonka sirtida qizdirmasdan CuO va Cu₂O yupqa qatlam o'stirilganda taglikka 6a-rasm sezilarli darajada kuchsiz bog'langan CuO va Cu₂O qatlam o'sganligi, yuzada ZnO cho'qqilari ko'plab kuzatiladi, 6b- rasmda Si/ZnO taglik 800 °C haroratda qizdirib o'stirilganda yuzada CuO namunaga tegishli difraksiya burchaklari $2\theta \approx 32.5^\circ, 35.5^\circ, 38.7^\circ, 48.8^\circ, 53.4^\circ, 58.2^\circ, 61.6^\circ$ larda, tekisliklar aro masofasi-dhkl $\approx 2.75 \text{ \AA}, 2.52 \text{ \AA}, 2.32 \text{ \AA}, 1.86 \text{ \AA}, 1.71 \text{ \AA}, 1.58 \text{ \AA}, 1.50 \text{ \AA}$ ga teng ekanligi kuzatiladi. Cu₂O namunada esa 6c rasmda rentgen difraksiya burchaklari $2\theta \approx 29.6^\circ, 36.2^\circ, 42.4^\circ, 52.6^\circ, 61.5^\circ, 69.8^\circ$, tekisliklar aro masofasi mos ravishda - dhkl $\approx 3.01 \text{ \AA}, 2.46 \text{ \AA}, 2.13 \text{ \AA}, 1.74 \text{ \AA}, 1.50 \text{ \AA}, 1.35 \text{ \AA}$ ga teng ekanligi aniqlandi.



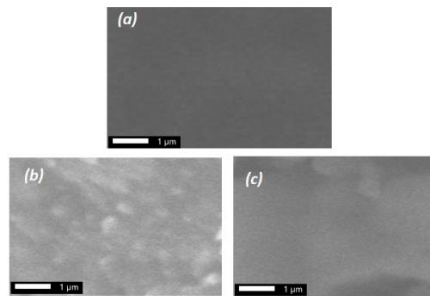
6-rasm. Si/ZnO sirtida (a)-qizdirmasdan (b) - 500 °C haroratda qizdirilgan (c) 800 °C haroratda qizdirilgan va miltillama razryad ionlari bilan tozalab o'stirilgan CuO va Cu₂O plyonkalarining rentgen faza tahlili keltirilgan.

Shu bilan bir qatorda CuO va Cu₂O ning amorf-kristallik fazalari, fazaviy miqdor va sifat tahlili 7-rasmda keltirilgan. Rentgen faza tahlilidan 7- rasmda (a) taglik Si /ZnO, (b) Si/ZnO taglik hrch qanday ta'sir bermasdan qizdirmasdan o'stirilgan CuO va Cu₂O plyonkaning, Si/ZnO taglik 800 °C haroratda qizdirib o'stirilgan (c) CuO va (d) Cu₂O yupqa plyonkalarining fazaviy miqdor va fazaviy sifat tahlili keltirilgan.



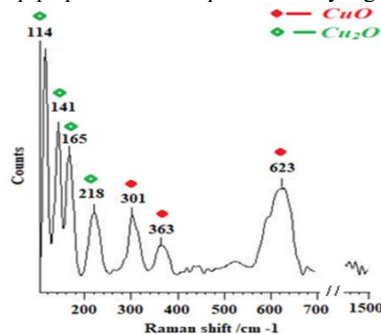
7-rasm-(a) Si/ZnO (b) Si/ZnO/CuO va Si/ZnO/Cu₂O (c) CuO (d) Cu₂O ning fazaviy miqdor tahlili.

Bundan ko‘rinib turibdiki taglikni qizdirmasdan CuO va Cu₂O o‘stirilganda (b) CuO va Cu₂O fazaviy miqdoridan Cu-4.5%, Si-23.6%, Zn-56.9% va O-esa 14.9% ni fazaviy sifat tahlilidan esa, CuO-1%, Cu₂O-4.55, ZnO-70.9% va Si-23.6% tashkil qilar ekan. Taglik 800 °C haroratda qizdirilib CuO va Cu₂O ostirilganida (c) CuO fazaviy miqdor tahlilidan Cu-79.9 va O-20.1% fazaviy sifat tahlilidan CuO- 100 % ni (d) Cu₂O ning fazaviy miqdor tahlilidan Cu-88.8%, O-11.2% ni hamda fazaviy sifat tahlilidan Cu₂O-100% ni tashkil qilishi aniqlangan. Bundan tashqari biz Si/ZnO sirtiga CuO va Cu₂O yupqa qatlam plyonkalarni o‘stirib, sirt morfologiyasini o‘rganildi.



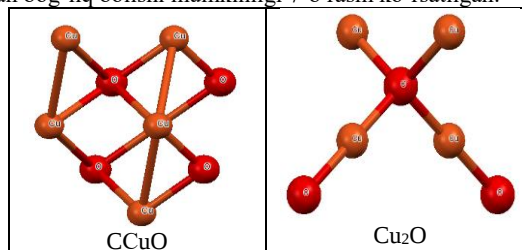
8-rasm. (a) taglik qizdirilmagan (b) taglik 500 °C haroratda qizdirilgan CuO o‘stirilgan (c) 800 °C haroratda qizdirilgan taglik miltillama razryad ionlari ta’sirida tozalanib Cu₂O ostirilgan.

Biz Si/ZnO sirtiga CuO yupqa plyonkasini o‘stirganimizda hosil bo‘lgan kristallitlar o‘lchamligi 14 nm ni tashkil qildi. Bu ularning nano qatlam ko‘rinishida o‘stirilganligidan dalolat beradi biz namunani 500 °C va 600 °C haroratlarda qizdirib sirtga g‘adir budurliklar yo‘qolib asta sekin silliqanish yuzaga kelganligini, hamda Natijada 600 °C haroratgacha qizdirilgan namunada bir jinsli tartiblangan nanozararlardan iborat bo‘lgan yupqa qatlamni hosil qilish imkoniyatiga erishdik.



9-rasm. magnetron changlatish usulida Si/ZnO sirtiga o‘stirilgan mis oksidining raman spektri.

Raman spektr usulida olingan 9- rasmida spektrni tahlil qilganda 301, 363 va 623 sm⁻¹ chastotali tebranishlar bilan bog‘liq maksimalarga ega bo‘lgan uchta CuO ga tegishli, bundan tashqari, qizdirish ta’sirida mikrostrukturadagi yoki fazaviy o‘tishlardagi o‘zgarishlar bilan bog‘liq 114, 141, 165 va 218 sm⁻¹ chastotali tebranishlarga mos Cu₂O ni xarakterlovchi cho‘qqilar namoyon bo‘lganligini alohida ta’kidlash kerak. Ushbu chiziqlarning maksimal pozitsiyalari CuO uchun mos keladigan qiymatlarga mos keladi. Bu esa tadqiqot elementining kimyoviy tarkibi CuO ga mos ekanligidan dalolat beradi. Mis oksidini 800 °C haroratda qizdirilganda paydo bo‘lgan chiziqlar CuO va Cu₂O ning kristall tuzilishidagi o‘zgarishlar kristallik bilan bir qatorda amorf-kristallik tuzilmaning mavjudligi bilan bog‘liq bolishi mumkinligi 7-b rasm ko‘rsatilgan.



10-rasm. Si/ZnO sirtiga o‘stirilgan CuO va Cu₂O mis oksidi rentgen struktura tahlili.

O'stirilgan yupqa plyonkalar qatlami CuO va Cu₂O ning ma'lum bir qismi alohida olib rentgen struktura Rigaku Oksford difraksiyasi (XtaLAB Synergy-i) qurilmasi yordamida tekshirganimizda kristallografik tuzilishi, panjara parametrlari quyidagicha qiymatlarga ega bo'ldi: CuO uchun Monoclinic C 1 2/c1 a=4.6832Å, b=3.4288Å, c=5.1297Å struktura, Cu₂O uchun esa kubik P n-3m a=4.2580Å strukturaga ekinligi aniqlandi.

Xulosa va takliflar. Mazkur tadqiqotda magnetron changlatish usuli orqali Si/ZnO taglik asosida CuO va Cu₂O yupqa qatlamli geterostrukturalar hosil qilindi. Tajribalar uch xil holatda: qizdirilmagan, 600 °C da qizdirilgan, va 600–800 °C da qizdirilib, miltillama razryad ionlari bilan tozalangan tagliklarda olib borildi. Olingan qatlamlarning kristallik darajasi, fazaviy tarkibi, morfologiyasi, shuningdek elektrofizik va optik xususiyatlari chuqur o'rganildi. Tahlillar shuni ko'rsatdiki, ayniqsa yuqori haroratda qizdirish va ionli tozalash orqali hosil qilingan qatlamlarda kristallanish darajasi yuqori, struktura silliq va zich, fazaviy tarkibi esa sof holatda shakllangan. Cu₂O qatlamlarida 800 °C da tozalangan yuzaga o'stirilganda 100% kristall faza hosil bo'lgani qayd etildi. SEM va EDS tahlillari, shuningdek Raman spektroskopiyasi natijalari bu holatlarni tasdiqladi. Olingan natijalar shuni ko'rsatadiki, mos harorat va sirtga tayyorlov ishlovlari orqali mis oksidli yarimo'tkazgich qatlamlarning sifatini sezilarli darajada oshirish mumkin. Natijada tayyorlangan CuO/Cu₂O geterostrukturalar samarali va ekologik toza quyosh elementlarini yaratishda istiqbolli material sifatida taklif etilishi mumkin.

ADABIYOTLAR

1. Minami T, Nishi Y, Miyata T and Nomoto J 2011 Appl. Phys. Exp. 4 062301. DOI 10.1143/APEX.4.062301
2. Mittiga E, Salza E, Sarto F, Tucci M and Vasanthi R 2006 Appl. Phys. Lett. 88 163502. <https://doi.org/10.1063/1.2194315>
3. Izaki M, Shinagawa T, Mizuno K, Ida Y, Inaba M and Tasaka A T 2007 J. Phys. D 40 3326. DOI 10.1088/0022-3727/40/11/010
4. Jeong S S, Mittiga A, Salza E, Masci A and Passerini S 2008 Electrochim. Acta. 53 2226.
5. Izaki M, Mizuno K, Shinagawa T, Inaba M and Tasaka A 2006 J. Electrochem. Soc. 153 C668.
6. Teresa D G, Mark G S, Yanchun Z Rachel A V, Robert A V L and Jay A S 1996 Chem. Mater. 8 2499.
7. Nakaoka K and Ogura K 2002 J. Electrochem. Soc. 149 C579.
8. Fujimoto K, Oku T and Akiyama T 2011 J. Ceram. Soc. Jpn. 119 402.
9. Oku T, Noma T, Suzuki A, Kikuchi K and Kikuchi S 2010 J. Phys. Chem. Solids 71 551.
10. Oku T, Motoyoshi R, Fujimoto K, Akiyama T, Balachandran J and Cuya J 2011 J. Phys. Chem. Solids 72 1206.
11. Domnina M I, Filatov S K, Zyzyukia I I and Vergasova L P 1986 Neorgan. Materialy 22 1743.
12. Kidowaki H, Oku T and Akiyama T 2012 J. Phys. Conf. Series 352 012022.
13. Oku T, Takeda A, Nagata A, Fujimoto K, Akiyama T and Suzuki A 2012 J. Phys. Conf. Ser. 352 012024.
14. Oku T, Takeda A, Nagata A, Kidowaki H, Kumada K, Fujimoto K., Suzuki A, Akiyama T, Yamasaki Y, and Osawa E 2013 Mat. Tech. 28 21.
15. Martin A G, Keith E, David L K, Yoshihiro H and Wilhelm W 2006 Prog. Photovolt Res. Appl. 14 455.



UO'K:524.4

Ikrom XURRAMOV,
O'zbekiston Milliy universiteti magistranti
Fazliddin SHAMSHIYEV,
O'zbekiston Milliy universiteti dotsenti, f.-m.f.n
E-mail: ikromjonakramovich98@gmail.com

Chirchiq davlat pedagogika universiteti professori, f.-m.f.d I.Tadjibaev taqrizi asosida

THE APPLICATION OF LOCAL INTEGRALS IN STELLAR DYNAMICS

Annotation

This article focuses on the application of local integrals in stellar dynamics and solving the second integral problem for an arbitrary mass distribution by plotting isoenergetic level curves. It also involves comparing these curves with the potential level curves of a rotationally symmetric galaxy in the first approximation and analyzing them.

Key words: local integral, isoenergetic levels, spherical symmetry.

ПРИМЕНЕНИЕ ЛОКАЛЬНОГО ИНТЕГРАЛА В ДИНАМИКЕ ЗВЁЗД

Аннотация

Данная статья посвящена применению локальных интегралов в динамике звёзд и решению задачи второго интеграла при произвольном распределении массы путем построения изоэнергетических уровней линий. Также проводится их сравнение с потенциальными уровнями линиями галактики в состоянии вращательной симметрии в первом приближении и их анализ.

Ключевые слова: локальный интеграл, изоэнергетические уровни, сферическая симметрия.

YULDUZLAR DINAMIKASIDA LOKAL INTEGRALINING QO'LLANILISHI

Annotatsiya

Mazkur maqola yulduzlar dinamikasida lokal integralning qo'llanilishini va massaning ixtiyoriy taqsimotida ikkinchi integral muammosini yechish uchun izoenergetik sath chiziqlarini chizish, ularni birinchi yaqinlashishdagi galaktikaning rotatsion-simmetrik holatdagi potensial sath chiziqlari bilan taqqoslash va tahlil qilishga bag'ishlangan.

Kalit so'zlar: lokal integral, izoenergetik sathlar, sferik-simmetriya.

Kirish. Uch o'lchamli maydonda mahalliy integralga yo'l qo'yadigan potentsiallarni o'rganish nazariy mexanikada muhim tadqiqot yo'nalishlaridan biridir, ayniqsa bunday maydonlardagi zarralar harakatini hisobga olgan holda. Ushbu ishning maqsadi - MATLAB dasturi yordamida uch o'lchamli maydonda mahalliy integralga ega bo'lgan potentsiallarning izoyuzali (isosurface) chiziqlarini sonli hisoblashdan iborat. Tadqiqotda bu nazariy potentsiallar haqiqiy fizik potentsiallar, masalan, tortishish yoki elektrostatik maydonlar bilan solishtiriladi va tahlil qilinadi. Hisob-kitoblar orqali bunday maxsus potentsiallarning fizik kontekstdagi xatti-harakati va xossalari chuqurroq tushunishga erishiladi. Ayniqsa, nazariy potentsiallar real tizimlardan qanday farq qilishi yoki qanday o'xshashligi aniqlanadi, bu esa ularning amaliy qo'llanilishdagi ahamiyatini ko'rsatadi. MATLAB dasturining sonli modellashirish imkoniyatlari izoyuzali tasvirlarni aniq ko'rsatib, fizikada uchraydigan potentsiallar bilan keng qamrovli taqqoslash imkonini beradi.

Mavzuga oid adabiyotlar tahlili. Integral muammosi ustida bir qancha olimlar izlanishlar olib borgan misol uchun: G.M. Idlis potentsialning ba'zi maxsus shakllari uchun umuman ko'p qiymatli bo'lgan integralning bir qiymatli funksiyaga aylanadigan holatlarini ko'rib chiqadi [4-6]. G.G. Kuzmin [5]-ishida statsionar Galaktikani modellashirishda uch o'qli tezlik taqsimotini ta'minlaydigan kvadratik harakat integrali qo'llanilishi batafsil yoritilgan. Shuningdek, ushbu integralning xususiyatlari [7, 9]-maqolalarda ko'p marta muhokama qilingan. D. Lynden-Bell tomonidan o'rganilganidek, statsionar tizimlar uchun ma'lum bo'lgan har bir harakat integrali shu kabi tizimlarning butun bir sinfi uchun o'z ahamiyatini saqlab qoladi. Bu sinfni yoki uning bir qismini ayrim bir o'zgaruvchi funksiyasini o'zgartirish orqali hosil qilish mumkin. Ushbu funksiya potentsial va harakat integraliga lokal shaklda, ya'ni differensiallash va integrallashsiz kiradi [8]. Integral mu'ammosidan kelib chiqib V.A. Antonov ham ish olib borgan. Antonovning ishi integral muammolari uchun yechim topish maqsadida ularni analitik ko'rinishda hisoblaganlar.

Tadqiqot metodologiyasi. Mahalliy integral mavjud bo'lgan va ikki qiymatli tezlik maydonini namoyon qiladigan bir qancha potentsial misollarni oldingi bo'limda keltirilgan differensial tenglamalarni yechish orqali qurish mumkin. Eng oddiy misollardan biri sferik simmetrik potentsialdir. Bunday holatda tezlik maydoni markazdan radial yo'nalishda tarqalayotgan yorug'lik nurlari strukturasi bilan o'xshash bo'ladi. [4]da ko'rilgan ba'zi uch o'lchovli potentsiallar energiya doimiysi qanday bo'lishidan qat'i nazar, faqat ikki qiymatli fazoviy tezlik maydonini hosil qiladigan hol uchun,

$$\left. \begin{aligned} u &= u_0 + \alpha R \\ v &= v_0 + \beta R \\ w &= w_0 + \gamma R \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

sonli hisoblashlarni bajaramiz. Keltirilgan ushbu formulada R , u_0 , v_0 , va w_0 , koordinatalar bo'yicha funktsiyalar, α , β va γ esa yo'nalish kosinuslari. Bunday tezliklar maydoni mavjudligini ta'minlovchi potensial quyidagicha ifodalanadi:

$$U = \frac{1}{2}[(grad\Phi)^2 + \rho(L)], \quad (2)$$

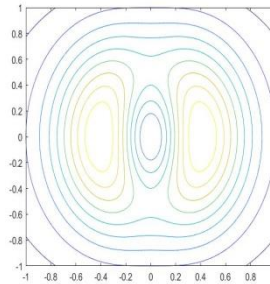
bu yerda r — markazdan radial masofa, H esa burchak koordinatalarga bog'liq ixtiyoriy funksiya. Bu potensial har bir fazo nuqtasi uchun ikkita ehtimoliy harakat yo'nalishini bildiruvchi tizimni tavsiflaydi. Qiziqarli maxsus holatlardan biri — potensialni belgilovchi funksiya F radius-vektor yo'nalish kosinuslariga bog'liq bo'lsa, potensialning quyidagi shakli vujudga keladi.

$$f = \frac{(b-a)^2[n_y^2(1-n_z^2)+n_z^2(1-n_y^2)-2n_y^2n_z^2]}{[a+(b-a)(n_y^2+n_z^2)]^4} = \frac{(b-a)^2n_y^2+n_z^2-(n_y^2+n_z^2)^2}{[a+(b-a)(n_y^2+n_z^2)]^4}.$$

(3)

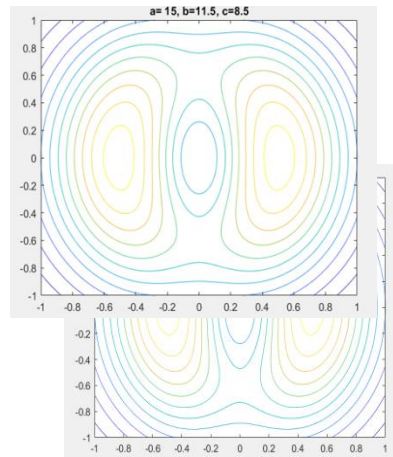
Bunday xatti-harakat namunasi potensial funksiyadagi a, b, c konstantalari turlicha bo'lganda kuzatiladi - bu esa potensial sirtlarining deformatsiyalanishiga olib keladi. Bunday deformatsiyalanish xususiyatlarini aniqlash uchun barqaror radiusli sferadagi potensialning ekstremum nuqtalarini tahlil qilish zarur. Tahlil natijasida ma'lum bo'ladiki, ayrim a, b, c konfiguratsiyalari uchun potensial sirtlarida minimumlar, maksimumlar va egri nuqtalar (saddle points) paydo bo'ladi.

Ushbu energetik sathlarni chizuvchi dastur "Matlab"da quyidagi ko'rinishga ega:



```
a=10;
b=7;
c=5;
[X, Y]=meshgrid(-1:.01:1);
u1=(b-c).*(b-c).*(1-Y.*Y).*Y.*Y;
u2=(a-c).*(a-c).*(1-X.*X).*X.*X;
u3=-2*(a-c).*(b-c).*Y.*Y.*X.*X;
u=u1+u2+u3;
w=((b-c).*Y.*Y+(a-c).*X.*X+c).^4;
F=u./w;
contour(X,Y,F);
```

Sath chiziqlarini turlicha ko'rinishini olish uchun a, b, c ning turlicha qiymatlarida Matlab dasturida grafiklar chizdik.



1-rasm $a = 10$, $b = 7$ va $c = 4$ holatda f ning sath chiziqlari topologiyasi

Ko'rib turgan grafimiz(1-rasm) Antonov tomonidan xisoblangan izoenergetik sath chiziqlarining topologiyasini ifodalaydi. Antonov o'z ishida ikkinchi integral muammosining yechimini izlash maqsadida hisoblangan analitik yechimni bilan biz xisoblagan raqamli ko'rinishdagi yechimni solishtiradigan bo'lsak bunda bizning grafik(1-rasm) Antonov tomondan xisoblangan grafik bilan o'xshash ekanligi kelib chiqdi. Ko'rishimiz mumkinki bu grafiklardan ixtiyoriy f funksiyaning sath chiziqlari a, b, c ning o'zaro bog'liqligidan grafik xam o'zgarib borgan (1-rasm). Ushbu ishda keyingi qadam sifatida xisoblangan izoenergetik sath chiziqlarini qanday sistemalar uchun ekanligini tekshirish edi, aynan shu maqsadda biz ularni tekshirish uchun faqat ikki koordinataga bog'liq bo'lgan xol uchun tekshirish talab etilardi. Chunki grafiklardan ma'lumki izoenergetik sath chiziqlari faqat ikki koordinataga bog'liq xolda keltirilgan buning sababi esa birlik vektorlarda $n_x = 0$ va $n_y^2 + n_z^2 = 1$ xolda bo'ladi.

Tahlil va natijalar. Birinchi yaqinlashishdagi galaktikalarining aksariyat qismini rotatsion-simmetrik shaklga ega deb, ya'ni simmetriya o'qiga va unga ortogonal simmetriya tekisligiga ega deb qarash mumkin. Bunday sistemada regulyar maydonning potentsiali faqat ikkita koordinataga bog'liq bo'ladi, ya'ni simmetriya o'qigacha bo'lgan masofa R ga va simmetriya tekisligigacha bo'lgan masofa z ga. Bu holda potentsial, $U(R, z)$ ega bo'ladi.

Ushbu tekislikdagi yulduzning harakat tenglamalari quydagicha bo'ladi:

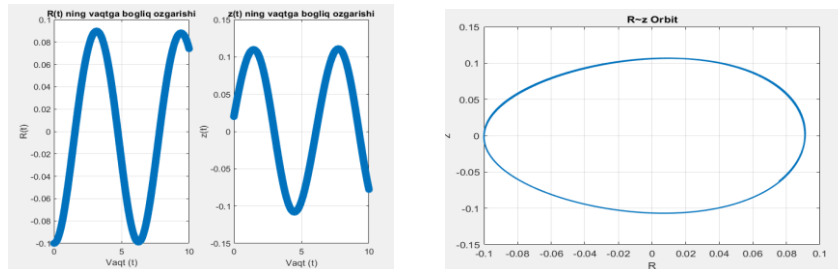
$$\begin{cases} \frac{d^2 R}{dt^2} = -\frac{\partial U}{\partial R} \\ \frac{d^2 z}{dt^2} = -\frac{\partial U}{\partial z} \end{cases} \quad (4)$$

Biz quyidagi modelda, barqaror bo'lmagan davriy orbitaga yaqin masofalarda tezliklar maydoninig o'zgarishini ko'rib chiqib

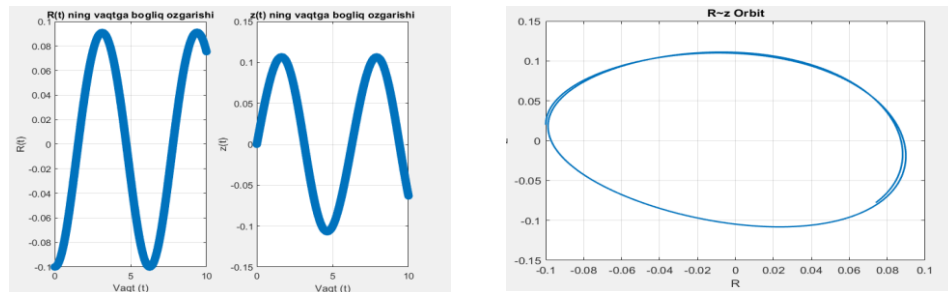
$$U(R, z) = -\frac{1}{2}(R^2 + z^2) - Rz^2 + \frac{1}{3}R^3 \quad (5)$$

Bu potentsilada ko'plab davriy orbitalar mavjud.

Biz ushbu (5) orqali berilgan potentsialda, $R_0 = -0.1$ va $z_0 = 0.0$ boshlang'ich shartlarda uchun harakat tenglamasini (4) Matlab dasturida 4-tartibli Runge-Kutta usuli yordamida integralladik va $R \sim z$ orbitani chizichdik.



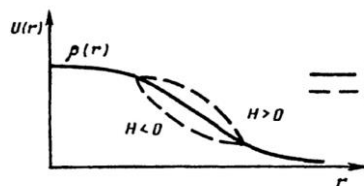
2-rasm. R va z orasidagi bo'lanishdan ko'rish mumkinki, ularning bo'liqligi ellips shaklidagi orbita ko'rinishida. biz yuqorida chizgan grafikni (1-rasm) tahlil qilish uchun aynan shu (2-rasm) real potentsial uchun grafik chizdik va biz bundan shuni ko'rishimiz mumkinki potentsialning ($R \sim z$) bog'lanish grafigi biz chizgan energetik sath chiziqlari bilan aynan o'xshash. Dastlab biz chizgan energetik sath chiziqlarini tahlil qildik unda ko'rdikki izoenergetik sath chiziqlari ma'lum bir orbitalalarni ifodalaydi chunki undagi energetik sath chiziqlaridagi ranglarning taqsimlanishi orbita shaklida tarqalgan bo'lib ranglar to'q (ko'p) bo'lgan sohalarida harakat bo'lganligini bildiradi. Ya'ni ushbu sohada harakat ko'p bo'lgan bu o'z navbatida ularning harakatning chegaraviy orbitasini ifodalaydi. Energiya sathlari va potentsialning grafigidan shuni ko'rish mumkinmi bizning grafik Antonov va Shamshievning [1992, AJ] maqolasidagi energetik sathlariga mos tushadi. Lokal integral bizga ma'lumki global integraldan farqli ravishda fazoda ma'lum bir qismlarda o'rganiladi va ular to'siq vazifasini ifodalaydi. (2-rasm) xam gallaktikamizning bir tomonidagi harakatlanayotkan obektlar uchun harakat maydonini ko'rsatadi, albatta bu ularning harakat traektoriyalari emas, ammo ularning harakati shu ellipsdan chiqmasligini ko'rsatmoqda. Biz esa butun gallaktikamiz uchun energiya taqsimlanishini ko'rsatdik.



Bundan ko'rinadiki gallaktika markazga yaqinroq qimida obektlar ko'p va harakat ham ko'proq qolaversa ularning harakat orbitalari (1-rasm) izoenergetik sathlardan chetga chiqmagan xolda ushbu chiziqlar ichida amalga oshadi. Antonov va Shamshievning [1992, AJ] maqolasida topilgan potentsial $U(x, y, z)$ ixtiyoriy sfera $r = const$ da o'rganilgan edi, ya'ni quyidagi ifoda

$$U = \frac{1}{2} \left[\rho(L) + \frac{H}{r^2} \right]$$

ning birinchi hadi doimiydek. Agar $U(x, y, z)$ ni butun fazoda o'rganadigan bo'lsak, u holda biz H/r^2 had $U(x, y, z) = const$ yuzani deformatsiyalanishiga olib kelshini ko'rishimiz mumkin bo'lardi, aks holda esa bu sirtlar faqat sferalardan tashkil topgan bo'lar edi.



3-rasm (1) Sferik jismning potentsiali va (2) sirt deformatsiyasi.

Ushbu ishda biz potensial U ning $\rho(L)$ hadini e'tiborga olgan holda, bu funktsiyaning bir necha ko'rinishlari uchun energetik sath yuzalarini MATLAB dasturida chizib tahlil qildik. Shuni aniqladikki, sferik-simmetriyaga ega jismning potentsialida $\rho(L)$ ning qiymati kamayib borar ekan. Misolimizdagi a, b va c parametrlarning o'zaro teng bo'lmagan qiymatlarida $U(x, y, z) = \text{const}$ ning yuzalari uch o'lchamli ellipsodda kamroq o'xshar ekan ekan (**1-rasm**). Hususiy hollar $a > b = c$ da esa sirtlar rotatsion-simmetrik yuzalarni ifodalashini aniqladik.

Xulosa. Mazkur tadqiqotdan olingan natijalar deyarli sferik simmetrik bo'lgan yulduz tizimlaridagi yulduzlar harakatini tahlil qilishda muhim ahamiyatga ega. Bu yerda taqdim etilgan sonli modelashtirish asosida bunday tizimlarni o'rganish va ularning dinamik xususiyatlarini tushunish imkoni yaratiladi. Mahalliy integralga yo'l qo'yadigan potentsiallar tadqiqi tezlik maydonining xos xususiyatlari va mos potensial sirtlarini ochib beradi. Keltirilgan shartlar va misollar uch o'lchamli fazodagi zarralar harakatini yangicha nazariy nuqtai nazardan ko'rib chiqishga imkon yaratadi va bu yondashuv klassik mexanika, astronomiya hamda astrofizikaning keng doirasidagi muammolarga qo'llanilishi mumkin.

ADABIYOTLAR

1. Antonov V. A., Leningrad davlat universiteti axborotnomasi, 19, 97 (1981).
2. Jacobi's, Dynamics bo'yicha ma'ruzalar, ikkinchi qayta ishlangan nashri, Hindustan Book Agency (Hindiston), 2009.
3. Whittaker, E. T., & Watson, G. N., Zamonaviy tahlil kursi, Kembrij universiteti nashriyoti, beshinchi nashr, 2021.
4. Idlis G.M., Astronomiya jurnali, 1959, 36, №1, 85-88.
5. Idlis G.M., QozSSR Fanlar akademiyasi astrofizika instituti asarlari, 1-jild, 1961, 1963, 6.51.330 K.
6. Idlis G.M., QozSSR Fanlar akademiyasi astronomiya instituti axborotnomasi, 1959, 8, 24-52.
7. Kuzmin G.G., Astronomiya jurnali, 1956, 33, №1, 27-45, 1957, №3, 2042.
8. Lynden-Bell D., Qirollik astronomiya jamiyati oylik xabarlari, 124, 95. DOI:10.1093/mnras/124.2.95 (1962).
9. Ollongren A., "Uch o'lchamli galaktik yulduz orbitasi", Niderlandiya astronomiya instituti byulleteni, 1962, 16, №521, 211-295.



UDK:535.33:539.3

Hakim XUSHVAQTOV,
SamDU professori
Abduvoxid JUMABAYEV,
SamDU professori
O'tkirjon XOLIKULOV,
SamDU dotsenti
Lutfillo DJUMANOV,
SamDU o'qituvchisi
E-mail: djumanovllo@gmail.com

O'zMU Fizika fakulteti dekani PhD Eshonqulov G'.B. taqrizi asosida

GLITSINNING SUVLI KLASTERLARIDAGI MOLEKULALARARO TA'SIRLAR

Аннотация

Ushbu ishda, asosiy aminokislotalardan bo'lgan glitsinning suvli eritmasidagi tebranish spektrlari qayd qilinib, $-\text{COO}^-$ va $-\text{NH}_3^+$ guruhlariga tegishli tebranish spektrlari tahlil qilindi. Eksperimental natijalarni tushuntirish maqsadida zichlik funksional nazariyasi (DFT) usulida B3LYP/6-311++G(d,p) funksiyalar to'plami yordamida glitsinning suv molekullari bilan hosil qiladigan $\text{Gly}+n\cdot\text{H}_2\text{O}$ ($n=1-10$) klasterlari tahlil qilindi. Tajriba va hisoblashlar natijalari tahlili ko'rsatdiki, glitsinning suvli eritmasida vodorod bog'lanishli turli klasterlar hosil bo'lishi natijasida glitsinning $\text{C}=\text{O}$ tebranish polosalari past chastota tomon siljiydi.

Kalit so'zlar: Glitsin, tebranish spektrlari, DFT, vodorod bog'lanish.

МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ВОДНЫХ КЛАСТЕРАХ ГЛИЦИНА

Аннотация

В данной работе зарегистрированы колебательные спектры глицина, одной из основных аминокислот, в водном растворе, а также проанализированы колебательные спектры групп $-\text{COO}^-$ и $-\text{NH}_3^+$. Для объяснения экспериментальных результатов комплексы $\text{Gly}+n\cdot\text{H}_2\text{O}$ ($n=1-10$), образованные глицином с молекулами воды, были проанализированы методом теории функционала плотности (DFT) с использованием функционального набора B3LYP/6-311++G(d,p). Анализ результатов экспериментов и расчетов показал, что образование различных комплексов с водородными связями в водном растворе глицина приводит к смещению полос колебаний связи $\text{C}=\text{O}$ глицина в область более низких частот.

Ключевые слова: Глицин, колебательные спектры, DFT, водородная связь.

INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN AQUEOUS CLUSTERS OF GLYCINE

Annotation

In this work, vibrational spectra of glycine, one of the main amino acids, in aqueous solution were recorded, and vibrational spectra of the $-\text{COO}^-$ and $-\text{NH}_3^+$ groups were analyzed. To explain the experimental results, $\text{Gly}+n\cdot\text{H}_2\text{O}$ ($n=1-10$) clusters formed by glycine with water molecules were analyzed by the density functional theory (DFT) method using the B3LYP/6-311++G(d,p) functional set. Analysis of the experimental and calculation results showed that the formation of various clusters with hydrogen bonds in an aqueous solution of glycine leads to a shift of the vibrational bands of the $\text{C}=\text{O}$ bond of glycine to the region of lower frequencies.

Key words: Glycine, vibrational spectra, DFT, hydrogen bond.

Kirish. Murakkab biologik sistemalarning tebranma harakatlarini o'rganishda keng qo'llaniladigan samarali usullardan biri tebranish spektroskopiyasidir [1]. Glitsin (Gly) oqsillarning muhim tarkibiy elementi bo'lib, vodorod bog'ini hosil qila oladigan bir nechta markazga ega bo'lib, $\text{C}=\text{O}$ guruhi proton-akseptor, $\text{O}-\text{H}$ va NH_2 guruhlari proton-donor vazifasini bajaradi. Shuningdek, ular peptidlar va oqsillarning "struktura elementi" ni tashkil qiladi. Shuning uchun ham nafaqat fundamental o'rganish uchun qiziqish uyg'otadi, balki amaliy jihatdan muhimligi bilan ham ajralib turadi [2-4].

Hozirgi vaqtda, ular molekullararo o'zaro ta'sir jarayonlarini o'rganish uchun modellashtirish qulay yechimlardan biridir [5]. Shuning uchun ham Sun va boshqalar tomonidan glitsin suv eruvchi-erituvchi o'zaro ta'siri strukturaviy jihatlarini IQ spektrga ta'sirini va dipol momentining elektron strukturasiga bog'liqligi o'rgangan [6]. Nazariy tadqiqotlar yordamida glitsinning suvdagi zwitterionik tuzilishi elektroneytral tuzilishiga nisbatan barqarorroq ekanligi ko'rsatilgan [7]. Niskanen va boshqalar [8] tomonidan zichlik funksional nazariyasi - molekulyar mexanika (DFT/MM) hisoblashlar yordamida glitsinning neytral tuzilishida COOH va NH_2 guruhlari o'rtasida ichki vodorod bog'lanish mavjudligi aniqlangan va suvli eritmadagi glitsin molekulasini uchun struktura va yadro-elektron o'rtasidagi bog'lanish energiyasini yuqori aniqlikda tahlil qilgan. Kishimoto va boshqalar [9] esa glitsin va suv konformatsiyalarini turli temperaturaga bog'liqligi o'rganadi va IEF-PCM usuli bilan tahlil qilishni taklif qiladi. Glitsinning suv molekullari bilan 1:1 klasterlarining gaz fazasida hamda erituvchi effektini hisobga olgan holda optimal geometriyasi hisoblanib, erituvchi effekti hisobga olganda vodorod bog'lanish uzunligi kamayganligi va gaz fazasidagi nisbatan barqaror ekanligini ko'rsatgan [10]. Vodorod bog'lanish orqali bog'langan aminokislotalar zanjirlarida suv asosiy komponent ekanligi

haqidagi gipoteza muhokama qilingan hamda DNK va RNK kabi biologik birikmalarining strukturaviy barqarorligini ta'minlashda juda muhim ahamiyatga ega ekanligi ko'rsatilgan [11-12].

Adabiyotlar tahlili shuni ko'rsatdiki, mavjud nazariya va bilimlar glitsinning suv molekulari bilan molekulyar klasterlarning hosil bo'lish mexanizmi va uning spektral namoyon bo'lishini to'liq tushuntirish imkonini bermaydi. Shuning uchun ushbu tadqiqotda tebranish (Raman va IQ) spektroskopiyasi va zichlik funksional nazariyasi (DFT) usullari yordamida glitsin va uning suvli eritmasidagi molekulyar klasterlarning hosil bo'lish mexanizmi o'rganilgan.

1. Tajriba va hisoblash texnikasi

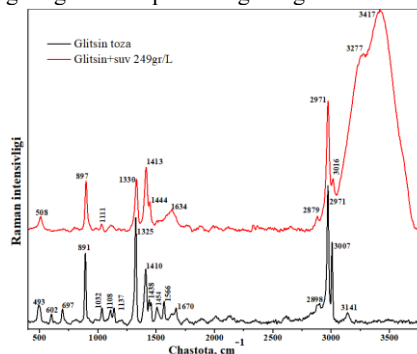
Toza glitsin va uning eng yaxshi erish konsentratsiyasidagi (0.249 g/litr) [13] suvli eritmasining 4000-400 cm^{-1} oraliqdagi IQ yutilish spektrlari Shimadzu IRTracer-100 FTIR spektrofotometri yordamida qayd qilindi. Spektrometr yuqori sezuvchanligi stabilashtirilgan. Spektrlar tahlili uchun LabSolutions IR dasturidan foydalanilgan. Glitsinning 4000-100 cm^{-1} oraliqdagi Raman spektri esa Renishaw Invia Raman spektrometrida yordamida qayd qilindi. Uyg'otuvchi yorug'lik manba sifatida 532 nm to'liq uzunlikli va quvvati 50 mW ga teng bo'lgan lazerdan foydalanilgan. Sochilgan yorug'likni qayd qilish uchun standard Renishaw CCD Camera detektorini ishlatilgan. Ekspozitsiya vaqti 10 s va ajrata olish qobiliyati 0.5 cm^{-1} . Dispersiyalovchi element sifatida davri 1200 lines/mm bo'lgan difraksiyon panjara foydalanilgan. Barcha spektrlar normal atmosfera bosimi va xona temperaturasida qayd qilingan.

Ushbu tadqiqot ishidagi barcha hisoblashlar Gaussian 09 W paket dasturida amalga oshirilgan [14]. Glitsinning suvli klasterlarining optimal geometriyasi va tebranish spektrlarini hisoblashda DFT usuli B3LYP gibrid funksiyasi va 6-311++G(d,p) bazislar to'plami qo'llanilgan.

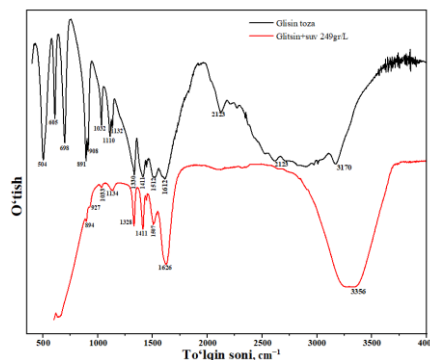
3. Natijalar va muhokama

3.1. Tajriba natijalari

IQ va Raman spektroskopiyasi bir-birini to'ldirib kelib, molekulyar sistemalardagi tebranishlar haqida ma'lumot beradi. IQ va Raman spektral chiziq (polosa)larining gohida o'zaro mos tushmasligi tanlash qoidalariga, molekulaning simmetriyaga, fundamental o'tishlarga, obertonlarga va ularning kombinatsiyalariga bog'liq kabi sabablarga bog'lanadi. Glitsin va uning suvli eritmasining tebranish spektrlarida glitsining COO⁻ guruhi va NH₃ guruhiga tegishli tebranish polosalariga e'tibor qaratdik. Chunki, ushbu guruhlar molekulararo ta'sirlarda faol qatnashadi. 1-rasmda glitsin va uning suvli eritmasining 500-1700 cm^{-1} oraliqdagi Raman spektrlari tasvirlangan. Glitsinning toza holatdagi Raman spektrlaridagi C=O valent tebranish polosasi 1670 cm^{-1} ga mos kelib, suvli eritmada 36 cm^{-1} ga past chastotaga siljigan (1624 cm^{-1}). Bu cho'qqining past chastotaga siljishiga sabab, eruvchi va erituvchi molekulari orasidagi vodorod bog'lanishlarning shakllanishi bilan bog'liq bo'lishi mumkin. Shuningdek, ba'zi tebranish polosalarining intensivligi pasayganligi va yarim kengligi o'zgarganligi ko'rish mumkin. Bunga sabab van der Waals o'zaro ta'sirlar bo'lishi mumkin. Shu bilan birga 3000-3500 cm^{-1} oraliqda suv molekularining o'zaro ta'sirlari natijasida paydo bo'lgan O-H polosasiga tegishli polosa mavjud bo'lib. Toza glitsindagi NH₃ guruhining stretching tebranishi 3141 cm^{-1} ga mos kelib, suvli muhitda O-H tebranish polosasi fonida qolganligi sababli polosadagi o'zgarishini kuzatish imkonini yo'q.



1-rasm. Glitsin va uning suvli eritmasining eksperimental Raman spektrlari.



2-rasm. Glitsin va uning suvli eritmasining eksperimental IQ yutilish spektrlari.

IQ yutilish spektrida juda zaif va keng cho'qqilar kuzatilib (2-rasm), bu cho'qqi (maksimum)lar suvli eritmada intensivliklarining pasayishi va polosalarining biroz soddalashganligini ko'rish mumkin. Ma'lumki, glitsin molekulasida funksional guruhlarining tebranishi va molekulaning translatsion harakati sababli dipol momentlarining paydo bo'lishiga olib keladi.

Dipolyarizatsiya koeffitsienti turlicha bo'lgan NH₃ guruhining valent tebranishlari bilan bog'liq bo'lgan keng polosa cho'qqisi IQ spektrida 3170 cm^{-1} da kuzatildi. Glitsinning NH₃ guruhining deformatsion tebranishiga tegishli bo'lgan polosa maksimumi 1612 cm^{-1} da qayd qilindi va suvli eritmada 14 cm^{-1} ga (1626 cm^{-1}) yuqori chastota tomon siljidi. Bu polosaning yuqoriga

siljishi glitsin molekulasi NH₃ guruhi va suv molekulasi kislorod atomi o'rtasida vodorod bog'lanish sababli sodir bo'ladi. Bundan kelib chiqadiki, glitsin tarkibida murakkab molekulyar klasterlar mavjud. Spektroskopik ma'lumotlar glitsin bilan uning suvli eritmasi tarkibida murakkab molekulyar klasterlardan tashkil topganligini tasdiqladi. Tajriba natijalaridan keltirilgan xulosalarni tasdiqlash maqsadida kvant-kimyoviy hisoblashlar amalga oshirildi.

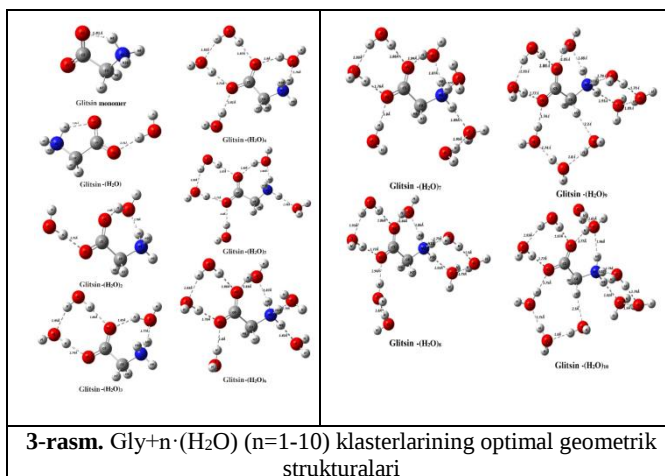
3.2. Geometrik tahlil

Glitsin va 10 tagacha suv molekullari bilan hosil bo'lishi mumkin bo'lgan molekulyar klasterlarning optimal geometriyasi 3-rasmda keltirilgan. Hisoblash natijalari glitsinning birdan o'ntagacha suv molekullari bilan hosil qilgan klasterlarning barchasi H-bog'lanish orqali hosil bo'lishini ko'rsatdi.

1-jadval. Gly+n·(H₂O) (bu erda n=1-10) hisoblangan klasterlarning Hatree energiyasi va dipol momentiga bog'liqlik jadvali.

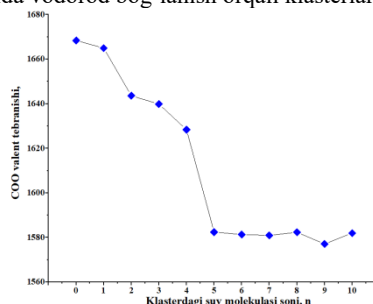
Klaster	Glitsin	Glitsin-(H ₂ O)	Glitsin-(H ₂ O) ₂	Glitsin-(H ₂ O) ₃	Glitsin-(H ₂ O) ₄	Glitsin-(H ₂ O) ₅	Glitsin-(H ₂ O) ₆	Glitsin-(H ₂ O) ₇	Glitsin-(H ₂ O) ₈	Glitsin-(H ₂ O) ₉	Glitsin-(H ₂ O) ₁₀
E, Hartree	-284.51	-361.01	-437.49	-513.97	-590.44	-666.92	-743.39	-819.86	-896.35	-972.82	-1049.3
Dipol moment, Debye	13.3198	16.4705	16.2105	16.7945	15.8212	19.2667	19.7080	22.9672	19.5046	18.7421	21.1068

Natijalar shuni ko'rsatdiki, glitsinning 7 ta suv molekullari bilan hosil qilgan klasteri qolgan klasterlar nisbatan energetik jihatdan barqaror va glitsin suv o'rtasidagi vodorod bog'lanish, suv suv o'rtasidagi vodorod bog'lanish energiyasidan yuqori ekanligi aniqlandi.



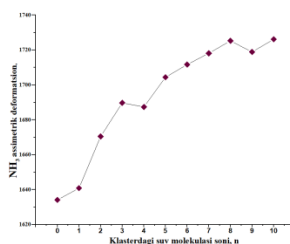
3.3. Hisoblangan spektrlar tahlili.

C=O ga guruhiga tegishli valent tebranishga polosaga qarasak monomer holatida 1668 sm⁻¹ ga mos kelsa, glitsin va 10 tagacha suv molekullari bilan hosil qilgan klasterlariga qarasak suv molekullari soni ortishi bilan 87 sm⁻¹ gacha past chastota tamoni siljiganligini ko'rish mumkin (4-rasm). O'tkazilgan tajribalarda Raman spektrlaridagi C=O polosasi 1670 sm⁻¹ ga, suvli aralashmasida 36 sm⁻¹ ga past chastotaga siljigan holatini hisoblangan spektrlar tahlili ham usbu holatni tasdiqladi. Bu moslikka sabab qilib, glitsin va suv molekullari o'rtasida vodorod bog'lanish orqali klasterlarning shakllanish mexanizmi aytish o'rinli.



4-rasm. C=O valent tebranish chastotasini klasterlardagi suv molekullari soniga bog'liqligi

Glitsinning tajribada olingan IQ yutilish spektrlari 1612 sm⁻¹ ga mos keluvchi polosa maksimumi suvli eritmada 14 sm⁻¹ (1626 sm⁻¹) yuqori chastota tomon siljigan edi. Hisoblangan spektrlar tahliliga qarasak, monomerda NH₃ guruhi tegishli bo'lgan assimetrik deformatsion tebranish 1634 sm⁻¹ ga mos kelsa, suv molekullari bilan hosil qilgan klasterlarda suv molekullari soni ortishi bilan 92 sm⁻¹ gacha yuqori chastota tomon siljiganligini ko'rish mumkin (5-rasm). Aynan IQ yutilish spektrlarida depolyarizatsiyalangan assimetrik deformatsion tebranish holati aktiv bo'lishini hisobga olsak, glitsin va suv molekullari o'rtasida N-H...O tipdagi noklassik vodorod bog'lanish tufayli yuqori chastota tomon siljiganligini tushuntirish mumkin.



5-rasm. NH₃ guruhining assimetrik deformatsion tebranish chastotasini klasterlardagi suv molekulasining ortishiga bog'liklik grafigi.

3.4. Mulliken atom zaryadining tahlili

Molekulardagi atom zaryadi atomdagi elektromanfiylikni tekshirish va kimyoviy reaksiyalarda zaryad o'tkazish jarayonlarini tavsiflash uchun hamda molekulyar sirtlardan tashqaridagi elektrostatik potentsialni modellashtirish uchun ishlatiladi [15,16]. 2-jadvalda glitsin monomeri va glitsin+(H₂O)₁₀ klasterlari uchun Mulliken atom zaryadlari keltirilgan. Jadvalga ko'ra, glitsin molekulasining O₁, O₂, N₃ va C₄ atomlari manfiy zaryadlangan holda qolgan uglerod C₅, H₆, H₇, H₈, H₉, H₁₀ musbat zaryadlangan holda molekulani proton-donor va proton-akseptor xususiyatini namoyon qiladi. Shu sababli ushbu atomlarning o'zaro ta'sirda ishtirok etish imkoniyati yuqori ekan va glitsin molekulasini klasterdagi suv molekulasini soni ortishi bilan zwitterion holati barqarorlashadi.

2-jadval. Gly+n·(H₂O) (n=1-10) klasterlaridagi glitsinning Mulliken atom zaryadlari

Klaster	O1	O2	N3	C4	C5	H6	H7	H8	H9	H10
monomer	-0.512	-0.525	-0.227	-0.437	0.233	0.234	0.234	0.323	0.339	0.339
Glitsin-(H ₂ O)	-0.490	-0.510	-0.213	-0.503	0.268	0.239	0.243	0.318	0.344	0.341
Glitsin-(H ₂ O) ₂	-0.489	-0.532	-0.351	-0.483	0.282	0.251	0.230	0.420	0.340	0.357
Glitsin-(H ₂ O) ₃	-0.483	-0.562	-0.371	-0.529	0.345	0.259	0.234	0.429	0.361	0.347
Glitsin-(H ₂ O) ₄	-0.532	-0.607	-0.333	-0.532	0.371	0.272	0.234	0.428	0.362	0.346
Glitsin-(H ₂ O) ₅	-0.608	-0.540	-0.452	-0.445	0.331	0.257	0.221	0.462	0.401	0.357
Glitsin-(H ₂ O) ₆	-0.606	-0.547	-0.570	-0.465	0.347	0.256	0.219	0.479	0.438	0.397
Glitsin-(H ₂ O) ₇	-0.596	-0.536	-0.591	-0.431	0.253	0.276	0.230	0.396	0.415	0.501
Glitsin-(H ₂ O) ₈	-0.631	-0.531	-0.607	-0.452	0.320	0.257	0.230	0.402	0.429	0.486
Glitsin-(H ₂ O) ₉	-0.615	-0.519	-0.560	-0.537	0.315	0.259	0.269	0.398	0.422	0.465
Glitsin-(H ₂ O) ₁₀	-0.606	-0.520	-0.530	-0.557	0.335	0.261	0.265	0.370	0.417	0.465

Xulosa. Glitsin va uning suvli eritmasining tebranish spektrida o'zgarishlar kuzatildi. Raman spektrlarida polosa maksimumlarining past chastotaga siljishi, vodorod bog'lanish orqali suv va glitsin molekulasini o'rtasida klasterlarning shakllanish mexanizmi bog'liq va buni nazariy tadqiqotlar to'liq tasdiqladi. IQ yutilish spektrida yuqori chastotaga siljish, N-H-O tipdagi vodorod bog'lanishlari natijasida va qutblangan assimetrik deformatsion tebranish holatining aktiv bo'lishini nazariy tadqiqotlar ham tasdiqladi. Nazariy hisoblashlar glitsinning 7 ta suv molekulasini bilan hosil qilgan klasteri qolgan klasterlar nisbatan barqarorligi va klasterlardagi suv molekulasini soni ortishi bilan zwitterion holati barqarorlashishi aniqlandi.

ADABIYOTLAR

1. Wraight C. A., BBA Bioenergetics. 2006-T. 1757. №. 8. p-886-912.
2. Mergilvbery R.W., Glodstein G., Biochemistry – A Functional Approach, Saunders, USA 1979.
3. Trottonda F.R., et al., Chem. Phys. Lett. 1991-260. 21
4. Watanabe. Toshio., et al., (1997) J. Mol. Struct. THEOCHEM 397.1-3: p-113-119.
5. Israelachvili. J. N., Intermolecular and surface forces. AP. 2011.
6. Sun. J., et al., JCP 2010 – T. 133. №. 11.
7. Boča. R., Štofkó. J., Imrich. R., ACS omega. 2023. T. 8. №. 31. p- 28577.
8. Niskanen. J., et al., PCCP. 2013. T. 15. №. 1. C. 244-254.
9. Kishimoto. N., Chem. Phys. Lett. 2017. T. 667. p-172-179.
10. Ke H. W., et al., Sci. China Chem. 2010. T. 53. p-383-395.
11. Baker. E. N., Hydrogen bonding in biological macromolecules. 2012 p-721-729.
12. Bubon. T., Zdorevskiy. O., Perepelytsya. S., Eur. Biophys. J. 2023.T. 52.№. 1. p-69-79.
13. Yalkowsky. S. H., Dannenfelser. R. M., AZ: University of Arizona. 1992.
14. Frisch. M. J., et al., Gaussian 09, Revision C.01, 2009, Gaussian, Inc.: Wallingford CT.
15. Le-Quy. D., Le. Thi. T., Dao-Huy. T., ICHST-2023, 2023. p-1-8.
16. Politzer. P., Murray. J. S., Theor. Chem. Acc. 2002. T.108.p-134-142.



UDK: 539.163:504.069

Шахбоз ХАСАНОВ,
Ассистент СамГУ, PhD
E-mail: shakhbozkhasanov93@gmail.com
Улугбек ТУХТАЕВ,
Ассистент СамГУ, PhD
Дилшод НАКИМОВ,
Ассистент СамГУ, PhD

Рецензент доцента А.Рамазанов

ИНДУЦИРОВАННАЯ РАДИОАКТИВНОСТЬ И ОБЛУЧЕНИЕ ПЕРСОНАЛА ПРИ ТЕРАПИИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Аннотация

Ионная радиотерапия с использованием тяжёлых ионов обеспечивает высокую точность лечения, но сопровождается индуцированной радиоактивностью, которая может стать источником облучения для медицинского персонала. В этой работе проведён анализ индуцированной радиоактивности в ионной лечебной комнате с использованием моделирования Монте-Карло (код FLUKA). Исследование включает краткосрочные и долгосрочные сценарии облучения для оценки радиационного воздействия на персонал. Результаты показали образование множества радионуклидов, что позволило предложить меры по снижению профессионального облучения и повышению безопасности в центрах ионной терапии.

Ключевые слова: Ионная радиотерапия, Индуцированная радиоактивность, Моделирование Монте-Карло, Радионуклиды.

INDUCED RADIOACTIVITY AND PERSONNEL EXPOSURE IN HEAVY ION THERAPY: A SIMULATION STUDY

Annotation

Heavy-ion radiotherapy provides high treatment precision but is accompanied by induced radioactivity, which can be a source of radiation exposure for medical staff. This study analyzes induced radioactivity in a heavy-ion treatment room using FLUKA Monte Carlo simulations code. The research includes short-term and long-term irradiation scenarios to assess radiation exposure for staff. The results revealed the formation of numerous radionuclides, which helped propose measures to reduce occupational exposure and improve safety in heavy-ion therapy centers.

Key words: Ion radiotherapy, Induced radioactivity, Monte Carlo simulation, Radionuclides.

OG'IR IONLAR TERAPIYASIDA QOLDIQ RADIOAKTIVLIK VA XODIMLARING NURLANISHI: MODELLASHTIRISH USULI YORDAMIDA TADQIQOT

Annotatsiya

Og'ir ionlardan foydalanilgan ionli radioterapiya yuqori aniqlikdagi davolashni ta'minlaydi, biroq u tibbiyot xodimlari uchun nurlanish manbai bo'lishi mumkin bo'lgan qoldiq radioaktivlik bilan kechadi. Ushbu ishda FLUKA kodidan foydalangan holda Monte-Karlo modellash tirish yordamida ionli davolash xonasida qoldiq radioaktivlikning tahlili o'tkazildi. Tadqiqot qisqa muddatli va uzoq muddatli nurlanish stsenariylarini o'z ichiga olib, xodimlarga bo'lgan radiatsion ta'sirni baholashga qaratilgan. Natijalar ko'plab radionuklidlarning hosil bo'lishini ko'rsatdi, bu esa ion terapiyasi markazlarida kasbiy nurlanishni kamaytirish va xavfsizlikni oshirish bo'yicha chora-tadbirlarni taklif qilishga imkon berdi.

Kalit so'zlar: Ion radioterapiyasi, Indusiralangan radioaktivlik, Monte-Karlo simulyatsiyasi, Radionuklidlar.

Введение. Ионная радиотерапия стала высокоэффективным и точным методом лечения рака, благодаря уникальным физическим и биологическим свойствам тяжёлых ионов, таких как углерод. В отличие от традиционных методов, использующих фотонную или протонную терапию, ионная терапия обеспечивает превосходное распределение дозы с резким пиком Брага, что позволяет доставлять высокие дозы радиации непосредственно в опухоли, минимизируя воздействие на окружающие здоровые ткани [1, 2]. Эта особенность делает ионную терапию особенно полезной для лечения радиорезистентных опухолей и тех, которые расположены рядом с критически важными органами [3, 4].

Однако такой передовой метод, как ионная терапия, также сопряжён с новыми проблемами, в частности с индуцированной радиоактивностью, возникающей в ходе лечения [5]. Когда высокоэнергетические ионы взаимодействуют с различными материалами в лечебной комнате, включая тело пациента, воздух и медицинское оборудование, происходят ядерные реакции, которые производят широкий спектр радионуклидов [3, 6, 7]. Эти радионуклиды, в основном являющиеся бета-излучателями, способствуют созданию общего радиационного фона в лечебной комнате даже после завершения процедуры лечения. Индуцированная радиоактивность является значительным источником радиационного воздействия на медицинский персонал, поскольку они часто должны заходить в комнату вскоре после облучения для помощи пациентам, настройки оборудования или подготовки к следующей процедуре [8–10].

Риски для здоровья, связанные с индуцированной радиоактивностью, стали объектом растущего внимания, особенно в условиях увеличения числа центров, предлагающих ионную терапию по всему миру [5, 11, 12]. Существующие исследования показали, что уровень индуцированной радиоактивности в помещениях для ионной терапии может значительно варьироваться в зависимости от таких факторов, как энергия пучка ионов, материалы, используемые при строительстве помещения, и конкретные операционные протоколы учреждения [13].

В данном исследовании применяются современные методы Монте-Карло моделирования, в частности код FLUKA, для анализа распределения индуцированной радиоактивности в лечебной комнате ионного центра в Ганьсу (Китай) [1, 14]. Моделирование краткосрочных и долгосрочных сценариев облучения позволяет оценить воздействие на персонал и определить меры по снижению рисков. Полученные результаты способствуют разработке оптимизированных протоколов безопасности для защиты медицинского персонала и безопасной эксплуатации центров ионной терапии.

Методы и материалы

2.1 Моделирования

FLUKA - всесторонний код Монте-Карло, широко применяемый для моделирования транспортировки частиц и их взаимодействия с материалами [15, 16]. В данном исследовании использована версия FLUKA 2020.0 вместе с библиотекой Idpmqmd для симуляции ядерных реакций с тяжёлыми ионами в лечебной комнате. Особое внимание уделено мультилистевому коллиматору (MLC) и крепёжным элементам сопла, подвергающимся воздействию экранирующей стены. Упрощённые модели MLC и компенсатора позволили обеспечить эффективный расчёт. На рисунке 1 представлена модель FLUKA для горизонтального направления облучения.

В моделировании рассмотрены два сценария: кратковременное облучение (10 минут) и долгосрочное (15 лет). Для долгосрочного сценария средняя интенсивность пучка, равная $7,1 \times 10^6$ частиц в секунду, была определена как отношение общего числа облучённых частиц к рабочему времени установки с учётом минимальных интервалов отдыха и периодов полураспада долгоживущих радионуклидов.

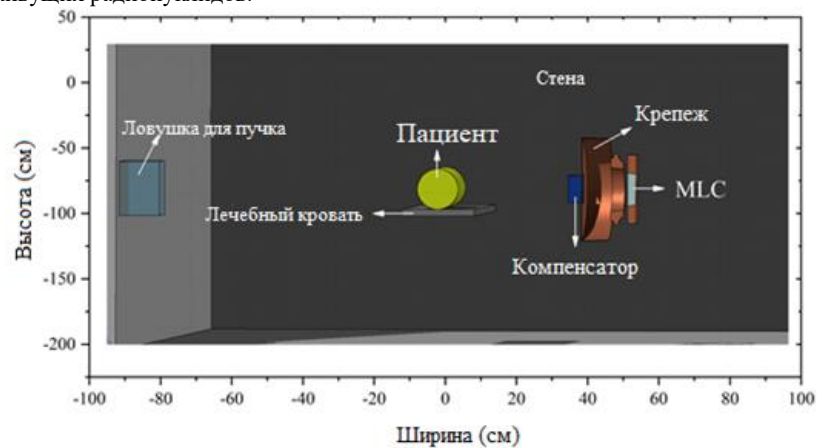


Рисунок 1. Модель FLUKA лечебной комнаты в горизонтальном направлении облучения.

Таблица 1.

Основные радионуклиды и их вклад в дозу облучения компонентов после 1 минуты охлаждения.

Компонент	Нуклид	Период полураспада	Однократное облучение		Долговременное облучение	
			Активность $\cdot 10^5$ (Бк)	Вклад γ -дозы (%)	Активность $\cdot 10^5$ (Бк)	Вклад γ -дозы (%)
Пациент (ткань)	C-11	20,33 мин	2,780	35,07	*	*
	N-13	9,965 мин	0,344	3,97	*	*
	O-15	122,24 сек	4,790	60,96	*	*
Кровать	C-11	20,33 мин	0,774	100,00	0,210	100,00
	H-3	12,33 год	0,158	*	0,158	*
	H-3	12,33 год	*	*	2,000	*
Ловушка для пучка	C-11	20,33 мин	0,118	15,49	1,980	47,73
	N-13	9,965 мин	0,037	4,41	0,228	5,00
	O-15	122,24 сек	0,608	80,11	1,900	46,02
	H-3	12,33 год	*	*	2,000	*
	Be-7	53,12 день	*	*	1,160	1,25
Воздух	C-11	20,33 мин	0,063	24,48	*	*
	N-13	9,965 мин	0,106	37,18	*	*
	O-15	122,24 сек	0,089	34,57	*	*
	Ar-41	109,61 мин	0,010	3,77	*	*
	C-11	20,33 мин	1,190	57,24	*	*
Компенсатор	N-13	9,965 мин	0,146	6,40	*	*
	O-15	122,24 сек	0,333	16,07	*	*
	F-18	109,77 мин	0,361	20,29	*	*
	C-11	20,33 мин	5,280	2,52	3,700	2,60
	O-15	122,24 сек	25,900	12,45	5,390	3,81
Стена	Al-28	2,24 мин	134,00	80,09	26,800	23,49
	Na-24	14,96 час	1,390	1,80	34,500	65,67
	H-3	12,33 год	*	*	5,090	*
	Na-22	2,60 год	*	*	1,850	2,34
	другие	—	*	3,14	*	2,09
	C-11	20,33 мин	1,120	5,87	*	*
	Dy-149	4,20 мин	0,382	2,94	*	*
MLC	Lu-165	10,74 мин	0,651	3,49	*	*
	Hf-167	2,05 мин	1,120	3,53	*	*
	Hf-169	3,24 мин	1,730	5,72	*	*
	Ta-170	6,76 мин	1,230	6,61	*	*

	Ta-172	36,8 мин	0,609	4,92	*	*
	Ta-178 ^m	2,36 час	0,890	5,12	6,370	13,93
	W-177	132 мин	0,837	3,74	3,430	5,82
	W-179	37,05 мин	5,440	2,14	*	*
	Re-179	19,5 мин	0,776	4,01	*	*
	Re-180	2,44 мин	1,910	11,21	*	*
	W-187	23,72 час	*	*	4,990	4,79
	Lu-170	2,012 день	*	*	0,895	3,20
	Lu-172	6,70 день	*	*	1,420	4,54
	Ta-172	36,8 мин	*	*	0,957	2,93
	Ta-174	1,05 час	*	*	1,920	3,35
	Ta-175	10,5 час	*	*	2,530	4,96
	Ta-176	8,09 час	*	*	3,680	13,74
	Ta-182	114,43 день	*	*	1,180	2,47
	другие	—	*	40,7	*	40,27
Крепеж	Fe-53	8,51 мин	0,296	37,17	0,097	5,67
	Mn-51	46,2 мин	0,024	2,56	0,031	1,56
	Mn-52 ^m	21,1 мин	0,177	42,37	0,128	14,16
	Mn-56	2,58 час	0,110	15,50	0,459	32,48
	Cr-49	42,3 мин	0,023	2,41	0,032	1,54
	Mn-54	312,3 день	*	*	1,240	0,44

* Вклад γ -дозы радионуклидов в этом столбце составляет менее 1% или 2%, и их соответствующая активность не была указана.

Результаты и обсуждение

3.1 Формирование и распределение радионуклидов

Результаты моделирования показали, что в лечебной комнате образуется множество радионуклидов, главным образом в результате процессов β^+ и β^- распада. Основными источниками внешнего радиационного облучения оказались γ -лучи, возникающие при аннигиляции позитронов и распаде радионуклидов. В таблице 1 приведены основные радионуклиды, выявленные в результате моделирования, а также их периоды полураспада и вклад в дозу облучения.

Особое внимание было уделено радионуклидам, образующимся в теле пациента, воздухе, компенсаторе и ловушке для пучка, среди которых преобладали ^{11}C , ^{13}N , ^{15}O и ^{41}Ar . В течение длительного периода облучения накапливаются долгоживущие радионуклиды, такие как ^3H , ^7Be , ^{22}Na и ^{182}Ta , периоды полураспада которых варьируются от нескольких лет до десятилетий. В стенах лечебной комнаты основными радионуклидами оказались ^{28}Al и ^{24}Na , тогда как в крепежных элементах преобладали ^{53}Fe , $^{52\text{m}}\text{Mn}$ и ^{56}Mn . В MLC было обнаружено более 1300 индуцированных радионуклидов, причем долгосрочное накопление таких радионуклидов, как $^{178\text{m}}\text{Ta}$, ^{176}Ta и ^{187}W , значительно увеличивает потенциальное облучение медицинского персонала из-за их относительно длительных периодов полураспада, составляющих от нескольких часов до дней.

3.2 Оценка профессионального облучения

Оценка проводилась на основе моделирования с использованием FLUKA для сценариев b и c. Для позиции A при сценарии b доза составила 0,048 мкЗв (FLUKA1) и 0,064 мкЗв (FLUKA2), а для позиции B – 0,034 мкЗв (FLUKA1) и 0,045 мкЗв (FLUKA2). При сценарии c значения немного выше: для позиции A – 0,049 мкЗв (FLUKA1) и 0,066 мкЗв (FLUKA2), для позиции B – 0,037 мкЗв (FLUKA1) и 0,049 мкЗв (FLUKA2). Соответственно, общая доза за сеанс составляет 0,097 мкЗв для позиции A и 0,071 мкЗв для позиции B (FLUKA1), либо 0,130 мкЗв и 0,094 мкЗв (FLUKA2). Ежегодные дозы составляют 0,728 мЗв для позиции A и 0,533 мЗв для позиции B по модели FLUKA1, а по модели FLUKA2 – 0,650 мЗв и 0,470 мЗв для позиций A и B соответственно, что значительно ниже рекомендованного предела в 20 мЗв/год. Результаты сопоставлены с данными, приведёнными Тужии и соавторами [17].

Вывод. Это исследование моделирования представляет собой всесторонний анализ индуцированной радиоактивности и её влияния на профессиональное облучение в медицинском центре тяжёлых ионов. Полученные результаты подчёркивают важность оптимизации рабочих схем и поддержания безопасных расстояний от облучённых компонентов для защиты медицинского персонала. Как показано в этом исследовании, использование моделирования Монте-Карло предлагает мощный инструмент для оценки и снижения радиационных рисков в условиях терапии частицами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Battistoni G, Bauer J, Boehlen TT, et al (2016) The FLUKA Code: An Accurate Simulation Tool for Particle Therapy. *Frontiers in Oncology* 6:
2. Ando K, Kase Y (2009) Biological characteristics of carbon-ion therapy. *International journal of radiation biology* 85:715–728
3. Schardt D, Elsässer T, Schulz-Ertner D (2010) Heavy-ion tumor therapy: Physical and radiobiological benefits. *Reviews of modern physics* 82:383–425
4. Durante M, Debus J, Loeffler JS (2021) Physics and biomedical challenges of cancer therapy with accelerated heavy ions. *Nature Reviews Physics* 3:777–790
5. Thomadsen B, Nath R, Bateman FB, et al (2014) Potential hazard due to induced radioactivity secondary to radiotherapy: The report of task group 136 of the American Association of Physicists in Medicine. *Health physics* 107:442–460
6. Suzuki M, Kase Y, Yamaguchi H, et al (2000) Relative biological effectiveness for cell-killing effect on various human cell lines irradiated with heavy-ion medical accelerator in Chiba (HIMAC) carbon-ion beams. *International Journal of Radiation Oncology* Biology* Physics* 48:241–250
7. Yonekura Y, Tsujii H, Hopewell JW, et al (2016) Radiological protection in ion beam radiotherapy: practical guidance for clinical use of new technology. *Annals of the ICRP* 45:138–147
8. Schulz-Ertner D, Tsujii H (2007) Particle radiation therapy using proton and heavier ion beams. *Journal of clinical oncology* 25:953–964
9. Khasanov S, Yang B, Su Y, et al (2021) Induced radioactivity at particle accelerators: a short review. *Radiation Detection*

- Technology and Methods. <https://doi.org/10.1007/s41605-021-00292-3>
10. Patterson HW (2012) Accelerator health physics. Elsevier
 11. Schlaff CD, Krauze A, Belard A, et al (2014) Bringing the heavy: carbon ion therapy in the radiobiological and clinical context. *Radiation oncology* 9:1–19
 12. Vaiserman A, Koliada A, Zabuga O, Socol Y (2018) Health impacts of low-dose ionizing radiation: current scientific debates and regulatory issues. *Dose-Response* 16:1559325818796331
 13. Luo Y, Huang S-C, Zhang H, et al (2023) Assessment of the induced radioactivity in the treatment room of the heavy-ion medical machine in Wuwei using PHITS. *Nuclear Science and Techniques* 34:29. <https://doi.org/10.1007/s41365-023-01181-8>
 14. Furuta T, Sato T (2021) Medical application of particle and heavy ion transport code system PHITS. *Radiological Physics and Technology* 14:215–225
 15. Brugger M, Ferrari A, Roesler S, Ulrici L (2006) Validation of the FLUKA Monte Carlo code for predicting induced radioactivity at high-energy accelerators. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 562:814–818
 16. Böhlen TT, Cerutti F, Chin MPW, et al (2014) The FLUKA code: developments and challenges for high energy and medical applications. *Nuclear data sheets* 120:211–214
 17. Tujii H, Akagi T, Akahane K, et al (2009) Research on radiation protection in the application of new technologies for proton and heavy ion radiotherapy. *Japanese Journal of Medical Physics (Igakubutsuri)* 28:172–206



UDK: 535.1.2

Napas ESHKABILOV,

*DSc, professor Samarkand State University named after Sh. Rashidov,
Institute of Engineering Physics, Samarkand, Republic of Uzbekistan
E-mail: e-napas@samdu.uz*

Shukhrat KHAYDAROV,

*Researcher Samarkand State University named after Sh. Rashidov,
Institute of Engineering Physics, Samarkand, Republic of Uzbekistan
E-mail: xaydarov-shuxrat@mail.ru*

Yulchi JURAEV,

*PhD, Associate Professor of Samarkand State University named after Sh. Rashidov,
Institute of Engineering Physics, Samarkand, Republic of Uzbekistan*

Based on the review by Ramazanov A. the Faculty of Physics, NUUz

LASER SPECTROSCOPY OF THE RYDBERG STATES OF THE INDIUM ATOM

Annotation

An experimental study of the main series of Rydberg $np^2P_{1/2,3/2}$ - states of the indium atom was carried out by the method of selective stepwise photoionization of atoms by laser radiation. According to photoionization spectra, quantum defects and fine structures of states are determined. Their dependence on the principal quantum number up to $n = 53$ has been studied. In the experiment, the inter-blit splitting of the spectrum $np^2P_{1/2,3/2}$ - states of the indium atom is allowed. It is shown that the dependence is well described by the ratio $\Delta E = 5900/n^3 \text{ cm}^{-1}$ and is consistent with the hydrogen-like behavior of the atom.

Key words: highly excited state, Rydberg states, Rydberg electron, photoionization, photoions, spectrometer, gated integrator, quantum defects, fine structure.

ЛАЗЕРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ СОСТОЯНИЙ РИДБЕРГА АТОМА ИНДИЯ

Аннотация

В экспериментальном исследовании основных серий состояний ридберга $np^2P_{1/2,3/2}$ атома индия методом селективной последовательной фотоионизации атомов лазерным излучением были получены спектры фотоионизации, определены квантовые дефекты и тонкие структуры состояний. Изучена их зависимость от главного квантового числа до $n=53$. В эксперименте была обнаружена межзонная расщепленность спектра состояний $np^2P_{1/2,3/2}$ атома индия. Показано, что эта зависимость хорошо описывается соотношением $\Delta E = 5900/n^3 \text{ см}^{-1}$ и соответствует поведению атома, подобному водородному.

Ключевые слова: высоко возбужденное состояние, состояния Ридберга, электрон Ридберга, фотоионизация, фотоионы, спектрометр, запираемый интегратор, квантовые дефекты, тонкая структура.

INDIUM ATOMINING RYDBERG HOLATLARINING LASER SPECTROSCOPIYASI

Annotatsiya

Indiy atomining $np^2P_{1/2,3/2}$ - holatlarning asosiy seriyalarining tajribaviy o'rganilishi lazer nurlari yordamida atomlarni tanlab, bosqichma-bosqich fotoionlash usuli bilan amalga oshirildi. Fotoionlash spektrlariga asoslanib, kvant defektlari va holatlarning nozik tuzilmalari aniqlandi. Ularning n (asosiy kvant soni) ga bog'liqligi $n=53$ gacha bo'lgan qiymatlari uchun o'rganildi. Tajribada indiy atomining $np^2P_{1/2,3/2}$ holatlarining spektridagi diapazonlararo bo'linishi imkoniyatiga ega bo'ldi. Ko'rsatilishicha, bu bog'liqlik $\Delta E = 5900/n^3 \text{ sm}^{-1}$ nisbati bilan yaxshi ta'riflanadi va atomning vodorodga o'xshash xossalriga mos keladi.

Kalit so'zlar: yuqori energiyali holat, Ridberg holatlari, Ridberg elektroni, fotoionlash, fotoionlar, spektrometr, qoplangan integrator, kvant defektlari, nozik struktura.

Introduction. Spectroscopy of highly excited states of atoms is an important area of atomic spectroscopy. These include states with energies close to the atomic ionization threshold, known as Rydberg states. Such states can be effectively described in the single-particle approximation, in which one of the electrons, the so-called Rydberg electron, has a high energy and moves in the potential field of the atomic core. The core field is dominated by the monopole Coulomb potential, while the contribution of higher multipole components is relatively small. For this reason, the state of the Rydberg electron is close to hydrogen-like, the difference from which is characterized by a correction to the principal quantum number of the Rydberg electron, called a quantum defect. Thus, it is the analysis of quantum defects in Rydberg states that makes it possible to obtain information about the properties of the atomic core [1-3].

Results. If you look at the energy level and the general serial patterns of the elements of the main subgroup III (Al, Ga, In and Tl) of the periodic table, they are close to each other. Since everything refers to an element with one external p-electron. When the valence electron of these atoms is excited, one-electron spectra appear, which are characterized by the presence of doublet spectral lines [4-8]. The essential difference of these spectra from the spectra of alkaline or alkaline earth elements is that the main

term is the term $np\ ^2P_0$ rather than $ns\ ^1S_0$. From the term $np\ ^2P_0$ the sharp and diffuse series begin, i.e. $np\ ^2P_0 - ns\ ^2S$ and $np\ ^2P_0 - nd\ ^2D$. It is these series that are observed in the absorption spectrum of atoms. The first members of the series represent resonant doublets. The value of the doublet splitting of the main term 2P_0 increases rapidly from Al to Tl. For Tl the value of the doublet splitting ($^2P_{1/2} - ^2P_{3/2}$) of the term is about 1 eV. The doublet splitting of the term 2D ($^2D_{5/2} - ^2D_{3/2}$) also increases from Al to Tl, but its absolute value is much smaller.

The second difference from the spectra of alkali or alkaline earth elements is that, along with the system of doublet terms resulting from the excitation of the p- electron, there are possible terms, quartet and doublet, arising from the excitation of one of the s-electrons. This term is the deepest excited term, the remaining terms of the $nsn\ 2p$ configuration lie much higher, in most cases above the first ionization boundary $ns\ ^2S_0$.

As is known from theory, the energy states of an atom for different values of the quantum numbers n , l , and j are calculated using the Rydberg-Ritz formula [9-12].

$$E_{n,l,j} = -\frac{R_{In}}{(n^*)^2} = -\frac{R_{In}}{(n - \delta_{n,l,j})^2} \quad (1)$$

where cm^{-1} [13]. The transition frequencies were calculated using the speed of light $c=299792458$ m/s. Quantum defects were found using the iterative formula:

$$\delta_{n,l,j} = z_{j,l} + \frac{\alpha_{l,j}}{(n^*)^2} + \frac{\beta_{l,j}}{(n^*)^4} + \frac{\gamma_{l,j}}{(n^*)^6} + \dots \quad (2)$$

To calculate the quantum defect of levels c , it suffices to keep only the first two terms in the iterative formula (2). The least squares method was used to calculate the coefficients and for the P-terms of the indium atom.[14-15]

To calculate the fine splitting, we used a formula in the form of a polynomial containing odd powers of the ratio $1/n$, starting from n^{-3} .

$$\Delta E_{nl} = \frac{1}{n^3} \left(A_l + \frac{B_l}{n^2} + \frac{C_l}{n^4} + \dots \right) \quad (3)$$

Where A, B and C are constant values depending on the orbital quantum number. It is selected for each atom individually and, in our case, for the indium atom it was $\text{\AA}=5900$.

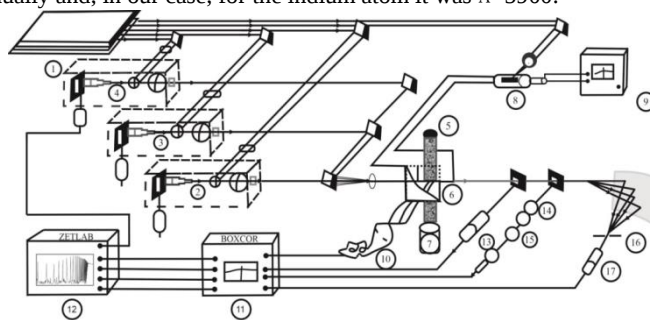


Figure 1. Scheme of the experimental setup.. 1 nitrogen laser; 2,3,4 - dye lasers; 5-atom beam; 6-electrodes; 7-atomizer; 8-discharger; 9-power supply; 10-VEU-1; 11-pulse signal averaging BOXCOR integrator; 12-multichannel recorder ZETLAB; 13-optics LSP galvanic lamp, 14-Fabry-Perot interferometer; 15-PM, 16-monochromator. 17-photodiode;.

The dye lasers were pumped by a pulsed nitrogen laser with a transverse discharge. Laser beams cross an atomic beam in vacuum between two electrodes, to which, after laser excitation and I, an electric field is applied from a pulsed voltage generator (PVG). The GVP was powered from a high-voltage direct voltage source. A gas-filled spark gap, which was triggered by nitrogen laser radiation, was used as a switch. Such a scheme makes it possible to form a single rectangular electric field pulse on a matched load. The ions that appeared as a result of the autoionization of Rydberg atoms by a pulsed electric field acquire momentum in the electric field in the direction of the field strength vector. The value of the velocity corresponding to this momentum is two orders of magnitude greater than the velocity of an atom in the beam; therefore, the motion of the ion occurs in the direction perpendicular to the direction of motion of the atomic beam. Having reached the electrode with zero potential, the ions are drawn out through the slot in this electrode by the electric field of the cathode of the secondary electron multiplier (SEM). The ion signal from the wind turbine is fed to the pulse signal averager BOXCOR integrator and multichannel recorder ZETLAB.

The gated pulse integrator developed by us makes it possible to carry out continuous recording of the average values of the amplitude of the photoion signal pulses with the help of a recorder.

Of the dye laser radiation wavelength and tuning to the excited period were performed using a monochromator and a hollow cathode lamp. Simultaneously with the spectrum of the ion signal, the reference spectrum from the Fabry-Perot etalon was recorded. The scanning of the recorder is carried out synchronously with the rotation of the grating of the dye laser used in the last stage of excitation. The energy values of the Rydberg or autoionization states were measured by comparing the photoion spectra with the reference spectrum.

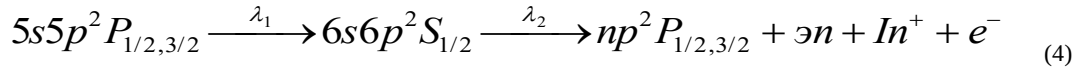
In a three-stage atomic excitation scheme, high-power radiation is required to saturate the selected transitions. In this case, a simple nitrogen pump laser was replaced by a two-volume nitrogen laser. In this case, the total generation energy doubled; was 20 mJ. Strictly identically manufactured laser chambers and electrical taps ensured the synchronous operation of two generating

chambers within no worse than 1–2 ns. Studies of this laser have shown that it makes it possible to obtain two-frequency generation by filling two active volumes with different and working gases.

In general, the highly sensitive selective laser photoionization spectrometer developed in this work has the following characteristics: the tuning range is 390–700 nm; emission line width - 0.01 cm⁻¹; resolution -10¹²; selectivity at three stages at fines - 10¹⁵; sensitivity - one atom.

Experimental results and their discussion

The main series of Rydberg states of indium atoms are studied in the experiment. Quantum defects, fine structures and their dependences on the principal quantum number were determined from photoionization spectra. Highly excited Rydberg $np\ ^2P_{1/2,3/2}$ - states of the indium atom are populated from the ground $5p\ ^2P_{1/2}$ or from the metastable $5p\ ^2P_{3/2}$ state through the intermediate $6s\ ^2S_{1/2}$ level according to the following scheme:



The main term is a doublet term $^2P_{1/2,3/2}$, and the $^2P_{1/2}$ level is located below the $^2P_{3/2}$ level. The splitting value is $\sim 2212.56\text{ cm}^{-1}$. To excite an atom, a stronger quantum transition is chosen, i.e. $5p\ ^2P_{1/2} 6s\ ^2S_{1/2}$, which is excited by the first stage laser with a wavelength $\lambda_1=410.2\text{ nm}$. The wavelength of the second laser was tuned in the range $\lambda_2 = 448 \div 460\text{ nm}$, which makes it possible to excite Rydberg states with $n=17 \div 70$. Based on the results of the experiment, averaged over three measurements, the values of the energy of quantum transitions, quantum defects of Rydberg states were determined (Fig. 2.)

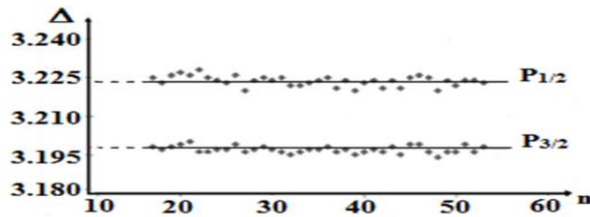


Figure 2. Dependence of the quantum defect $^2P_{1/2,3/2}$ of the state of the indium atom on the principal quantum number.

Doublet splittings of the spectrum of the P-state of the indium atom up to $n=53$ are allowed in the experiment. As a result of processing the spectra, the interlevel splitting of the fine structure for the Rydberg states was measured and its dependence on the principal quantum number was studied. This dependence is well described by the ratio $\Delta E=5900/n^3\text{ cm}^{-1}$ and is consistent with the hydrogen-like behavior of the atom. This dependence is shown in Fig.3.

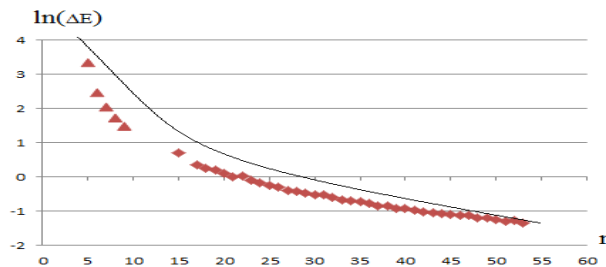


Figure 3. Dependence of the fine splitting value (ΔE) on the principal quantum number (n) for the $^2P_{1/2,3/2}$ state of the indium atom.

Conclusion. Doublet splittings of the spectrum of the P-state of the indium atom up to $n=53$ are allowed in the experiment. The results obtained can be used to solve some technological problems associated with the excitation of atomic levels by laser radiation. The results obtained can be used to solve some technological problems associated with the excitation of atomic levels by laser radiation.

REFERENCES

1. Letokhov, V.S. Laser photoionization spectroscopy, The science. Moscow, 1987.
2. Letokhov V.S., V.I.Mishin, A.A.Puretsky. Selective photoionization of atoms by laser radiation.- Sb. St. Plasma chemistry. M. Atomizdat. 1977. No.4, pp.3-60.
3. Sobelman, I.I. Introduction to the theory of atomic spectra. The science, M, 1977.
4. Tursunov A.T., Eshkobilov N.B. - Av. certificate No.1092387 "Method of measuring the spatial distribution of atomic concentrations" with priority from 17.01.83
5. Muchnik M.L., Orlov Yu.V., Parshin G.D., Chernyak E.Ya., Letokhov V.S., Mishin V.I. - Kv. electronics. 1983. vol.10. pp.2331-2335.
6. Tursunov, A.T.; Akilov, R.; Kornienko, V.V.; Khasanov T.; Eshkobilov, N.B.; J.P.S. 1986, v.14, v.6, p.1029.
7. A.K.Kasimov, A.T.Tursunov, N.B.Eshkobilov. - /RIS-96/ USA., Renkelvani, p.141
8. Eshkabilov, N.B.; Xaydarov, Sh.R.; Kurbaniyazov, A.C. Lazer photoionization spectroscopy of Rydberg and autoionization states of rare-earth atoms. Scientific Journal of Samarkand University. Vol.2020.3 pp.137-145.
9. Eshkobilov, N.B.; Khaydarov, Sh.R.; Technology for obtaining pure materials at the atomic-molecular level using laser radiation. Modern science and research. p.173-176 <https://doi.org/10.5281/zenodo.7337055>.
10. Eshkabilov N.B.; Kurbaniyazov, S.S.; Khaidarov, Sh.R. News of higher educational institutions. 2021 V.64 No.10. doi :10.17223/00213411/64/10/79

11. Eshkabilov N. B., A. S. Kurbanliyazov A. S., and Sh. R. Haidarov. - Russian Physics Journal. Pleiades Publishing, New York, 2022. -Vol. 64, - No 10, - pp. 1872-1879
12. Zainabidinov S.Z. et al. - Physics and technology of semiconductors. 2016, vol. 50, issue 1. pp. 60-66.
13. Gusev A.I. - Nanomaterials, nanostructures, nanotechnology. – M. Fizmatizdat, 2007, p.416.
14. Radzig A.A., Smirnov B.M. Parameters of atoms and atomic ions. Handbook. M., 1986. from 16-26.
15. Eshkobilov N.B. Collection of statistics. "Spectroscopy of condensed matter". 1991. pp.57-60.