



УЎК: 623:004 (78.25.39)

S.S.ABDURAYIMOV,

Chirchiq oliy tank qo'mondonlik muhandislik bilim yurti professori, polkovnik, harbiy fanlar doktori

A.I. XURRAMOV,

Chirchiq oliy tank qo'mondonlik muhandislik bilim yurti katta o'qituvchisi, PhD

"TIQXMMI" Milliy tadqiqot universiteti dotsenti, t.f.f.d. (PhD) Eshpulatov N.M. taqrizi asosida

MATHEMATICAL AND STATISTICAL PROCESSING OF THE DYNAMIC SERIES BY THE WIDTH OF THE SOURCE MATERIAL OF THE UNIVERSAL SPLIT EQUIPMENT

Abstract

The need to form a dynamic series in order to theoretically substantiate the principle of operation of universal equipment for splitting dried fruits, an angled cell for bone transfer, mathematical and statistical processing of the dynamic series of permissible parameters of the dried fruit cell regulator depending on the width of sorted bones, the study of the width of split bones in determining the optimal design parameters of equipment, based on probability theory, the limit of propagation is determined the assembled dynamic series.

Keywords: dried fruits, military personnel, Armed Forces, army dry ration, dry rations, vegetable oil, a device for splitting bones, dynamic range.

МАТЕМАТИКО-СТАТИСТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА ДИНАМИЧЕСКОГО РЯДА ПО ШИРИНЕ ИСХОДНОГО МАТЕРИАЛА УНИВЕРСАЛЬНОГО ОБОРУДОВАНИЯ РАСКОЛА

Аннотация

Необходимость формирования динамического ряда с целью теоретического обоснования принципа работы универсального оборудования по расколу сухофруктов, установленная под углом ячейка для передачи косточки, математико-статистическая обработка динамического ряда допустимых параметров регулятора ячейки сухофруктов в зависимости от ширины отсортированных косточек, исследование ширины раскалываемых косточек при определении оптимальных конструктивных параметров оборудования, на основе теории вероятностей определен предел распространения собранного динамического ряда.

Ключевые слова: сухофрукты, военные кадры, Вооруженные Силы, армейский сухой рацион, сухой паек, растительное масло, устройство для раскалывания косточек, динамический ряд.

UNIVERSAL CHAQISH QURULMASI XOMASHYOSI KENGLIGI BO'YICHA DINAMIK QATORGA MATEMATIK – STATISTIK ISHLOV BERISH

Annotatsiya

Universal quruq mevalarni chaqish qurulmasi ish prinsipini nazariy jihatdan asoslash maqsadida dinamik qatorni shakllantirish zarurligi, burchak ostida o'rnatilgan danak uzatish novi, danak meyorlagich uyachasining ma'qul parametrlari saralangan danaklarning kengligiga bog'liq holda quruq meva (danak)lar kengligi bo'yicha dinamik qatorga matematik – statistik ishlov berish, qurilmaning maqbul konstruktiv parametrlarini aniqlashda chaqilayotgan danaklarning kengligini tadqiq qilish, ehtimollar nazaryasiga asoslangan holda to'plangan dinamik qatorning tarqalish chegarasi aniqlangan.

Kalit so'zlar: Quruq mevalar, harbiy kadrlar, Qurolli Kuchlar, armiya quruq ratsioni, quruq oziq-ovqat, o'simlik moyi, chaqish qurulmasi, dinamik qator.

Kirish. Quruq mevalar kengligi bo'yicha dinamik qatorga matematik – statistik ishlov berish orqali universal chaqish qurulmasi ish prinsipini nazariy asoslash imkoniyati yaratiladi. Avvalambor, bu texnologiyani ishlab chiqishdan asosiy maqsad, harbiy kadrlarimiz ratsioni uchun zarur bo'lgan quruq mevalar (bodom, yong'oq, o'rik danagi va h.k. mag'zi) va undan olinadigan o'simlik moyi bilan ta'minlash jarayonini takomillashtirishdan iborat. Yoshlarni harbiy-vatanparvarlik ruhida tarbiyalash hamda O'zbekiston Respublikasi Qurolli Kuchlari tizimida ma'naviy-ma'rifiy ishlar samaradorligini oshirish bo'yicha qabul qilingan konsepsiyalarni amalga oshirish doirasida har tomonlama rivojlangan, bilimdon, xalqiga, shuningdek, Vatanga xizmat qilish ishiga sodiq yoshlarni tarbiyalash bo'yicha keng miqyosli ishlar amalga oshirilmoqda [1].

Mavzuga oid adabiyotlarning tahlili. Armiya quruq ratsioni – bu dalada o'zini o'zi ovqatlantirish uchun harbiy xizmatchiga beriladigan mahsulotlar to'plami. O'zbekiston Respublikasi Vazirlar Mahkamasining 2019 yil 3 dekabrda 966-son "Qurolli Kuchlarning oziq-ovqat ta'minotini yanada takomillashtirish chora-tadbirlari to'g'risida"gi qaroriga bodom, o'rik danagi mag'zi va o'simlik moyi kabi mahsulotlar kiritilgan bo'lib, unga ko'ra taom bilan ta'minlashning iloji bo'lmagan hollarda ikki mahal issiq ovqat va bir mahal quruq oziq-ovqat bilan ta'minlanishlari shartligi hamda har bir harbiy xizmatchiga jangovar xizmat va o'quv-jangovar vazifalarga jalb qilinish davomida 100 grammdan bodom mag'zi bir kosa issiq ovqatga almashtirilishi kerakligi yoritilgan [6]. Vazirlar Mahkamasi tomonidan №189 2019 yil 4 martda tasdiqlangan "Harbiy qismlarida outsorsing xizmatlarini ko'rsatish tartibi to'g'risida"gi Qarori asosida zamonaviy qurilmalar hamda sifatli quruq oziq-ovqat mahsulotlarini Qurolli Kuchlarimizga yetkazib berish uchun mazkur Quruq mevalarni chaqish universal qurilmasini ishlab chiqish muhim masalalardan biri hisoblanadi. Shu bilan bir qatorda, hozirgi kunda Mudofaa sanoati tizimida qo'shinlarni quruq oziq-ovqat mahsulotlari bilan ta'minlashni takomillashtirish, Qurolli Kuchlarning quruq oziq-ovqat ratsionidagi muammolar va ularni

yechimi, Qurolli Kuchlar front orti quruq oziq-ovqat bilan ta'minlovchi texnikalarini takomillashtirish bo'yicha ilmiy tadqiqotlar yetarli darajada olib borilmagan [2-4].

Tadqiqot metodologiyasi. O'zbekiston Respublikasi Prezidenti Sh.Mirziyoyev 2021 yilga "Yoshlarni qo'llab-quvvatlash va aholi salomatligini mustahkamlash yili" deb nom berdi. Dar haqiqat inson salomatligi, ayniqsa harbiy xizmatchilarning sog'lom bo'lishi juda muxim va shartdir.

Hozirgi vaqtda birgina Toshkent shaxrining o'zida yiliga o'rtacha 38 tonna yog' ishlatilar ekan, bu degani esa xar-bir fuqaro uchun yiliga kamida 15 litrdan yog' mahsuloti to'g'ri keladi. Halqning 60% (foizi) kungaboqar yog'idan foydalanadi, 35% paxta yog'idan va atigi 5% qolgan boshqa yog'larni tanlashadi. Ularga zaytun, zig'ir, bodom va boshqalar kiradi. Shu sababdan o'rganishlar natijasida harbiy xizmatchilar orasida uchraydigan turli-hildagi kasalliklarning asosiy sababchilarini kundalik foydalanadigan yog'larimiz tarkibidagi zararli elementlarda ekanligi aniqlandi [5-8].

Tahlil va natijalar. Yuqoridagilardan kelib chiqib universal quruq mevalarni chaqish qurilmasi ish prinsipini nazariy jihatdan asoslash maqsadida dinamik qatorini shakllantirish zarur. Tadqiqotimiz nazariyasini asoslashda quruq mevalarni "danak" deb yuritimiz. Universal quruq mevalarni chaqish qurilmasidagi burchak ostida o'rnatilgan danak uzatish novi, danak meyorlagich uyachasining ma'qul parametrlari saralangan danaklarning kengligiga bog'liq. 1- rasmga ko'ra danaklar ikkita o'lchamga - "a" va "b" larga ega.



1- rasm. Quruq mevalarning asosiy parametrlari ta'sir etuvchi kuchlar: danak "a" tomoni bilan uzatilgan holat; danak "b" tomoni bilan uzatilgan holat; m_1 , m_2 danak po'stlog' va mag'izning og'irlik markazlari Δ mag'iz bilan danak orasidagi x miqdori. G_1 , G_2 - po'stlog' va mag'iz oralig'i.

Tadqiqotlarimizning ko'rsatishicha, chaqish jarayonini amalga oshirishda qurilma tarkibidagi naucha va meyorlagich uyachalariga meva danaklarini 1- rasmda ko'rsatilgan holatda uzatilishi maqsadga muvofiq. Yana bir muhim talablardan biri qurilma bunkeri bilan meyorlagich oralig'idagi masofa b o'lchamiga mos ravishda ishlangan (1- jadval).

Mevalardan ajratib olinadigan danaklarning dinamik qatoriga matematik-statistik ishlov berish natijalari chaqiladigan danak kengligiga tegishli dinamik qatorni aniqlash quyidagicha amalga oshirildi:

1- jadval

Danakning kengligiga tegishli dinamik qator

1,6+	1,6+	1,9-
1,7	1,6+	1,9-
1,7	1,8-	4,3-
1,7	1,5	4,7+
1,6+	1,6+	1,5=
1,4-	1,6+	1,7+
1,6+	1,5=	1,8-
1,7	1,7=	1,7
1,6+	1,7=	1,6+
1,5=	1,6+	1,5=

Yaratilgan universal chaqish qurilmasining maqbul konstruktiv parametrlarini aniqlashda chaqilayotgan danaklarning kengligini tadqiq qilishga to'g'ri keldi [9-11]. Quyidagi 1- jadvalda danakning kengligiga tegishli dinamik qator taqdim etilgan (1- rasm). Ularning o'lchami mikrometr yordamida aniqlandi. ($N=301$ sm):

Dinamik qatorning son ko'rsatgichlarini va taqsimot qonunini tanlash:

1. Ehtimollar nazaryasiga asoslangan holda to'plangan dinamik qatorning tarqalish chegarasini (2-jadval) aniqlaymiz:

$$K_1 = X_{\max} - X_{\min} = 1,9 - 1,3 = 0,6 \text{ mm}$$

bu yerda, $X_{\max}$, $X_{\min}$ – dinamik qatordagi danak kengligining eng katta va kichik o'lchamlari, mm.

2-jadval

To'plangan dinamik qator uchun x_i , m_i , P_{taj} qiymatlarini aniqlash

τ/p	Intervallar oralig'i	Interval o'rtasi, X_i	Intervallarga tushishlar soni, m_i	Intervallar ehtimolligi P_{taj}
1.	1,3 – 1,41	1,355	2	0,0666
2.	1,41 – 1,52	1,465	4	0,133
3.	1,52 – 1,63	1,575	12	0,400
4.	1,63 – 1,74	1,685	8	0,2666
5.	1,74 – 1,85	1,795	2	0,0666
6.	1,85 – 1,95	1,905	2	0,0666
Jami:			30	0,997 $\approx$ 1,0

2. Intervallar sonini hisoblaymiz:

$$K = \sqrt{N} = 5,47.$$

bu yerda N – dinamik qatordagi o'lchash natijalari soni [12, 13].

3. Interval kengligini topamiz:

$$\eta = \frac{K_1}{K} = \frac{0,16}{5,47} = 0,11mm.$$

4. Statistik axborotlarni quyidagi son ko'rsatgichlarida aniqlaymiz:

- o'rtacha arifmetik qiymati

$$\bar{X} = \frac{x_1 m_1 + x_2 m_2 + \dots + x_i m_i}{m_1 + m_2 + \dots + m_i} = \frac{1,35 \cdot 2 + 1,465 + 1,575 \cdot 12 + 1,685 \cdot 8 + 1,795 \cdot 2 + 1,905 \cdot 2}{2 + 4 + 12 + 8 + 2 + 2} = \frac{48,34}{30} = 1,61sm \text{ o'rtacha kvadratik og'ishni aniqlaymiz:}$$

$$b = \frac{\sqrt{(x_1 - \bar{x})^2 m_1 + (x_2 - \bar{x})^2 m_2 + \dots + (x_i - \bar{x})^2 m_i}}{30 - 1} = \frac{\sqrt{(1,35 - 1,6)^2 \cdot 2 + (1,465 - 1,6)^2 \cdot 4 + (1,575 - 1,6)^2 \cdot 12 + (1,685 - 1,6)^2 \cdot 8 + (1,745 - 1,6)^2 \cdot 2}}{29} = \frac{\sqrt{(1,905 - 1,6)^2 \cdot 2}}{29} = \frac{\sqrt{0,2525}}{29} = \sqrt{0,018112068} = 0,0046.$$

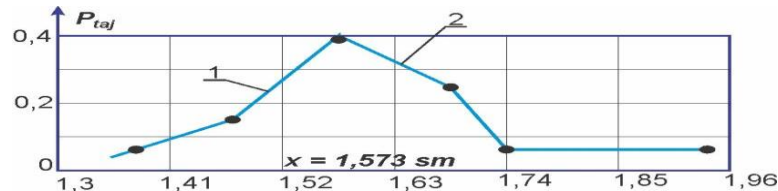
5. Variatsiya koeffitsiyentini hisoblaymiz:

$$V = \frac{\delta}{\bar{x}} = \frac{0,0046}{1,61} = 0,00288 \approx 0,003.$$

Variatsiya koeffitsiyenti qiymati kamligi bois to'plangan dinamik qator Gauss taqsimot qonuniga tobora intilib borish tendensiyasiga ega degan xulosaga kelishimiz mumkin bo'ladi. Bu dinamik qator (2-rasm) uchun differensial funksiya egri chizig'ini quyidagi formula orqali aniqlashni tavsiya etamiz:

$$(x_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x_i - \bar{x})^2}{2\delta^2}} = 0,37e^{-\frac{(x_i - \bar{x})^2}{2\delta^2}}.$$

бу $\pi = 3,14; e2,718 \approx 2,72$ га тенг.



2- rasm. Dinamik qator diagrammasi:

1 - gistogramma; 2 – pomigon.

Demak, nazariy taqsimot egri chizig'ini esa quyidagi formula bilan aniqlaymiz, ya'ni:

$$P(x_i)_h = \frac{\eta}{\delta} f(x_i) = \frac{0,11}{0,0046} f(x_i) = 23,913 f(x_i).$$

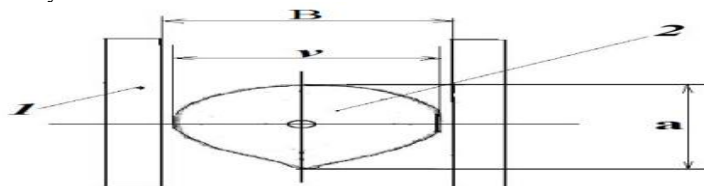
Nazariy tushunchalar ehtimolligi:

$$m_i^h = P(x_i)_h \cdot N.$$

Demak, matematik statistik ishlov berish natijalariga asoslangan holda danaklarni meyorlash tomonga o'rnatilgan noucha kengligi:

$$V = \frac{\bar{x}}{4} = \frac{1,61}{4} = 0,4sm = 4mm.$$

oralig'ida olishni tavsiya etamiz.



3- rasm. Danak uzatish nauchasining kengligini aniqlash sxemasi:

1- naucha; 2- danak.

Danak 2 bilan naucha 1 oralig'ida (3- rasm) hosil qilingan $\Delta = V - v$ ga teng tirqish, danak meyorlagich uyasi ichkarisiga danakning ishonchli joylashishini, danaklarni mevalardan ajratib oluvchi kallaklarda esa yon tomondagi darchasidan danaklarning tashqariga ajratilib tashlanishi ta'minlanadi [14].

Xulosa va takliflar. Quruq mevalarni chaqish va o'simlik moyini olish jarayoni nazariyasini asoslagan holda, Qurolli Kuchlar va xalq xo'jaligida yuqori samara bilan ishlash imkonini beruvchi universal qurilma ishlab chiqish zaruriyati isbotlab berildi. Bu orqali esa Mudofaa sanoatiga ko'p vaqt va ishchi kuchi uchun ortiqcha sarf harajat qilmasdan yosh harbiy kadrlarimiz ratsioniga quruq mevalarni hamda o'simlik moyi mahsulotlarini yetkazib berishda ilmiy jihatdan asoslangan zamonaviy qurilma ishlab chiqishdek mas'uliyatli vazifa bajarildi deb aytalimiz.

ADABIYOTLAR

1. Хуррамов, А.И., Туркменов, Х.У., Эргашев, Ж.Н. Устройство для раскалывания скорлупы косточек плодов и извлечения ядер. // "Молодой учёный". Международный научный журнал. М.: 2018. -Част 1., С. 48-51.
2. Mardonov, A.I. Takomillashtirilgan chaqish qurilmasining kinematik va dinamik parametrlari // Agro ilm. – T., 2015.- 4 [36]-son. – B. 91-93.

3. Xurramov, A.I. Meva danagi va yong'oqlarni mag'zini ajratish uchun chaqish qurilmasining parametrlari // O'zbekiston agrar fani xabarnomasi. – T., 2017. -2 (68)-son. – B. 104-109.
4. Xurramov, A.I. Meva danaklarini chaqish va mag'zini ajratish qurilmasi mexanizmining sintezini shakllantirish // O'zbekiston agrar fani xabarnomasi. – T., 2018. -2 (72)-son. –B. 84-89.
5. Xurramov, A.I. Mevali daraxt danaklarini va yong'oqlarni chaqish qurilmasining asosiy konstruktiv parametrlari va ish rejimini asoslash // O'zbekiston agrar fani xabarnomasi, – T., 2015.- 1 (59)-son. –B. 99-104.
6. Xurramov, A.I. Moddiy ta'minot bo'linmalari uchun meva danaklarini chaqish va mag'zini ajratish qurilmasi texnologiyasini ishlab chiqish. // Yong'in-portlash xavfsizligi. –T., 2020. -2 (5)-son. – B. 125-132.
7. Xurramov, A.I. Mudofaa sanoati tizimlari uchun ishlab chiqilgan danak chaqish qurilmasining yuklash bunkeri hajmi hisobi // Zirhli qalqon Ilmiy–axborot jurnali. Chirchiq, 2021. -1(4)-son / HDFU. – B. 146-148.
8. Xurramov, A.I. Mudofaa sanoati tizimida qo'shinlarni quruq oziq-ovqat mahsulotlari bilan ta'minlashni takomillashtirishning ahamiyati // Zirhli qalqon Ilmiy–axborot jurnali. Chirchiq, 2021. -4 M (6)-son.– B.31-35.
9. Xurramov, A.I. Meva danaklarini chaqish va mag'zini ajratish qurilmasining ish jarayonini asoslash //Agro ilm.- T.,2018.- 2(52)-son.- B.108-109.
10. Khurramov A.I., Justification of the process of operation of the device for splitting and extracting kernels from fruit seeds for material support units // International Journal of Advanced Research in Science, Engineering and Technology. – India, 2021. - Vol. 8, Issue 3, pp. 16825-16827.
11. Xurramov A.I. Mudofaa sanoati tizimida qo'shinlarni quruq oziq-ovqat mahsulotlari bilan ta'minlashni takomillashtirish texnologiyasini ishlab chiqish. // Academic research in educational sciences volume. Issn: 2181-1385. Scientific journal impact factor (sjif) 2021: 5.7232. issue 4 –Pp. - 484-491.
12. Khurramov A.I. Technology for Enriching the Daily Food Ration of Military Personnel with Oil from Kernels // International Journal of Advanced Research in Science, Engineering and Technology. – India, 2021. - Vol. 8, Issue 10, pp. 18320-18323.
13. Xurramov A.I. Quruq mevalarni qayta ishlash universal qurilmasining tishli vallari parametrlarini asoslash // O'zbekiston qishloq va suv xo'jaligi- T., 2022. -12 son.- B. 39-40.
14. Хуррамов А.И. Обоснование параметров зубчатых валов универсального устройства обработки сухофруктов // Universum: технические науки. – М., 2022. – Вып. 12 (105), ч. 1. – С. 117–122.



УДК:159.9(575.1)

Дилшод БЕКОВ,

базовый докторант (PhD) Национальный университет Узбекистана

Талъат АХУНОВ,

доктор ф.м.н., зав. кафедрой ААФК Национальный университет Узбекистана

Отабек БУРХОНОВ,

заведующий отделом Астрономический институт АН РУз

Нигина АЛИМОВА,

базовый докторант (PhD) Национальный университет Узбекистана

E-mail: talat77@rambler.ru,

профессор, ф.м.н. К.Т. Миртаджиева на основе обзора

КРИВЫЕ БЛЕСКА ЛИНЗИРОВАННЫХ КОМПОНЕНТОВ ГЛК SDSS J0806+2006 И ОЦЕНКА ВРЕМЕНИ ЗАДЕРЖКИ

Аннотация

В работе представлены результаты фотометрического анализа изображений двойного гравитационно линзированного квазара SDSS J0806+2006, наблюдавшегося в Майданакской обсерватории в период 2017-2021 г.г. Кривые блеска показали, что яркость источника-квазара в данный период имеет заметную, и возможно периодическую, переменность. Вычислено вероятное значение времени задержки $\Delta t_{AB} = -17.0 \pm 2.5$ дней, лидирующим является более яркий компонент А. Эта величина согласуется с ранее предсказанными теоретическими значениями для этой системы.

Ключевые слова: Гравитационно линзированный квазар, SDSS J0806+2006, время задержки.

LIGHT CURVES OF THE LENSED IMAGES OF GLQ SDSS J0806+2006 AND TIME DELAY ESTIMATION

Abstract

The paper presents the results of photometric analysis of images of the double gravitationally lensed quasar SDSS J0806+2006, observed at the Maidanak Observatory in the period 2017-2021. The light curves showed that the brightness of the source-quasar in this period has a noticeable, and possibly periodic, variability. The probable value of the delay time $\Delta t_{AB} = -17.0 \pm 2.5$ days is calculated, the brighter component A is the leading one. This value is consistent with previously predicted theoretical values for this system.

Key words: Gravitational lensed quasar, SDSS J0806+2006, time delay

SDSS J0806+2006 ГЛК ЛИНЗЛАНГАН ТАСВИРЛАРИНИНГ РАВШАНЛИК ЭГРИ ЧИЗИҚЛАРИ ВА КЕЧИШ ВАҚТИНИ ҲИСОБЛАШ

Аннотация

Ушбу мақолада 2017-2021 йилларда Майданак расадхонасида кузатилган SDSS J0806+2006 қаррали гравитацион линзаланган квазар тасвирларининг фотометрик таҳлили натижалари келтирилган. Равшанлик эгри чизиқлари маълум бир даврда квазар манбаъсининг ёрқинлиги сезиларли ва эҳтимол даврий ўзгариувчанликка эга эканлигини кўрсатди. Кечикиш вақтининг эҳтимолий қиймати $\Delta t_{AB} = -17.0 \pm 2.5$ кун эканлиги ҳисоблаб чиқилди, нисбатан ёрқинроқ А компоненти етакчи эканлиги маълум. Бу қиймат ушбу тизим учун олдиндан тахмин қилинган назарий қийматларга мос келади.

Калит сўзлар: Гравитацион линзаланган квазар, SDSS J0806+2006, кечикиш вақти

Введение. Явление гравитационного линзирования выявляет очень интересные и необычные свойства материи во Вселенной, например, из-за него формируются кратные изображения фоновых источников, выступая в качестве природного телескопа, разрешает далекие, очень слабые аспекты объектов в космологических масштабах. Особое место занимают гравитационно линзированные квазары (ГЛК), которые позволяют решать ряд актуальных вопросов современной космологии, таких как, проблема темной материи и энергии, определение массы космологических объектов, строение Вселенной, величина постоянной Хаббла, структура источников-квазаров и др. (см., например, [1,2]).

Так, с помощью гравитационного линзирования была обнаружена часть темной материи в виде звезд малой массы в нашей Галактике [3,4], обнаружена одна из самых маленьких известных внесолнечных планет [5], обнаружены массивные крупномасштабные структуры во Вселенной [6], найдено эмпирическое доказательство существования темной материи [7]. Эффект увеличения блеска позволил обнаружить некоторых из самых отдаленных галактик [8].

Постоянная Хаббла H_0 – еще одно важное приложение гравитационного линзирования. Неопределенность в его определении все еще достигает 10% [9]. Более того, между величинами H_0 , найденными на объектах с разными расстояниями найдены чувствительная разница. С этой точки зрения задача измерения этой величины на примере ГЛК с разными красными смещениями стала одной из актуальных направлений в наблюдательной астрофизике [10-12]. Поэтому в последние несколько лет число новых открытых ГЛК резко возрос, чему способствовали многочисленные исследовательские проекты SDSS, GAIA, GRAL [см. напр. 13-16]. Отсюда становится актуальной задача продолжительных мониторинговых наблюдений избранных ГЛК, выявления фотометрической переменности их линзированных компонентов и независимых измерений времени задержки.

В этой статье мы представляем результаты 5-летнего оптического мониторинга двойного ГЛК SDSS J0806+2006 в Майданакской обсерватории – кривые блеска двух линзированных компонентов и значение времени задержки.

Предварительные данные ГЛК SDSS J0806+2006. ГЛК SDSS J0806+2006 (рис.1,2) был открыт относительно недавно, в 2006 году, о чем сообщалось в работе Inada et al. [17]. В этой статье, на основе анализа базы данных цифрового обзора неба SDSS, были открыты два новых двойных ГЛК. Прямое восхождение исследуемого объекта равно $\alpha=121^{\circ}.59875$, а склонение $\delta=+20^{\circ}.108861$. Красное смещение источника-квазара в системе оказался равным $z_q=1.54$, угловое же расстояние между двумя линзированными компонентами $\theta=1.4''$ угловые секунды. В момент открытия их видимый блеск в R фильтре составлял $m_A=18^m.93$ и $m_B=19^m.36$. Между мнимыми компонентами находится линзирующая галактика, видимый блеск которой составляет $m_G=21^m.20$. Из-за этого ее поток не дает заметного вклада в измерение звездных величин компонентов и ее влиянием можно пренебречь, как было ранее в случаях других двойных ГЛК [см. напр. 18,19].

Спектроскопия и наблюдения в оптическом и ближнем инфракрасном диапазонах показали, что изображения квазаров имеют идентичное красное смещение и протяженный объект между ними, которые, вероятно, является линзирующей галактикой $z_l=0.6$. Поле неба вокруг SDSS J0806+2006 содержит несколько близких галактик, которые могут существенно возмущать систему. Простые модели распределения массы с разумными параметрами воспроизвели положения квазаров и потоки в системе.

Были также проведены модельные расчеты на основе сингулярного изотермического эллипсоида (SIE). Так, получилось, что радиус кольца Эйнштейна $b=0.69''$, позиционный угол $PA=28^{\circ}$, отношение осей $q=0.08$, усиление блеска $\mu=4.62$. Более того, они нашли модельное значение времени задержки равное $\Delta t_{AB} \sim 32 h^{-1}$ дням.

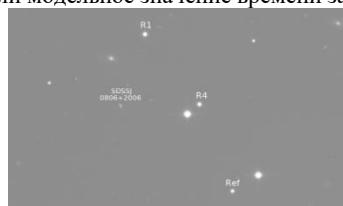


Рисунок 1. ГЛК SDSS J0806+2006 с окружающими опорными звездами в R фильтре на телескопе АЗТ-22. Ref – опорная звезда, Размер поля 3.45×1.73 угловых минут.

В следующий раз внимание на этот объект обратили в работе [20]. Оптический спектр показал, что на непрерывном участке отношение потоков $A/B = 1.3$, а в линиях ионизированного магния $A/B = 2.2$. Также, основываясь на инфракрасных данных телескопа VLT, на фоне той же модели SIE, была получена теоретическая величина времени задержки $\Delta t_{AB} \sim 50$ дням.

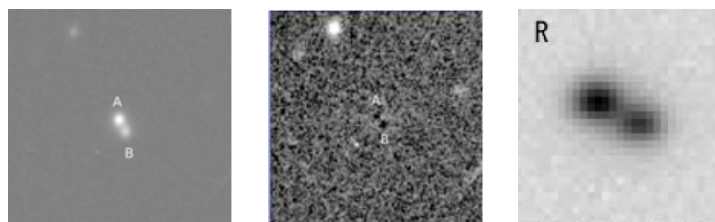


Рисунок 2. Крупномасштабные изображения SDSS J0806+2006, полученный на телескопе АЗТ-22 Майданакской обсерватории (слева). Здесь же показан результат вычитания моделью распределения блеска от наблюдаемого (по середине). Для сравнения качества изображений показаны также данные с 2.2-м телескопа UN88 (справа) [17]. На изображениях хорошо видны компоненты A и B. Линзирующая галактика слабая и не проявляется на наших изображениях.

Как видно, этот объект требует проведения длительных непрерывных наблюдений и подтверждения предыдущих результатов определения времени задержки. В этой работе мы представим наши оптические кривые блеска линзированных компонентов ГЛК SDSSJ0806+2006 на основе майданакских наблюдательных данных и величину времени задержки. Отсюда видно, что длительные оптические наблюдения этой ГЛК, определение наличия микролинзирования и измерение времени задержки является довольно интересной проблемой.

Кривые блеска линзированных изображений ГЛК SDSSJ0806+2006. Наблюдения этого квазара велись в Майданакской обсерватории, отвечающей всем требованиям для продолжительного мониторинга подобных объектов [21,22]. Для наблюдения этого объекта выбирались ночи с благоприятными астроклиматическими условиями. Но если учесть, что объект виден в период с сентября по март, то число данных наблюдений, пригодных для фотометрических измерений и дальнейшего анализа будет существенно меньше, чем у других объектов. При наблюдениях мы использовали телескоп АЗТ-22 с камерой SNUCAM 4Kx4K, оснащенный набором оптических фильтров системы Джонсона-Кузина. За последние годы (2017-2021 г.г.) нам удалось собрать достаточное количество наблюдательного материала для фотометрического исследования этой системы. В итоге мы получили 120 наблюдательных точек в R фильтре.

Измерения видимого блеска линзированных компонентов полностью проводились в среде комплекса программ IRAF. Хотя между ними располагается протяженная линзирующая галактика, из-за слабости ее потока этот вклад не существенный и мы ее отдельно не учитывали.

В первую очередь мы получили кривую блеска системы в целом (рис. 3). На графике показана также относительная кривая блеска референтной звезды, что примерно на $\sim 3.30^m$ ярче нашего объекта, так как данные по квазару здесь смещены вверх на 0.25^m . Однако блеск самого квазара меняется незначительно, попеременно относительно сезонов с амплитудой $\sim 0.10^m$. Большой разброс измерений объясняется относительной слабостью

системы. Явных признаков микролинзирования здесь не видно. Однако это положение позволит нам вычислить наиболее вероятное значение времени задержки. Поэтому нам необходимо получить графики изменения блеска отдельных компонентов.

Для этого необходимо было выбрать способ описания функции распределения блеска между искомыми компонентами. В пакете программ IRAF предусмотрены несколько возможностей, например функция Гаусса, функция Моффата с показателем степени 1.5 или 2.5, Лоренца и др. Соответствующие параметры рассчитываются на основе звезд отмеченной как PSF (рис.1). Детали фотометрической обработки изображений в тесных полях можно найти в работах [19,23].

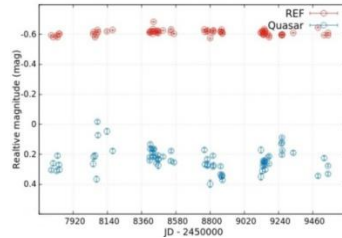


Рисунок 3. Относительные кривые блеска квазара SDSSJ0806+2006 в целом и опорной звезды в период 2017-2021 г.г. в R-полосе.

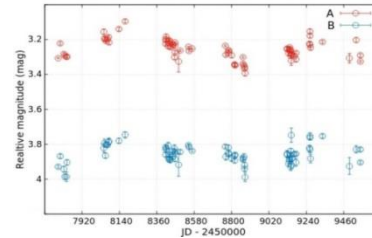


Рисунок 4. Кривая блеска линзированных компонентов A и B ГЛК SDSSJ0806+2006 в R-полосе.

Так, применив фотометрический метод подгонки функции рассеяния точки (ФРТ) к майданакским изображениям ГЛК SDSSJ0806+2006, мы получили кривые блеска A и B компонентов (рис. 4). Поведение блеска компонентов не отличается от изменений блеска системы в целом - в течение 2017-2021 г.г. изменения блеска компонентов более явны, а амплитуда составляет $\sim 0.25^m$. На что еще надо обратить внимание – то, что компоненты меняют свой блеск почти синхронно друг к другу. А это указывает на то, что время задержки в этой системе должен быть относительно небольшим (см. также работы [17,20]) и влияние микролинзирования практически отсутствует. Теперь попробуем вычислить время задержки.

Вычисление времени задержки. Взяв за основу полученные нами кривые блеска линзированных компонентов SDSSJ0806+2006 мы измерили время задержки между изменениями их видимого блеска. При этом мы должны определиться с тем, 1) каким из методов мы воспользуемся для вычисления времени задержки, и 2) как мы будем интерполировать кривые блеска для определения блеска компонентов, в те даты, не было наблюдений?

Для вычисления времени задержки в ГЛК были разработаны многочисленные методы, например стандартную минимизация χ^2 , формулы Пельта, периодические функции [19,24,25] и др. Причем для определения отсутствующих наблюдений применяется формула линейной интерполяции с окном до 25-30 дней. В этих методах одна из компонент «сдвигается» с некоторым шагом по оси времени и звездных величин, и на каждом шаге вычисляется коэффициент корреляции, дисперсии и т.п. Тот сдвиг, что соответствует минимальному значению этого коэффициента и принимается за наиболее вероятное значение времени задержки и разницы звездных величин между компонентами.

В зависимости от частоты наблюдательных данных и влияния микролинзирования рассматривают отдельные сезоны и выбирают те значения, что соответствуют критерию самосогласованности [26]. В нашем же случае мы имеем примерно по 15-20 наблюдений в сезон (с октября по март), практическое отсутствие микролинзирования и равномерное изменение блеска компонентов. С учетом этого мы решили применить несколько иной подход – сдвигает звездные величины компоненты B по оси времени и видимого блеска, образуем объединенную кривую блеска, получаем сглаженную кривую блеска путем интерполяции обычным полиномом. Соответствие между данными наблюдений и сглаженной кривой вычисляем с помощью известной формулы

$$\chi^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{(m_{A,B,obs,i} - m_{A,B,calc,i})^2}{\sigma_{A,B,i}^2}, \quad (1)$$

где N - число данных наблюдений, $\sigma_{A,B}^2$ - среднеквадратичные ошибки измерений звездных величин компонентов A и B, $m_{A,B,obs,i}$ - наблюдаемый блеск соответствующих компонентов, $m_{A,B,calc,i}$ - интерполированная последовательность этих величин. Причем

$$m_{A,B,calc}(t) = \sum_{i=0}^K a_i t^i \quad (2)$$

При вычислении мы отбросили точки в самом начале и конце наблюдений, где очень мало точек. Первый день наблюдений мы нормировали так, что $t = 270$, что соответствует $JD = 2458048$. Искомые параметры здесь время задержки Δt , разница звездных величин между компонентами Δm , многочлены a_i . Коэффициенты полиномиального ряда a_i вычислялись с помощью хорошо известного метода Левенберга-Марквардта [27]. Те параметры, что соответствующим наименьшему значению χ^2 приравниваются к искомым величинам. Число многочленов в (2) мы определили $K = 6$. В итоге у нас 9 неизвестных величин. Для выяснения величины их неопределенностей мы, методом Монте-Карло, сгенерировали 5000 искусственных кривых блеска для обоих линзированных компонентов и применили к ним вышеописанную процедуру. Результаты этих вычислений представлены ниже.

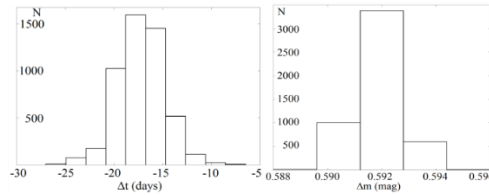


Рисунок 5. Распределения вероятных значений времени задержки (верхняя гистограмма) и разницы звездных величин (нижняя гистограмма) на основе искусственных кривых блеска, сгенерированных методом Монте-Карло.

Распределение значений времени задержки показаны на рис. 5. На рис. 5а показано, что наиболее вероятное значение времени задержки между двумя компонентами равно $\Delta t = -17.0 \pm 2.50$ дням (А компонента лидирующая), а разница звездных величин между ними $\Delta m = 0.592^m \pm 0.0011^m$ с 68 % достоверностью.

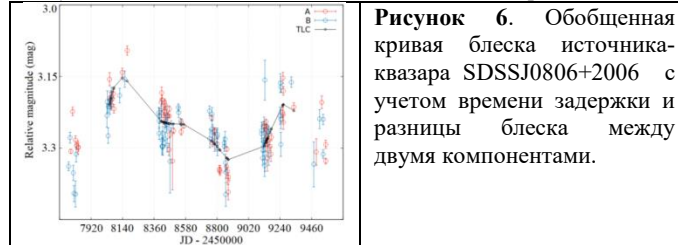


Рисунок 6. Обобщенная кривая блеска источника-квазара SDSSJ0806+2006 с учетом времени задержки и разницы блеска между двумя компонентами.

На рис. 6 показана обобщенная кривая блеска источника в ГЛК SDSSJ0806+2006. Видно, что система с 2017 года претерпевает периодические изменения. Этот период приблизительно равен 3 годам, если обратить внимание на два последовательных увеличения блеска примерно в JD = 8140 и JD = 9240. В течение всех наблюдательных сезонов разница звездных величин между компонентами А и В не меняется, что позволяет нам утверждать об отсутствии в этой системе влияния микролинзирования. Этим аспектом данный объект напоминает характеристики другого двойного ГЛК UM673 [19,28], где в течение более 10 лет не было зарегистрировано ни одного события микролинзирования. Поэтому и SDSSJ0806+2006 и UM673 удобны при моделировании системы для вычисления постоянной Хаббла, либо определения красного смещения линзирующей галактики.

Заключение. Итак, в работе представлены результаты фотометрического исследования двойного ГЛК SDSSJ0806+2006, которое наблюдалось в Майданакской обсерватории в 2017-2021 г.г. Представлены кривые блеска системы в целом, так и его отдельных компонентов. Амплитуда изменения блеска оказалась достаточно заметный $\sim 0.10^m$ звездных величин для системы в целом, а у обоих компонентов до $\sim 0.25^m$. Анализ кривых блеска и расчет времени задержки показал, что система не подвержена влиянию микролинзирования.

Также нами вычислено вероятное значение времени задержки, равное $\Delta t_{AB} = -17.0 \pm 2.5$ дней, причем лидирующим является компонент А. Эта величина согласуется с ранее найденными теоретическими предсказаниями времени задержки [17,20], где предполагалось, что оно должно быть не более 50 дней.

Исходя из этого мы считаем, что этот объект удобно использовать при моделировании двойных гравитационно линзированных систем с целью вычисления постоянной Хаббла, красного смещения источника и т.п.

Благодарности. Авторы выражают свою глубокую признательность руководству и сотрудникам АИ АН РУз за организацию многолетних наблюдений в Майданакской обсерватории, что позволило получить значимые результаты данной статьи. Работа выполнена в рамках гранта FZ-20200929344.

ЛИТЕРАТУРА

1. Eigenbrod A. "Gravitational lensing of quasars". T&F Group, 2011. – 152 p.
2. Dodelson S. "Gravitational lensing". Cambridge University Press, 2017. – 466 p.
3. Alcock C., Akerloff C. W, Allsman R.A., et al., Nature, 365, 621 (1993).
4. Aubourg E., Baryre P., Brehin S., et al., Nature, 365, 623 (1993).
5. P.- Beaulieu J.u, D.P. Bennett, P. Fouque, et al., Nature, 439, 437 (2006).
6. L.Van Waerbeke, Y. Mellier, T. Erben, et al., A&A, 358, 30 (2000).
7. D.Clowe, M. Bradac, A.H. Gonzalez, et al., ApJ, 648, L109 (2006).
8. J.-P. Kneib, R.S. Ellis, M.R. Santos & J. Richard, ApJ, 607, 697 (2004).
9. W.L. Freedman, B.F. Madore, B.K. Gibson, et al., ApJ, 553, 47 (2001).
10. L. Verde, T. Treu, A.G. Riess, Nature Astronomy, 3, 891 (2019).
11. K.S. Rathna, M. Tewes, C.S.Stalin, et al., A&A, 557, id.A44, 7 pp. (2013).
12. E. Eulaers, M. Tewes, P. Magain, et al. A&A, 553, id.A121, 9 pp. (2013).
13. C. A.Lemon, M.W.Auger, et al., MNRAS, 479, 5060–5074 (2018).
14. C. A.Lemon, et al., MNRAS, 483, Issue 3, p.4242-4258 (2019).
15. D. Stern, S.G. Djorgovski, A. Krone-Martins, et al., ApJ, 921:42, 16 pp (2021).
16. J.H.H. Chan, C.Lemon, F. Courbin, et al., A&A, 659, A 140 (2022)
17. N. Inada, M. Oguri, R.H. Becker, et al., AJ, 131, 1934–1941 (2006)
18. E.R. Gaynullina, R.W. Schmidt, al., A&A, 440, pp.53-58 (2005).
19. Ахунов Т.А., Нуриддинов С.Н., и др., УФЖ, 9, 5-6, p. 291-301 (2007).
20. D. Sluse, F. Courbin, et al., A&A, 492, L39-L42 (2008).
21. Ehgamberdiev Sh., Bayjumanov A., et al., A&A S.S., 145, p. 293 (2000).
22. Ehgamberdiev Sh., Nature Astronomy, 2, 349-351 (2018).

-
23. Асфандияров И.М., и др., УФЖ, 22, № 6, p. 325-333 (2020).
 24. R. Gil-Merino, L. Wisotzki, J. Wambsganss, A&A, 381, 428 (2002).
 25. J. Pelt, R. Kayser, S. Refsdal, T. Schramm, A&A 305, 97 (1996).
 26. Akhunov T.A., Wertz O., Elyiv A., et al., MNRAS, 465, 3607-3621 (2017).
 27. W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, in: Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing, Cambridge Univ. Press 1992.
 28. Koptelova E., Chen W.P., Chiueh T., et al., A&A, 544, id.A51, 11 pp. (2012).



UDK: 53.03, 53.04, 544, 227, 544.228

Tursunpo'lat JO'RABOYEV,

O'zR FA, Ion-Plazma va Lazer Texnologiyalari Instituti, kichik ilmiy xodimi

E-mail: tursunpulatjuraboev24@gmail.com

Eldorbek BAKIROV,

O'zR FA, Ion-Plazma va Lazer Texnologiyalari Instituti, stajyor tadqiqotchi

E-mail: eldorbekbakirov4ionplazma@gmail.ru

O'tkir O'LJAYEV,

O'zR FA, Ion-Plazma va Lazer Texnologiyalari Instituti, PhD talabasi

uub242526@gmail.com

Umedjon XALILOV,

O'zR FA, Ion-Plazma va Lazer Texnologiyalari Instituti, bosh ilmiy xodim

Belgiya, Antwerpen Universiteti, Plasmant tadqiqot guruhi

E-mail: umedjon.khalilov@uantwerpen.be

O'zR FA, Geologiya fanlari universiteti, Aniq va tabiiy fanlar kafedrasida dotsenti, f.-m.f.d. X.Raximov taqrizi asosida

ГРАФЕН СИНТЕЗИ UCHUN YUQORI INDEKSLI (331) NIKEL TAGLIGI

Аннотация

Электрон ва механик xususiyatlari hamda yuqori kimyoviy barqarorligi sababli grafenni turli xil usullar bilan o'stirish bo'yicha taqqidqotlar olib borilmoqda. Bular orasida CVD eng samarali usullardan biri bo'lsada, grafen o'stirishda asosiy muammolardan biri metall katalizator sirtini to'g'ri tanlash. Shu sababli, ushbu tadqiqot ishida, yuqori Ni(331) va past Ni(111) indeksli sirtlarda grafen o'sish ehtimoli solishtirilgan holda molekulyar dinamika (MD) usuli orqali baholandi. Grafenli g-Ni(331) sirtining sirt energiyasi grafen o'stirishda eng samarali hisoblanadigan g-Ni(111) sirtidan ham (0.5 J/m^2) pastroq bo'lishi aniqlandi. Bu esa, yuqori indeksli Ni(331) sirtlarda ham past indeksli Ni(111) sirtlardagi kabi grafen o'stirish mumkinligi, ular yordamida nanoqurilmalar (nanotransistor, batareykalar, suv filtrlari, kondensatorlar va h.k) hosil qilish bo'yicha eksperimentatorlarga tavsiyalar berish mumkin.

Kalit so'zlar: Ni sirlari, kimyoviy bug'ni cho'ktirish (CVD) grafen, Molekulyar Dinamika, sirt energiyasi.

ВЫСОКОИНДЕКСНАЯ (331) НИКЕЛЕВАЯ ПОДЛОЖКА ДЛЯ СИНТЕЗА ГРАФЕНА

Аннотация

Благодаря его электронным и механическим свойствам, а также высокой химической стабильности ведутся исследования по выращиванию графена различными методами. Среди них CVD является одним из наиболее эффективных методов, но одной из основных проблем при выращивании графена является правильный выбор поверхности металлического катализатора. Поэтому в данной исследовательской работе вероятность роста графена на поверхностях с высоким индексом Ni(331) и низким индексом Ni(111) оценивалась методом молекулярной динамики (МД). Установлено, что поверхностная энергия поверхности g-Ni(331) с графеном ниже (0.5 Дж/м^2), чем у поверхности g-Ni(111), которая считается наиболее эффективной при выращивании графена. Это означает, что можно выращивать графен на поверхностях Ni(331) с высоким индексом, а также на поверхностях Ni(111) с низким индексом, которые можно использовать для изготовления наноустройств (нанотранзисторов, аккумуляторов, водяных фильтров, конденсаторов и т. д.).

Ключевые слова: поверхность Ni, химическое осаждение из газовой фазы (CVD) графена, молекулярная динамика, поверхностная энергия. HIGH-INDEXX (331)

NICKEL SUBSTRATE FOR GRAPHENE SYNTHESIS

Abstract

Due to its electronic and mechanical properties and high chemical stability, research is being conducted on growing graphene by various methods. Among them, CVD is one of the most effective methods, but one of the main problems in graphene growth is the correct selection of the metal catalyst surface. Therefore, in this research work, the probability of graphene growth on high Ni(331) and low Ni(111) index surfaces was evaluated by molecular dynamics (MD) method. It was found that the surface energy of the g-Ni(331) surface with graphene is lower (0.5 J/m^2) than that of the g-Ni(111) surface, which is considered the most effective in growing graphene. This means that it is possible to grow graphene on high-index Ni(331) surfaces as well as on low-index Ni(111) surfaces, which can be used to make nanodevices (nanotransistor, batteries, water filters, capacitors, etc.).

Keywords: Ni surfaces, chemical vapor deposition (CVD) graphene, Molecular Dynamics, surface energy.

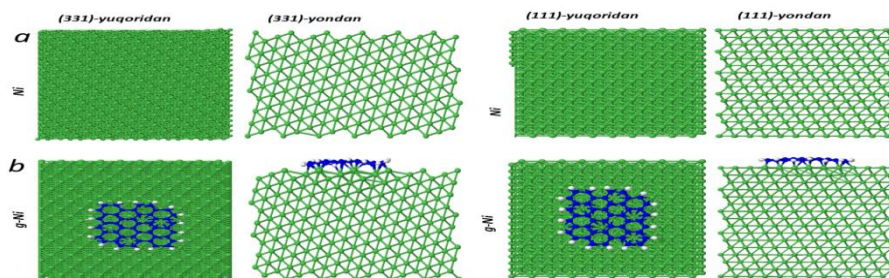
Kirish. Grafen[1] noyob electron[2,3,4] va mexanik [5] xususiyatlarga, hamda yuqori kimyoviy barqarorlikka[6] ega bo'lgan nanomateriallardan biri bo'lib, u so'nggi yillarda ko'plab sohalarda qo'llanilmoqda [7,8]. Xususan, undan elektrokimyo [9,10], energiya saqlash [9, 11, 12], geliotexnika [5, 11, 12], nanoelektronika [5, 9] kabi sohalarda turli xil maqsadlarda foydalanilmoqda. Shu sababli, uning sinteziga bo'lgan talab kuchayib, bu bo'yicha salmoqli tadqiqot ishlari olib borilmoqda [13].

So'nggi yillarda grafen sintezi uchun bir necha usullar, jumladan, mexanik eksfoliatsiya [14], SiC ning parchalanishi [14], impuls lazerli cho'ktirish (Pulsed Laser Deposition - PLD) [14], kimyoviy bug'larni cho'ktirish (Chemical Vapor

Deposition - CVD) [15] usullari qo'llanilib kelinmoqda. Grafenni ushbu sintez usullar yordamida olish bo'yicha nazariy [16], eksperiment [17] va modellashirishga [18] oid izchil tadqiqotlari olib borilayotganiga qaramay, uni o'stirishda foydalaniladigan tagliklarning turi va ularning barqarorligi [18] hamda katalizatorlik xususiyati [19] bo'yicha bilimlarimiz hali yetarli emas. Shu nuqtai nazardan, ushbu usullar ichida PLD va CVD usullari nisbatan samaralirog'i bo'lsada, CVD usulida grafen shakllanishini boshqarish PLD usuliga qaraganda qulayroq hisoblanadi. Xususan, bu usul ko'pgina metallarning, jumladan Fe, Co, Cu, Ag, Au, Ni va h.k., yuqori uglerod eruvchanligi tufayli ularning sirtida grafen qatlamlari sonini boshqarishni osonlashtiradi [18]. CVD usulida turli xil metal sirtlardan (Au [20], Cu [20], Ni [21], Co [22, 23], Fe [24], Pt [25], Pd [26], Ru [27, 28], Rh [29], Ir [27], Cu-Ni [30, 31].) foydalanib grafen o'stirilishi natijasida sirtlarining katalitik faollik tartibi $Ni \approx Rh \approx Co \approx Ru > Pd \approx Pt \approx Ir > Cu > Au$ tartibida ekanligi aniqlangan [10]. Bu sirtlar orasida yaxshiroq katalitik faollikka ega bo'lgan past indeksli Pt(100), Pt(110), Pt(111) va Ni(100), Ni(110), Ni(111) sirtlari grafen o'stirishda foydalanilmoqda. Ayniqsa, bu sirtlar orasida Ni(100), Ni(110) va Ni(111) sirtlari o'tkazuvchan metallar orasida katalitik jihatdan faol va uglerod atomlari bilan yaxshi bog'lana olganligi sababli, grafen o'stirishda keng qo'llaniladigan metallardan biri hisoblanadi [32, 33, 34, 35, 36, 37, 38]. Shunday bo'lsada, CVD usuli yordamida grafen o'stirishda metal katalizator sirtini to'g'ri tanlash orqali sirtida grafen shakllanishini samarali boshqarish hali ham asosiy muammolardan biri bo'lib turibdi. Shuning uchun, so'nggi vaqtlarda, bu (past indeksli) sirtlar bilan bir qatorda kimyoviy reaksiyalarda o'zining yetarli termal va kimyoviy barqarorligini namoyish etganligi tufayli yuqori indeksli sirtlar ham e'tiborni tortib kelmoqda. [19]. Xususan, (210), (331), (411), (630), (722), (730), (755), (830) sirtlardan katalizator sifatida foydalanilayapti. Shunga qaramay, bu sirtlar orqali grafen sintezi yetarlicha o'rganilmaganligi sababli sintez mexanizmlari deyarli aniqlashtirilmadi.

Shu sababli, ushbu tadqiqot ishida, yuqori indeksli Ni(331) sirtining xususiyatlarini past indeksli Ni(111) sirt bilan solishtirilgan holda molekulyar dinamika (MD) usuli orqali baholandi.

Modellashtirish usuli va tafsilotlari. Ushbu tadqiqot ishida jarayonlarni modellashtirish reaktiv molekulyar dinamika (MD) usuliga asoslangan LAMMPS [39] dasturliy to'plami orqali amalga oshirildi. Termodinamik tizimdagi Ni, C va H atomlari o'rtasidagi o'zaro ta'sirni ifodalash uchun ReaxFF potensialining [40] Zou va boshqalar [41] tomonidan ishlab chiqilgan parametrlardan foydalanildi. Tanlangan Ni(111) va Ni(331) sirtli kristallar VESTA 3D dasturi [42] yordamida hosil qilindi (1a-rasm).



1-rasm. (a) Toza (Ni) va (b) ustiga grafen bo'lagi parallel qo'yilgan (g-Ni) nikel sirtlarining yon va yuqori tomondan ko'rinishi. Bu yerda (111) va (331) sirtli Ni kristallarining qavatlari mos ravishda 16 va 26 ga teng.

Modellashtiriluvchi fazo o'lchamlari ushbu (111) va (331) sirtli nikel kristallar uchun mos ravishda $25 \times 25 \times 22$ va $24 \times 32 \times 31$ Å ga teng bo'lib, har ikkala sirt (fazoning x va y yo'nalishi) bo'yicha davriylik shartlari qo'llanilgan. (111) va (331) sirtli Ni kristallarining z yo'nalishi bo'yicha joylashgan har bir qavatli mos ravishda 120 va 60 ta atomdan iborat bo'lib, hisoblashlarda har bir sirt uchun qavatlar soni 1 dan 31 gacha bo'lgan holatlar olingan. Ushbu sirtli kristallardagi har bir qavat orasidagi masofa (z-o'qi bo'yicha) mos ravishda 2.03 va 0.8 Å ga teng. Undan tashqari, hisoblashlarimizda, har ikkala Ni sirtlariga grafen ($C_{48}H_{18}$) bo'lagining parallel qilib joylashtirilgan holatlari ham qo'llanildi (1b-rasm).

Tanlangan model strukturalardagi sirt energiyalarini hisoblash uchun ularning potensial energiyalari keskin tushish va birlashgan gradient usullari orqali minimallashtirildi. Energiyalarni minimalashtirish bosqichidan oldin Nose-Hoover termostatidan foydalanib strukturalar dastlab 1 K/ps tezlik bilan NpT ansamblida 50 K gacha qizdirildi, so'ngra tizim 0.1 K gacha sovitildi. Termodinamik tizimni isitish va sovutish paytida tizimdagi bosim 0 atm da saqlandi. Energiyasi minimallashtirilgan toza Ni kristallarining (ya'ni, Ni(331) va Ni(111)) sirt energiyasi quyidagi formuladan foydalanib hisoblandi [43]:

$$\gamma = \frac{1}{2A} (E_{slab} - \frac{N_{slab}}{N_{bulk}} E_{bulk}) \quad (1)$$

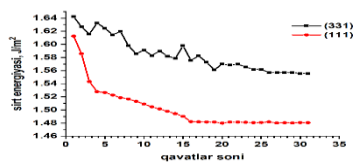
bu yerda, E_{slab} va E_{bulk} – mos ravishda taglik plitka va quymalarning energiyalari, N_{slab} va N_{bulk} – mos ravishda taglik sirti va quymadagi atomlar soni, A – sirt yuzasi.

Undan tashqari, sirtiga grafen ($C_{48}H_{18}$) qo'yilgan Ni kristallari (ya'ni, g-Ni(331) va g-Ni(111)) uchun sirt energiyasi quyidagi formuladan foydalanib hisoblandi (C.A. Becker a Metallurgy Division, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD 20899, USA Published online: 20 Jul 2011):

$$\gamma_g = \frac{1}{A} (E_{slab} - \frac{N_{slab}}{N_{bulk}} E_{bulk}) - \gamma \quad (2)$$

bu yerda, E_{slab} va E_{bulk} – mos ravishda taglik sirt va quymalarning energiyalari, N_{slab} va N_{bulk} – mos ravishda taglik sirti va quymadagi atomlar soni, A – sirt yuzasi.

Natijalar va ularning tahlili. Natijalar shuni ko'rsatdiki, Ni kristalidagi qavatlar sonining (ya'ni, kristaldagi atomlar soni va z o'qi bo'yicha qalinligining) ortishi bilan sirt energiyasi ham kamayadi. Xususan, 2-rasmda Ni(331) va Ni(111) sirtlarining sirt energiyasining qavatlar soniga bog'liqligi keltirilgan.



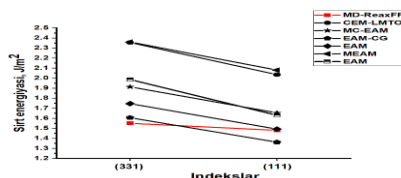
2-rasm. Ni(311) va Ni(111) sirt energiyalarining sirt qalinligiga bog'liqligi.

2-rasmdan ko'rinadiki, birinchi qavatda Ni(311) va Ni(111) sirtlar uchun sirt energiyasi mos ravishda 1.64 J/m^2 va 1.61 J/m^2 ga teng bo'lib, qavatlar soni oshgan sari bu energiya qiymatlari asta-sekin pasayib boradi. Nihoyat, Ni(311) va Ni(111) sirt energiyalari 26 va 16 qavatlardan boshlab, mos ravishda, 1.55 J/m^2 va 1.48 J/m^2 qiymatlarga erishib, qavatlar sonining keyingi oshishida bu qiymatlar o'zgarmay qoladi. Bu hodisani termodinamik tizimning barqarorlikka erishganligi orqali tushuntirilib, tizim barqarorligi molyar Gibbs erkin energiyasining o'zgarishi (ΔG) orqali ifodalanadi [44]. Xususan, erkin energiyaning o'zgarishi (musbat) sirt energiyasi va kristalning qolgan qismi (manfiy) energiyasi yig'indisidan iborat bo'lib, kristal qalinlashib (qavatlar soni oshib) borgan sari uning manfiy qiymati o'sib borishi kristal sirtning ham barqarorlashishini anglatadi [44].

Olingan natijalar Ni(311) va Ni(111) sirtlari uchun olingan boshqa hisoblash/modellashtirish usullari orqali olingan natijalar bilan solishtirildi (3-rasm).

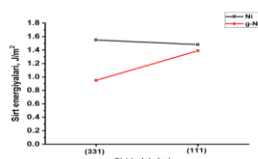
Xususan, CEM-LMTO ($2.36, 2.08 \text{ J/m}^2$) [45], EAM ($1.97, 1.62 \text{ J/m}^2$) [46] va MEAM ($2.34, 2.04 \text{ J/m}^2$) potentsiallari asosida olingan natijalari bilan bizning natijalarimiz orasida biroz farq bo'lsada, EAM-CG ($1.60, 1.36 \text{ J/m}^2$) [47], MC-EAM ($1.91, 1.65 \text{ J/m}^2$) [48], EAM potentsiallari asosida olingan natijalari ($1.75, 1.49 \text{ J/m}^2$) [49] bilan deyarli mos keladi. Chunonchi, Ni(111) va Ni(311) holatlar uchun hisoblangan sirt energiyasi qiymatlari MEAM va EAM potentsiallari asosida olingan natijalar bilan solishtirilganda, mos ravishda $0.80, 0.55 \text{ J/m}^2$ va $0.20, 0.01 \text{ J/m}^2$ ga farq qilishi aniqlandi.

4-rasmdan ko'rinadiki, toza Ni(311) va Ni(111) sirtlar energiyalari mos ravishda 1.55 va 1.48 J/m^2 tashkil etsa, g-Ni(311) va g-Ni(111) holatida esa bu qiymatlar 0.95 va 1.38 J/m^2 ga teng bo'ladi. Ushbu natijalar shuni ko'rsatadiki, Ni(311) sirtiga grafen bo'lagi qo'yilganda sirt energiyalaridagi o'zgarish Ni(111) sirtga grafen bo'lagi qo'yilgan holatdagiga nisbatan kattaroq bo'lib, 0.5 J/m^2 ga kamayadi. Bu olingan natija shunga dalolat qiladiki, tanlangan yuqori indeksli (311) sirt yordamida an'anaviy (111) sirtga o'xshab [50] grafen o'stirish mumkin.



3-rasm. Nikel (311) va Ni(111) sirtlari uchun olingan sirt energiyasi qiymatlarining boshqa hisoblash/modellashtirish usullari orqali olingan natijalari bilan taqqoslanishi.

Ni(111) va Ni(311) sirtlar bo'yicha olingan natijalar qiymatlari boshqa usullar orqali olingan qiymatlar bilan bir xil bo'lmasada, olingan natijalarda boshqa natijalarga o'xshab Ni(311) sirt energiyasi Ni(111) sirt energiyasidan kattaroq. Ni(311) va Ni(111) sirtlarda grafen o'sa olish ehtimolligini baholash uchun ushbu sirtlar yuzasiga grafen ($\text{C}_{48}\text{H}_{18}$) bo'lagi parallel qilib qo'yilib, ulardagi sirt energiyalarining o'zgarishi baholandi. Xususan, 4-rasmda toza Ni(311) va Ni(111) (qora rangda) va grafen bo'lagi qo'yilgan g-Ni(311) va g-Ni(111) (qizil rangda) sirtlarning sirt energiyalari berilgan.



4-rasm. Toza va grafen bo'lakli Ni kristalining sirt energiyalari.

Xulosa. Ushbu tadqiqot ishida, yuqori indeksli Ni(311) va past indeksli Ni(111) sirtlar sirt energiyalari kompyuterda modellashtirish orqali tadqiq etildi. Modellashtirish natijalari shuni ko'rsatdiki, qavatlar sonining oshishi sirt energiyasining kamayishiga va sirt yuzasining barqarorligiga olib keladi. Xususan, Ni(311) va Ni(111) sirtlar energiyalari (mos ravishda 1.55 J/m^2 va 1.48 J/m^2) 26 va 16-qavatlardan boshlab o'zgarishsizligi aniqlandi. Olingan natijalar boshqa kvant mexanik usullar orqali aniqlangan sirt energiyalari qiymatlari bilan deyarli mos tushdi. Hisoblash natijalar yana shuni ko'rsatdiki, grafenli Ni(311) sirtining sirt energiyasi grafenli Ni(111) sirtining sirt energiyasidan 0.5 J/m^2 ga pastroq bo'ladi. Bu esa yuqori indeksli Ni(311) sirtida ham an'anaviy Ni(111) sirtidagi kabi grafen o'stirish mumkinligini anglatadi.

Minnatdorchilik. Ushbu tadqiqot ishi O'zbekiston Respublikasi Innovatsion rivojlanish vazirligi tomonidan moliyalashtirilgan F-FA-2021-512 fundamental loyiha doirasida amalga oshirildi. Modellashtirish ishlari O'zR FA Ion-plazma va lazer texnologiyalari institutidagi NanoSim guruhi tomonidan tashkil etilgan FISTUz superkompyuterlar klasteri yordamida bajarildi.

ЛИТЕРАТУРА

1. "Cooper, et al. "Experimental review of graphene." International Scholarly Research Notices 2012 (2012)". (n.d.).
2. "Dubey, Ankit, et al. "Applications of graphene for communication, electronics and medical fields: A review." 2016
3. International Conference on Electrical, Electronics, and Optimization Techniques (ICEEOT). IEEE, 2016". (n.d.)
4. "Keith E. "Graphene synthesis",Diamond&Related Materials (2014)". (n.d.)

5. "Potdar "A review on applications of graphene." IJRAR 7, no. 4 (2020): 1-6." (n.d.).
6. A.C. T. van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant, and W. A. Goddard, ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons, J. Phys. Chem. A 105, 9396 (2001). (n.d.).
7. A.V. Fedorova, "Structure of graphene on the Ni(110) surface" Phys. Solid State 53, 1952 (2011). (n.d.).
8. Varykhalov and O. Rader, Phys. Rev. B: Condens. Matter, 2009, 80, 035437. (n.d.).
9. Ackland, G. J., and R. Thetford. "An improved N-body semi-empirical model for body-centred cubic transition metals." Philosophical Magazine A 56.1 (1987): 15-30. (n.d.).
10. Adams, J. B., "Self-diffusion and impurity diffusion of fee metals using the five-frequency model and the embedded atom method." Journal of Materials Research 4.1 (1989): 102-112. (n.d.)
11. Aissa, et al. "Recent progress in the growth and applications of graphene as a smart material: a review." Frontiers in Materials 2 (2015): 58. (n.d.).
12. Bai "Functional composite materials based on chemically converted graphene." Advanced Materials 23.9 (2011): 1089-1115. (n.d.).
13. C. Cepek, A. " Chemisorption and fragmentation of C60 on Pt(111) and Ni(110), Phys. Rev. B 53, 7466 (1996). (n.d.)
14. C. Zou, Y. K. Shin, A. C. T. van Duin, H. Fang, and Z.-K. Liu, Molecular Dynamics Simulations of the Effects of Vacancies on Nickel Self-Diffusion, Oxygen Diffusion and Oxidation Initiation in Nickel, Using the ReaxFF Reactive Force Field, Acta Materialia. (n.d.).
15. C.A. Becker a Metallurgy Division , National Institute of Standards and Technology , Gaithersburg, MD 20899, USA Published online: 20 Jul 2011. (n.d.).
16. Chen, et al. "Synthesis and characterization of large-area graphene and graphite films on commercial Cu–Ni alloy foils." Nano letters 11.9 (2011): 3519-3525. (n.d.)
17. Eom et al. "Structure and electronic properties of graphene nanoislands on Co (0001)." Nano letters 9.8 (2009): 2844-2848. (n.d.).
18. Fengning Liu, "Achievements and Challenges of Graphene Chemical Vapor Deposition Growth, Advanced functional materials", 2022, 2203191. (n.d.)
19. Ferrari, et al. "Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems." Nanoscale 7.11 (2015): 4598-4810. (n.d.)
20. Guo "Graphene nanosheet: synthesis, molecular engineering, thin film, hybrids, and energy and analytical applications." Chemical Society Reviews 40.5 (2011): 2644-2672. (n.d.).



УДК: –372.853

Mavlyuda ZAXIDOVA,
O'zbekiston Milliy universiteti professori
Zuxra GIYASOVA,
O'zbekiston Milliy universiteti tayanch doktoranti
E-mail: zuxra_08@list.ru,

TDU professori, Sh.K.Nematov taqrizi asosida

RAQAMLI TEXNOLOGIYALAR ASOSIDA FIZIKAVIY MASALALARNI GRAFIKLI USULDA YECHISH

Аннотация

Maqolada, amaliyot darslarida, fizikaning dinamika bo'limiga doir masalalarni yechishda, umumiy yechimni ifodalovchi formulalardan xususiy yechimlarga o'tish usullari hamda ushbu usul bilan masala yechishda raqamli texnologiyalardan, jumladan mobil ilova desmos grafikli kalkulyatoridan foydalanishning samarali taraflari bayon etilgan.

Kalit so'zlar: Umumiy yechim, xususiy yechim, qo'zg'almas blok, qiya tekisliklar, grafikli usul, grafikli bog'lanishlar, Desmos grafikli kalkulyatori.

ГРАФИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ЗАДАЧ НА ОСНОВЕ ЦИФРОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Аннотация

В статье показано, что при решении задач по физике переход от формул, представляющих общее решение, к частным решениям и использование графического калькулятора приводит к значительному облегчению решения задач.

Ключевые слова: общее решение, частное решение, неподвижный блок, наклонные плоскости, графический метод, графические зависимости, графический калькулятор- Desmos.

GRAPHIC SOLUTION OF PHYSICAL PROBLEMS BASED ON DIGITAL TECHNOLOGIES

Abstract

The article explaining the methodology for solving problems from physics shows the ways of transition from the method of finding a general solution to a particular solution and shows that the information content of the problem can be increased by applying the graphical solution method to these types of problems.

Keywords: general solution, particular solution, fixed block, inclined planes, graphical method, graphical dependencies, desmos graphical calculator.

Fizika fanini o'qitish davomida masala yechish o'quv faoliyatining eng muhim va murakkab jarayoni hisoblanadi. Fizika fanini yaxshi o'zlashtirish uchun o'quvchilar avvalo masala yechish usullarini yaxshi o'zlashtirishlari darkor. Fizikadan masalalarning turli qiyinchilik darajadali va ularni yechishning turli usullari mavjudligi tufayli o'quvchilar uchun masala yechish jarayoni doim muammoli vaziyat sanalgan. Chunki nazariy materiallarni yaxshi o'zlashtirgan o'quvchilar xam ba'zida u yoki bu turdagi masalalarni yechish usullarini tanlashda qiyinchiliklarga duch keladilar. Buning sababi oliygohlarning fizika fani dasturida masala yechish usullariga etarlicha vaqt agratilmaganligida deb o'ylayman.

Ko'p yillik pedagogik faoliyatim davomidagi kuzatishlardan shu ma'lum bo'ldiki, nazariy bilimlar asosida aniq fanlardan misol va masalalar yechib kelgan o'quvchilar, shu masalalarni grafikli usulda yechganlaridan so'ngina o'sha qoidalarining asl mohiyatini chuqurroq anglab yetganlarini e'tirof etganlar. Tajribalar fizika sohasidagi ta'lim sifatini sezilarli oshirishga ta'lim jarayoniga zamonaviy o'qitish uslublarini hususan fizikadan masalalarni grafikli usulda yechishga raqamli texnologiyalarni qo'llash orqali erishish mumkinligini ko'rsatdi.

Fizik kattaliklarning grafik bog'lanishlarini chizmalar orqali tasvirlanganda masala shartidagi fizik hodisa yoki jarayonlar yaqqol namoyon bo'ladi, bu jarayon yoki hodisani kuzatish endi qulayroq ko'rinishga o'tadi. Kattalikning maksimal va minimal qiymatlarni topish orqali jarayonning ro'y berish soxasini aniqlash imkoniyati paydo bo'ladi.

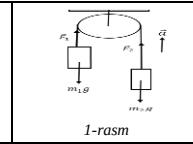
Biroq grafikli usulda masala yechayotganda, grafikni o'quvchilar tomonidan chizish talab etiladigan bo'lsa, ular endi boshqa muammoga duch keladilar. Har doim ham talabalar tomonidan chizilgan grafiklar aniq bo'lavermaydi, estetik jixatdan talabga javob bermaydi yoki masshtablarni tanlashda xatoliklarga yo'l qo'yiladi. Ushbu muammolarni masala yechishga raqamli texnologiyalar asosida yaratilgan grafikli kalkulyatorlarni qo'llash orqali bartaraf etish mumkin [1]. Raqamli texnologiyalar asosida grafik usulida fizik masalalarni yechish, ananaviy metodlardan farqli o'laroq, o'quvchilarga mavzuga oid bo'lgan katta hajmli ma'lumotlarni o'zlashtirishga yordam beradi.

Masalalarni yechishning grafik usuli ham ma'lum bir algoritmg muvofiq amalga oshiriladi. Bunday masalalarni yechish uchun, uning shartini diqqat bilan o'qish endi yetarli emas, balki o'quvchi "grafikalarni o'qish" imkoniyatiga ega bo'lishi ham muhimdir. Bu yerda nafaqat o'quvchilarga tegishli bo'lgan matematik bilimlar yordamga keladi, balki endi undan chizmalarni tushunish uchun fikrlash talab etiladi.

Shunday kalkulyatorlardan biri Desmos grafikli kalkulyatori bo'lib, bu kalkulyator yordamida avtomatik ravishda fizik jarayonlarni grafikli bog'lanishlar orqali ifodalash imkoniga ega bo'linadi[2-4]. Adabiyotlarda Desmos grafikli kalkulyatoridan foydalanish haqida batafsil yo'riqnoma ishlab chiqilgan.

Misol tariqasida quyidagi masaladagi [5] grafikli bog'lanishlarni Desmos kalkulyatori yordamida tasvirlaymiz.

1-masala Rasmda massasi m ga teng bo'lgan qo'zg'almas blok orqali o'tkazilgan ipning ikki uchiga mos ravishda m_1 va m_2 massali yuklar osilgan sistema tasvirlangan bo'lib, birinchi jism tezlanishini uning massasiga bog'liqligini aniqlash talab qilinadi. Bunda $m_1 = nm_2$, $m_2 = m$. Masalaning echimi avval umumiy xol uchun, so'ngra xususiy soddaroq xol uchun topilsin. Bu masalani echish uchun kinematika va dinamikaning quyidagi ifodalaridan foydalanamiz:



-kinematikada chiziqli tezlik (tezlanish) va burchak tezlik (tezlanish) orasidagi bog'lanish ifodalaridan, $v = \omega R$
 - ilgariylanma va aylanma harakat dinamikasining asosiy tenglamasidan,

$$a = \beta R \quad (1)$$

m_1 va m_2 massali jismlar harakati uchun Nyutonning ikkinchi qonuni ($\vec{F} = m\vec{a}$), blok uchun esa aylanma harakat dinamikasining asosiy qonunini qo'llaymiz

$$\vec{M} = I\vec{\beta}$$

Bu ifodalardan foydalanishda ip blok bo'ylab sirpanmasdan harakat qiladi deb hisoblaymiz. Ip sirpanmasdan harakat qilganda yuklarning tezlanishi ($\vec{a}$) modul bo'yicha blok chetki nuqtalarining tangensial tezlanishiga teng bo'ladi. (1) ifodadagi β blokning aylanish o'qi atrofidagi burchak tezlanishi, R esa uning radiusi. $\vec{F}$ -jismga ta'sir etuvchi barcha kuchlarning teng ta'sir etuvchisi, $\vec{M}$ -blokka ta'sir etuvchi barcha kuchlarning natijaviy momenti, I uning aylanish o'qiga nisbatan natijaviy inersiya momenti.

$$I = \frac{1}{2}mR^2 = 0,5mR^2 \quad (2)$$

Yuqorida eslatib o'tilganlardan foydalanib 1-rasmda ko'rsatilgan sistemaga kiruvchi barcha jismlar uchun dinamik harakat tenglamalarini tuzib chiqamiz.

$$m_1g - F_1 = m_1a \quad (3)$$

$$F_2 - m_2g = m_2a \quad (4)$$

$$(F_1 - F_2)R = I\beta = \frac{1}{2}mR^2 \frac{a}{R} \text{ yoki } (F_1 - F_2) = 0,5ma \quad (5)$$

(2), (4) va (5) tenglamalardan quyidagilarni hosil qilamiz:

$$m_1g - m_2g = (m_1 + m_2 + 0,5m)a$$

Bu tenglamadan yuklarning tezlanishi uchun quyidagi tenglama kelib chiqadi:

$$a = \frac{(m_1 - m_2)g}{(m_1 + m_2 + 0,5m)} \quad (6)$$

Agar bu ifodada blokning massasini e'tiborga olmasak, (6) ifoda quyidagi ko'rinishga keladi (ba'zi bir darsliklarda va test topshiriqlarida uchrab turadi):

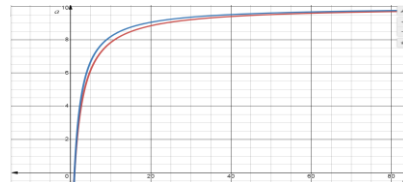
$$a = \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} g \quad (7)$$

Agar massalar orasidagi munosabatni ($m_1 = nm_2$, $m_2 = m$) e'tiborga oladigan bo'lsak, (6) va (7) ifodalar mos ravishda quyidagi ko'rinishlarni oladi:

$$a_1 = \frac{(n-1)}{(n+1,5)} g \quad (8)$$

$$a_2 = \frac{(n-1)}{(n+1)} g \quad (9)$$

Quyida bu ifodalardan foydalanib, tezlanish a bilan massalar nisbati n orasidagi bog'lanishlarni Desmos grafikli kalkulyatori yordamida tasvirlaymiz.

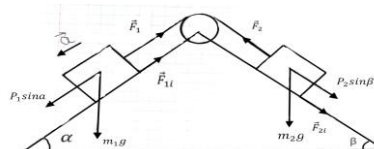


2-rasm

Grafikdan ko'rinadiki, n ning kichik qiymatlarida a_1 bilan a_2 orasidagi farq sezilarli bo'ladi, n ning kata qiymatlarida esa ular deyarli bir xil bo'lib erkin tushish tezlanishi g ga intiladi, lekin undan oshib ketmaydi. Bu grafik blokda $m_1 = nm_2$, $m_2 = m$ massali jismlarning tezlanishi har doim $a < g$ bo'lishini yaqqol ko'rsatadi.

Bundan tashqari Desmos grafikli kalkulyatori yordamida F_1 va F_2 kuchlarning m_1 va m_2 massalarga bog'liq ravishda o'zgarish dinamikasini ifodalovchi grafik bog'lanishlarni ham olish mumkin.

Masala yechishning turli usullari mavjud bo'lib [1-2], ulardan biri masalaning umumiy yechimidan xususiy yechimini topishga o'tish usulidir



3-rasm

2-masala. 3-rasmda qiyalik burchaklari $\alpha = 60^\circ$ va $\beta = 30^\circ$ bo'lgan qiya tekisliklar ko'rsatilgan bo'lib, ularning o'zaro birlashgan eng yuqori nuqtasiga massasi m ga teng bo'lgan va qo'zg'almas o'q atrofida erkin aylana oladigan blok o'rnatilgan. Blokkaga bir tekis qilib, cho'zilmaydigan ip o'rangan bo'lib, uning uchlariga qiya tekislikda joylashgan m_1 va m_2 ($m_1 \geq m_2$) massali brusoklar ulangan. Agar brusoklar bilan qiya tekisliklar orasidagi ishqalanish koeffitsientlari $k_1 = k_2 = 0,1$ ga teng bo'lsa, u holda bu brusoklar qanday tezlanish bilan harakat qiladi? Birinchi brusok massasining o'zgarishi bilan ularning

tezlanishi qanday o'zgaradi? Soddalik uchun $m_1 = nm_2$, $m_2 = m$ deb olinsin. Masala yechimi avval umumiy xolda yechilsin, so'ngra xususiy xollar ko'rib chiqilsin.

Berilganlar: $m_1 = nm_2 = nm$, $\alpha = 60^\circ$, $\beta = 30^\circ$, $k = k_1 = k_2 = 0,1$

Topish kerak: $a = a(m_1)$

Bu masalani yechish uchun:

1) kinematikada chiziqli tezlanish va burchak tezlanish orasidagi bog'lanish ifodasi $a = \beta R$ dan va 2) ilgarilanma va aylanma harakat dinamikasining asosiy qonunlari $\vec{F} = m\vec{a}$ va $\vec{M} = I\vec{\beta}$ dan foydalanamiz. Oxirgi formuladagi I blokning aylanish o'qiga nisbatan inersiya momentidir ($I = 0,5mR^2$)

1 – chizmadagi $F_{1i} = k_1 m_1 g \cos \alpha$ va $F_{2i} = k_2 m_2 g \cos \beta$ mos ravishda birinchi va ikkinchi brusoklar orasida yuzaga keluvchi ishqalanish kuchlari; $m_1 g \sin \alpha$ va $m_2 g \sin \beta$ lar esa qiya tekisliklar mos ravishda birinchi va ikkinchi jisimga ta'sir qiluvchi og'irlik kuchlarining tekisliklarga parallel tashkil etuvchilari; F_1 va F_2 ip tomonidan brusoklarga ta'sir etuvchi kuchlar.

Endi ikki brusok va blok uchun dinamik harakat tenglamalarini yozib chiqamiz:

$$m_1 g \sin \alpha - F_1 - k m_1 g \cos \alpha = m_1 a, \quad (1)$$

$$F_2 - m_2 g \sin \beta - k m_2 g \cos \beta = m_2 a, \quad (2)$$

$$(F_1 - F_2)R = I\beta = \frac{1}{2}mR^2 \frac{a}{R} \text{ yoki } (F_1 - F_2) = 0,5ma. \quad (3)$$

Bu tenglamalardan foydalanib, brusoklarning tezlanishi uchun quyidagi ifodani olamiz:

$$a = \frac{[m_1(\sin \alpha - k \cos \alpha) - m_2(\sin \beta + k \cos \beta)]}{m_1 + m_2 + 0,5m} g. \quad (4)$$

Ana endi bir qancha xususiy xollarni ko'rib chiqamiz.

1) Agar masalada ishqalanish kuchlari e'tiborga olinmasa (4) tenglama quyidagi ko'rinishga keladi

$$a = \frac{m_1 \sin \alpha - m_2 \sin \beta}{m_1 + m_2 + 0,5m} g \quad (5)$$

2) Agar masala shartida $k = 0$ va $m = 0$ deb olinsa, (4) ifoda quyidagi ko'rinishni oladi

$$a = \frac{m_1 \sin \alpha - m_2 \sin \beta}{m_1 + m_2} g \quad (6)$$

3) Agar masala shartida $\alpha = \beta = 90^\circ$ (6) ifoda qo'zg'almas blokka osilgan jismlarning harakatini ifodalaydi:

$$a = \frac{(m_1 - m_2)g}{m_1 + m_2 + 0,5m} \quad (7)$$

4) (7) ifodada blok vaznsiz deb hisoblansa, jism tezlanishi

$$a = \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} g \quad (8)$$

ko'rinishni oladi,

5) Agar masala shartida $\alpha = \beta = 90^\circ$ $m_2 = 0$ deb olinsa (5) tenglama qo'zg'almas blokka o'ralgan ip uchiga osilgan jisimning tezlanishini aks ettiradi:

$$a = \frac{m_1 g}{m_1 + 0,5m} \quad (9)$$

Masala shartida berilganlarni e'tiborga olsak (5),(6),(7),(8),(9) tenglamalar quyidagi ko'rinishlarni oladi.

$$a = \frac{[n(\sin \alpha - k \cos \alpha) - (\sin \beta + k \cos \beta)]}{n+1,5} g \quad (4')$$

$$a = \frac{(n \sin \alpha - \sin \beta)g}{n+1,5} \quad (5')$$

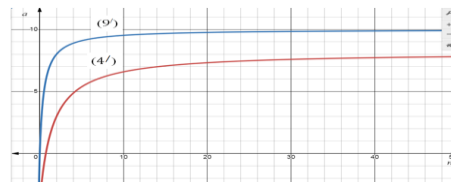
$$a = \frac{(n \sin \alpha - \sin \beta)g}{n+1,5} \quad (6')$$

$$a = \frac{(n-1)g}{n+1,5} \quad (7')$$

$$a = \frac{(n-1)g}{n+1,5} \quad (8')$$

$$a = \frac{n+1}{n+0,5} g \quad (9')$$

Yuqorida ko'rsatib o'tilganlardan tashqari o'zaro bog'lovchi ipda yuzaga keluvchi elastiklik kuchlarini, ularning massalariga bog'liqligini Desmos grafikli kalkulyatori yordamida amalga oshirish mumkin. Desmos grafikli kalkulyatoridan foydalanib (4') va (9') lar uchun $a(m_1)$ bog'lanishlarni chizamiz.



4-rasm

Shunday qilib amaliy mashg'ulotlarda grafikli usuldan foydalanish o'quvchilarga masala shartida bayon etilgan fizik hodisani yaxshiroq anglashlarini osonlashtirsa, bunday masalalarni yechishda Desmos kalkulyatoridan foydalanish grafikli masalalarni yechishdagi bir qancha qiyinchiliklar bartaraf etishga xizmat qiladi. Maqola so'ngida shuni qayd qilish lozimki, Desmos grafikli kalkulyatori yordamida tasvirlangan grafikli bog'lanishlar masala yechimining informativligini oshiradi.

ADABIYOTLAR

1. Giyasova Z.R. Zaxidova M.A. Fizikadan grafikli usulda masala yechishda Desmos grafikli kalkulyatoridan foydalanish. TDPU Ilmiy axborotlari. 2022 yil 6-son. 262-267 b.

2. Построение графиков функций с помощью графической системы desmos.com/calculator.razum.ru/publ/postroenie_grafikov_funkcij_s_pomoshhju_graficheskoy_sistemy_desmos_com/1-1-0-20
3. Работаем в Desmos. <https://kak-reshit-zadachu.schoolpsiholog.ru/2015/03/desmos.html?m=1>
4. М.С. Ладных. Графические методы решения задач по физике. МАОУ «Образовательный комплекс «Алгоритм Успеха», 2019
5. В.В.Богун. Использование графического калькулятора в обучении математике как средство повышения уровня практического мышления студентов вузов. Вестник РУДН, серия Информатизация образования, 2013, № 2
6. Zaxidova M.A., Abdullayev R.M., Begmatova D.A., Giyasova Z.R. Fizikadan masalalar yechish usullari. O'quv qo'llanma. Toshkent, "Innovatsiya-Ziyo", 2022.



УДК: 539.196, 544.2, 548.51

Farog'at YO'LCHIYEVA,
O'zbekiston Milliy Universiteti Fizika fakulteti Fotonika kafedrası
E-mail: 2yulchiyevafarogat@gmail.com
Turg'unali AXMADJANOV,
O'zbekiston Milliy Universiteti Fizika fakulteti Fotonika kafedrası mudiri
E-mail: t.akhmadjanov@nuu.uz

O'zR FA, Yadro fizikasi instituti katta ilmiy xodimi, PhD S.Turaqulov taqrizi asosida

EFFECT OF IONIZATION RADIATION ON SEMICONDUCTOR LASER PARAMETERS

Abstract

The reliability of laser diodes for use in space applications is studied. In the experiment, the field of gamma radiation was chosen as the radiation environment affecting the laser diodes, and the effect of radiation on the noise parameter of the semiconductor laser and their reproducibility were studied.

Keywords. Electron-hole pair, ionizing effect, displacement damage semiconductor laser, the parameters of the laser diode, noise density, gamma radiation, radiation dose.

ВЛИЯНИЕ ИОНИЗАЦИОННЫХ ИЗЛУЧЕНИЙ НА ПАРАМЕТРЫ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ЛАЗЕРА

Аннотация

Исследована надежность лазерных диодов для использования в космической технике. В эксперименте в качестве радиационной обстановки, воздействующей на лазерные диоды, было выбрано поле гамма-излучения, и исследовано влияние излучения на шумовые параметры полупроводникового лазера и их воспроизводимость.

Ключевые слова. Электронно-дырочная пара, эффект ионизации, смещение повреждение, полупроводниковый лазер, параметры лазерного диода, гамма-излучение, доза облучения.

YARIMO'TKAZGICHLI LAZER PARAMETRLARIGA IONIZATSION NURLANISHLAR TA'SIRI

Annotatsiya

Kosmik ilovalardan foydalanish uchun lazer diodlarning ishonchligi o'rganiladi. Bugungi kunga qadar lazer diodlarining turli parametrlariga ionizatsion nurlanishlar ta'siri o'rganilishiga qaramay, bu sohada hali tushuntirilmagan jihatlar ko'p. Tajribada lazer diodlariga ta'sir etuvchi radiatsion muhit sifatida gamma nurlanish maydoni tanlandi hamda yarimo'tkazgichli lazerning shovqin parametriga nurlanish ta'siri va ularning qayta tiklanuvchanligi o'rganildi.

Kalit so'zlar. Elektron-teshik jufti, ionizatsion ta'sir, siljish shikastlanishi, yarimo'tkazgichli lazer, lazer diodining parametrlari, shovqin zichligi, gamma nurlanish, nurlanish dozasi.

Kirish. Kosmik nurlanishning yarimo'tkazgichli materiallarga olib keladigan asosiy shikastlanish mexanizmlari ionlanish shikastlanishi, sirt shikastlanishi va siljish shikastlanishidir [1]. Ionlashning shikastlanishi gamma nurlanishidan kelib chiqadi va ionlashtiruvchi nurlanish ortiqcha elektron-teshik juftlarini hosil qiladi, bu esa o'tkazuvchanlikni oshishiga olib keladi [2-7]. Ionlash shikastlanishi rentgen nurlari, ultrabinafsha nurlanish yoki bilvosita ikkilamchi zarrachalar orqali ham yuzaga kelishi mumkin [8-10]. Yarimo'tkazgich materialning ionlanishi ortiqcha zaryad tashuvchilar, elektr va magnit maydonlarning o'zgarishi va kimyoviy ta'sirlarni ishlab chiqarish orqali elektr o'tkazuvchanligini oshishiga olib keladi [11].

Siljish shikastlanishi atomlarning ko'chishi ta'sirida materialda nuqsonlarni keltirib chiqaradi va bu nuqsonlar radiatsiyaviy bo'lmagan rekombinatsiya markazlari sifatida ishlaydi, bu esa tashuvchining ishlash muddatini qisqarishiga olib keladi [1]. Har uchta zarar mexanizmi lazer manbasining chiqish quvvatining kamayishiga va markaziy to'lqin uzunligining o'zgarishiga olib keladi [17-22].

Lazer diodlarini ishchi rejimini aniqlash uchun o'rganilayotgan muhit lazer diodiga qanday ta'sir etishini bilish va uning parametrlaridagi o'zgarishlarni taqqoslab ko'rish kerak. O'tkazilgan qator tajribalar natijalariga ko'ra gamma nurlanishning lazer diodlarining shovqin xarakteristikasiga tasiri 10^5 - 10^9 rad dozalarida kam o'rganilgan.

Shu sababli ushbu ishda radiatsiya nurlanishining yarimo'tkazgichli lazerlarga ta'siri hamda gamma nurlanishning 10^5 - 10^9 rad dozalari uchun lazerning shovqin zichligi xarakteristikasi o'rganildi.

Experiment va natijalar. Yarimo'tkazgichli lazerlarda shovqin xarakteristikasini o'lchash uchun bajarilgan laboratoriyaning asosiy maqsadi lazerlardan turli muhitlarda foydalanish natijasida yuzaga keladigan lazerning aktiv elementidagi buzilishlarni aniqlash va ularni kamaytirishdan iborat. Yarimo'tkazgichli lazer diodlariga gamma nurlanish ta'sirini o'lchash maqsadida olingan GaAs turdagi yarimo'tkazgichli lazeri gamma nurlanishga qo'yildi. Dastlab birinchi lazer uchun gamma nurlanishning 10^5 rad miqdorida gamma nurlanish berildi. Bu holatda kanal quvvati 120 R/s, nurlanish vaqti esa 13 minutni tashkil qilad.

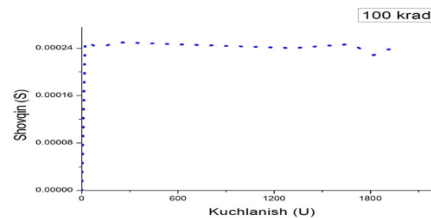
Lazer nurlanishidagi shovqinlarni eksperimental tadqiq etishda, odatda, nurlanish shovqinining spektral zichligi o'lchanadi. Buning uchun kam shovqinli qabul qilgichdan, masalan, lazer nurlanishini qabul qiladigan FEK dan elektr signali tashkil etuvchilari (o'zgarmas tashkil etuvchi U_0 va o'zgaruvchan tashkil etuvchi $U_{\sim}$) o'lchanadi. Bunda nurlanish shovqinining spektral zichligi quyidagi formula bo'yicha hisoblanadi [23]:

$$S(f) = \frac{U}{U - \Delta f^{1/2}} [G s^{-1/2}],$$

Lazer diodlarining shovqin parametriga gamma nurlanish ta'sirini o'rganishda bajarilgan tadqiqot quyidagi bosqichlarda amalga oshirildi:

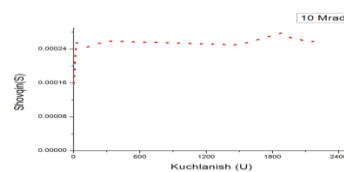
1. Radiatsion nurlanishlar ta'sirisiz lazer diodlarining shovqin zichligi o'rganildi.
2. Radiatsion nurlanishlar holatida gamma nurlanish dozasining o'sib borish tartibida LD ning shovqin zichligi o'rganildi.
3. Radiatsion nurlanishlar ta'siri to'xtatilgandan so'ng LD shovqin zichligi qayta tiklanuvchanligi o'rganildi.

1-rasmda gamma nurlanishning 100 krad nurlanish dozasida olib borilgan tajriba natijalari keltirilgan. Undan ko'rinadiki, nurlanish shovqin zichligi fotoko'paytirgichdan chiqayotgan elektr signalining o'zgaruvchan tashkil etuvchisiga bog'liqligi to'g'ri chiziq holatidan deyarli chetlashmaydi. Nurlanish dozasining past qiymatlarida LDning aktiv element qismidagi buzilish miqdori deyarli sezilmaydi.



1-rasm. 100 krad nurlanish uchun shovqin zichligi xarakteristikasini fotoko'paytirgichdan chiqayotgan elektr signalining o'zgaruvchan tashkil etuvchisiga bog'liqligi.

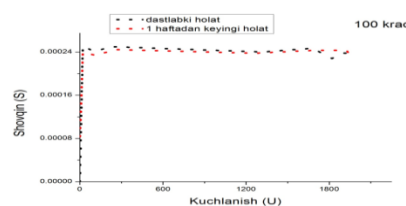
2-rasmda 10 Mrad nurlanish uchun shovqin zichligi xarakteristikasini fotoko'paytirgichdan chiqayotgan elektr signalining o'zgaruvchan tashkil etuvchisiga bog'liqligi keltirilgan. Bunda nurlanish doza miqdori oshib borgan sari shovqin parametrining to'g'ri chiziqdan chetlashishi kuzatildi. FEKdan chiqayotgan elektr signalining o'zgaruvchan tashkil etuvchisining qiymati yuqori nuqtaga yetganda buzilishlar miqdori ortganligi kuzatildi. Buning sababi asosiy bo'lmagan zaryad tashuvchilar miqdorining ortishi bilan tushuntiriladi [24].



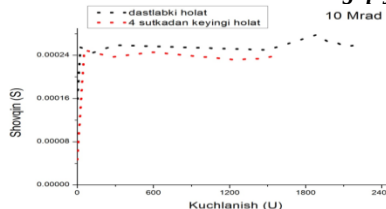
2-rasm. 10 Mrad nurlanish uchun shovqin zichligi xarakteristikasini fotoko'paytirgichdan chiqayotgan elektr signalining o'zgaruvchan tashkil etuvchisiga bog'liqligi.

Lazerni nurlanishga chidamliligini oshirish bir tomondan xarajat sarfini kamaytirsa, ikkinchi tomondan ulardan foydalanish imkoniyatini oshiradi.

O'tkazilgan tajriba davomida nurlantirilgan lazerning tiklanuvchanligini o'rganish maqsadida radiatsiya vaqtidan 4-7 sutka davomida natijalar qayta olindi. 3-rasmda 100 krad nurlanish dozasida uchun o'lchangan lazerning 7 sutkadan keyingi holati qayta keltirilgan. Tajriba natijalariga ko'ra har ikki holat o'rtasida sezilarli farq kuzatilmadi. 4-rasmda 10 Mrad doza miqdori uchun bajarilgan tajriba 4 sutkadan so'ng qayta o'lchash natijalari berilgan. Ikki holatdagi grafiklar sezilarli darajada farq qiladi. Buning sababi nurlanish dozasining yuqori qiymatlarida aktiv sohada ortgan buzilishlar miqdori 4 sutkadan so'ng yana muqobil qiymatga qaytishidir.



3-rasm. 100 krad nurlanish dozasida lazerlarning qayta tiklanuvchanligi



4-rasm. 10 Mrad nurlanish dozasida lazerlarning qayta tiklanuvchanligi

Xulosa va takliflar. Tajriba natijalariga ko'ra, gamma nurlanishning 10^5 rad miqdorida lazerlarda buzilishlar deyarli kuzatilmadi. Qisman buzilishlar ro'y berdi, xona haroratida dastlabki ish rejimini qayta tikladi. Gamma nurlanish doza miqdori oshib borgan sari yarimo'tkazgichli lazerlarning shovqin zichligi xarakteristikasi ham oshib borishi kuzatildi.

Gamma nurlanishning 10^8 raddan yuqori dozalarida biz foydalanayotgan lazerlarning ish rejimida buzilishlar miqdori ortdi. Lazerlarning ichki va tashqi qoplamalarida plastmassadan yasalgan tarkiblarning parchalanishi kuzatildi. Bu holatda lazerlardan natija olishga erishib bo'lmadi.

Yarimo'tkazgichli GaAs turdagi lazerlar gamma nurlanishning 10^5 - 10^7 rad doza miqdorigacha nisbatan kam buzilishlarni namoyon qildi. Gamma nurlanishning 10^8 - 10^9 rad doza oralig'ida esa buzilishlar miqdori ortib shovqin xarakteristikasi kuchaydi.

Atrof-muhitdan keladigan nurlanishlar lazer parametrlariga ta'sir etib nurlanishlar miqdorini ortishi lazer ishchi rejimini buzilishiga ham olib keladi. Nurlanishlar ta'sirini kamaytirish maqsadida lazerlarning sirt qoplamasini nurlanishga chidamliligini oshirish hamda nurlanish ta'sirini kamaytirish choralarini ishlab chiqish zarur.

ADABIYOTLAR

1. R. Hou, S. Zhao, Z. Yao, J. Xu, X. Li, and S. Fang, "Influence on the bit error ratio of the optical satellite communication system under space radiation environment," 2012 Symposium on Photonics and Optoelectronics, SOPO 2012, 2012.
2. H. Lischka, H. Henschel, O. Koehn, W. Lennartz, S. Metzger, and H. U. Schmidt, "Gamma and neutron irradiation of optoelectronic devices," Proceedings of the
3. European Conference on Radiation and its Effects on Components and Systems, RADECS, pp. 560-563, 1995.
4. C. C. Phifer, "Effects of Radiation on Laser Diodes," no. No. SAND2004-4725, pp. 1-30, 2004.
5. Johnston A. H., "Radiation effects in light-emitting and laser diodes," IEEE Transactions on Nuclear Science, vol. 50 III, no. 3, pp. 689-703, 2003.
6. Johnston A. H., "Radiation effects in optoelectronic devices," IEEE Transactions on Nuclear Science, vol. 60, no. 3, pp. 2054-2073, 2013.
7. Liu Y., Zhao S., Yang S., Li Y., and Qiang R., "Reliability of laser diodes for laser satellite communication in space radiation environment," 2588-2590, 2015.
8. Boutillier M. et al., "Strong electron irradiation hardness of 852 nm Al-free laser diodes," Microelectronics Reliability, vol. 46, no. 9-11, pp. 1715-1719, 2006.
9. L. Adams A. Holmes-Siedle. Handbook of Radiation Effects. Oxford University Press, 2004.
10. F. Giustino. Radiation Effects on Semiconductor Devices, Study of the Enhanced Low Dose Rate Degradation. PhD thesis, Politecnico di Torino, 2001.
11. R.A.B. Devine. The structure of SiO₂, its defects and radiation hardness. IEEE Transactions on Nuclear Science, 41(3), 1994, pages 452-459. C. E. Barnes, D. M. Fleetwood, D. C. Shaw, and P. S. Winokur. Post irradiation effects (PIE) in integrated circuits. IEEE Transactions on Nuclear Science, 39(3), 1992, pages 328-341.
12. G. Messenger and M. Ash. The Effects of Radiation on Electronic Systems. Van Nostrand Reinhold Company Inc., 1986.
13. C. E. Barnes, D. M. Fleetwood, D. C. Shaw, and P. S. Winokur. Post irradiation effects (PIE) in integrated circuits. IEEE Transactions on Nuclear Science, 39(3), 1992, pages 328-341.
14. H. Lischka, H. Henschel, O. Koehn, W. Lennartz, S. Metzger, and H. U. Schmidt, "Gamma and neutron irradiation of optoelectronic devices," Proceedings of the European Conference on Radiation and its Effects on Components and Systems, RADECS, pp. 560-563, 1995.
15. C. C. Phifer, "Effects of Radiation on Laser Diodes," no. No. SAND2004-4725, pp. 1-30, 2004.
16. Johnston A. H., "Radiation effects in light-emitting and laser diodes," IEEE Transactions on Nuclear Science, vol. 50 III, no. 3, pp. 689-703, 2003.
17. Johnston A. H., "Radiation effects in optoelectronic devices," IEEE Transactions on Nuclear Science, vol. 60, no. 3, pp. 2054-2073, 2013.
18. O. Gilard and G. Quadri. Radiation effects on electronics: displacement damages. New Challenges for Radiation Tolerance Assessment, Radiation Effects on Components and Systems, 2005, pages 47-69.
19. R.D.Schrimpf. Recent advances in understanding total-dose effects in bipolar transistors. In: Radiation Effects on Components and Systems, Third European Conference on, 1995, pages 9-18.
20. K. Makino, M. Berz, D. Errede, and C.J. Johnstone. Nonlinear transfer map treatment of beams through systems with absorbing material. In: Physics and Control, 2003. Proceedings. 2003 International Conference, volume 3, 2003.
21. A. A. Hahn and J. R. Zagel. Observation of Bethe-Bloch ionization using the booster ion profile monitor. In: Particle Accelerator Conference, volume 1, 1999, pages 468-470.
22. C. Detcher, C. Dachs, E. Lorfèvre, C. Sudre, G. Bruguier, J.M. Palau, J. Gasiot, and R. Ecoffet. SEU critical charge and sensitive area in a submicron CMOS technology. IEEE Transactions on Nuclear Science, 44(6), 1997, pages 2266-2273.
23. K. Label and L. Cohn. Radiation testing and evaluation issues for modern integrated circuits. New Challenges for Radiation Tolerance Assessment, Radiation Effects on Components and Systems, 2005, pages 71-93.
24. Кейси Х., Паниш М. Лазеры на гетероструктурах, М., Мир, 1981.
25. G. Messenger and M. Ash. The Effects of Radiation on Electronic Systems. Van Nostrand Reinhold Company Inc., 1986.



Shaxrizoda MATNAZAROVA,

*O'zbekiston Milliy universiteti, Fizika fakulteti magistranti
O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti muhandisi
E-mail: shahrizodamatnazarova300@gmail.com*

Turg'unali AXMADJANOV,

*O'zbekiston Milliy universiteti, Fizika fakulteti Fotonika kafedrtasi mudiri
E-mail: t.akhmadjanov@nuu.uz*

Umedjon XALILOV,

*O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti bosh ilmiy xodimi
E-mail: umedjon.khalilov@uantwerpen.be*

Maksudbek YUSUPOV,

*O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti bosh ilmiy xodimi
E-mail: maksudbek.yusupov@uantwerpen.be*

Geologiya fanlari universiteti, Aniq va tabiiy fanlar kafedrasida dotsenti, f.-m.f.d. X.Raximov taqrizi ostida

BEHAVIOUR OF CARBON NANOTUBES IN WATER ENVIRONMENT

Abstract

Due to the cytotoxicity of carbon nanotubes (CNTs), there is an increasing need for functionalized CNTs (fCNTs) nowadays. Although a number of studies have been conducted to investigate the cytotoxic effects of fCNTs, their behavior in an aqueous medium has not been sufficiently studied. In this research, the atomic level mechanisms of interaction between pristine (non-functionalized) and fCNTs and water molecules were studied by computer simulations. The computational results showed that an increase in the number of functional groups in fCNT leads to an increase in its interaction energy with the water environment due to hydrogen bonds. This, in turn, results in a decrease in the cytotoxicity of fCNT. Overall, the results of the study contribute to the understanding at the molecular level of the transport and delivery of biological drugs using CNTs in the field of biomedicine.

Keywords: single wall carbon nanotubes, functionalized single wall carbon nanotubes, binding energy, water environment, interaction energy, molecular dynamics.

ПОВЕДЕНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ВОДНОЙ СРЕДЕ

Аннотация

Из-за цитотоксичности углеродных нанотрубок (УНТ) в настоящее время возрастает потребность в функционализированных УНТ (фУНТ). Хотя для изучения цитотоксических эффектов фУНТ проведен ряд исследований, их поведение в водной среде изучено недостаточно. В этом исследовании с помощью компьютерного моделирования исследованы механизмы взаимодействия чистых (нефункционализированных) и фУНТ с молекулами воды на атомном уровне. Результаты моделирования показали, что увеличение количества функциональных групп фУНТ приводит к увеличению энергии ее взаимодействия с водной средой за счет водородных связей. Это, в свою очередь, приводит к снижению цитотоксичности фУНТ. В целом результаты исследования способствуют пониманию на молекулярном уровне транспорта и доставки биологических препаратов с использованием УНТ в области биомедицины.

Ключевые слова: одностенные углеродные нанотрубки, функционализированные одностенные углеродные нанотрубки, энергия связи, водная среда, энергия взаимодействия, молекулярная динамика.

UGLEROD NANONAYCHASINING SUV MUHITIDAGI TABIATI

Annotatsiya

Uglerod nanonaychasi (UNN)ning sitotoksik ta'sirga ega ekanligi bugungi kunda funkcionallashgan UNN (fUNN)ga bo'lgan talabni tobora orttirmoqda. Garchi fUNNlarning sitotoksik effekti bo'yicha bir qator tadqiqotlar amalga oshirilgan bo'lsada, ularning suv muhitidagi tabiati yetarlicha tadqiq etilmagan. Ushbu tadqiqot ishida toza (funkcionallashmagan) hamda fUNN bilan suv molekullari orasidagi o'zaro ta'sirning atomar darajadagi mexanizmlari kompyuterda modellashtirish orqali o'rganildi. Modellashtirish natijalari fUNNdagi funktsional guruhlarning sonining ortishi uning suv muhiti bilan o'zaro ta'siri vodorod bog'lari tufayli kuchayishiga olib kelishini ko'rsatdi. Bu esa, o'z navbatida, fUNNning sitotoksikligi kamayishiga sabab bo'ladi. Umuman olganda, bu tadqiqot natijalari biomeditsina sohasida UNN yordamida biologik dori vositalarini tashish va yetkazish jarayonlari molekulyar darajada tushunishga yordam beradi.

Kalit so'zlar: bir qavatli uglerod nanonaychasi, funkcionallashgan bir qavatli uglerod nanonaychasi, bog'lanish energiyasi, suv muhiti, o'zaro ta'sir energiyasi, molekulyar dinamika

Kirish. Uglerod nanostrukturalari o'zining noyob fizik, kimyoviy va biologik xususiyatlari tufayli istiqbolli materiallar sifatida turli sohalarda keng miqyosda qo'llanilmoqda [1]. Ayniqsa, ular orasida uglerod nanonaychasi (UNN) o'zining mukammal elektr va mexanik xususiyatlari tufayli ko'pgina sohalarga jadallik bilan kirib kela boshladi [2]. Xususan, ular biomeditsina sohasida biologik dori vositalarini tashish va yetkazishda hamda biosensorlar sifatida qo'llanila boshlandi [3-7]. UNNlar hujayralarda membrana kanali sifatida qo'llanilib, ular hujayra membranasi orqali DNK va boshqa dori vositalarini tashishda ajoyib transport xususiyatlarini namoyish etishgan [8-11]. Ayniqsa, saraton kasalligini davolashda UNNlar istiqbolli tashuvchilar sifatida qaralib [12], ular terapiya natijasida yuzaga keladigan nojo'ya ta'sirlarni, ya'ni dori vositalarining

toksikligini kamaytirishda [12-15] va o'simta joylashgan sohaga dorilarni ko'proq yetkazib berishda foydalanilmoqda [16]. Bu esa, o'z navbatida, bemordagi sog'lom to'qimalarning kamroq shikastlanishiga yordam beradi.

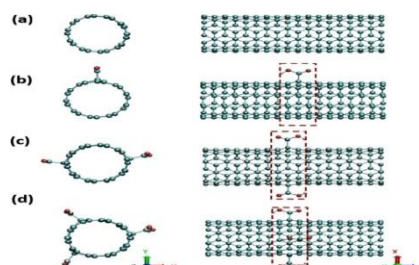
Toza yoki funksionallashtirilmagan UNNlar gidrofob bo'lib, suvda erimasligi [17, 18] tufayli ular suvli eritmalarida to'planish xususiyatiga ega [19]. To'plangan UNNlar yuzasining gidrofobikligi ularning hujayralar o'sishida zarur bo'lgan ozuqa moddalarni (nutrientlarni) o'ziga xos tarzda kimyoviy bog'lab olishiga va natijada hujayralarga bilvosita sitotoksik ta'sir ko'rsatishiga (ya'ni, hujayralarning shikastlanishi va nobud bo'lishiga) olib keladi [20]. Xususan, sinov hayvonlari bilan o'tkazilgan tajribalarda ularning o'pkalarida toza UNNlar tufayli zaharlanish holatlari oshganligi kuzatilgan [21, 22]. Bu esa biotibbiyotda toza UNNlardan amaliy foydalanishni cheklaydi va ularning suvli muhitda eruvchanligini (biomoslashuvchanligini) oshirish orqali toksikligini kamaytirish zaruriyatini tug'diradi.

UNNlar toksikligini kamaytirishning samarali usuli bu biomoslashuvchan organik materiallarni toza UNN sirtiga qo'shish, ya'ni unga suvda eruvchan funksional radikallarni birlashtirish hisoblanadi. Bu borada chumoli kislotasi radikali ($-CO_2H$) bilan funksionallashtirilmagan (ya'ni, karboksillangan) UNNlar yordamida o'tkazilgan tajribalar ushbu UNNlarning sitotoksik ta'siri mavjud emasligini ko'rsatdi [23]. Bundan tashqari, ko'pgina tadqiqotlarda nanonaychalarni funksionallashtirish orqali modifikatsiya qilingandan so'ng ularning eruvchanligi sezilarli darajada oshishi aniqlangan [24-30]. Xususan, kvant-mexanik hisoblashlar karboksillangan bir qavatli UNN (BQNN) sirtidagi funksional guruhlar sonining ortishi BQNN solvatatsiya Gibbs erkin energiyasi va dipol momentining ortishiga olib kelishini ko'rsatgan [28]. Bu esa o'z navbatida BQNNning suvda eruvchanligi sezilarli darajada ortganligidan dalolat bergan [28]. Molekulyar dinamika (MD) usuli yordamida amalga oshirilgan modellashirish tadqiqotida esa karboksillangan BQNNning suvdagi diffuziya koeffitsienti toza BQNNnikiga qaraganda kamroq bo'lishi aniqlangan va bu BQNNning gidrofilik xususiyati oshganligiga dalolat qilgan [31]. Shuni ta'kidlash joizki, yuqorida keltirilgan tadqiqotlarda model tizimlar sifatida chekli uzunlikdagi ($\leq 11 \text{ \AA}$) va chetlari vodorod atomlari bilan to'yingan BQNNlar tanlangan, ya'ni ularning fizik-kimyoviy xususiyatlari eksperimental usullar bilan olingan yetarlicha uzun BQNNlarnikidan farq qiladi. Undan tashqari, ushbu tadqiqotlarda funksionallashtirilmagan BQNN (fBQNN)ning diffuziyasi bilan bog'liq molekulyar darajadagi tafsilotlar yetarlicha chuqur o'rganilmagan.

Yuqoridagi mulohazalardan kelib chiqib, ushbu tadqiqotda toza hamda chumoli kislotasi radikallari bilan turli darajada funksionallashtirilmagan (karboksillangan) BQNNning suv muhiti bilan o'zaro ta'sirining atomar darajadagi mexanizmlari reaktiv MD usuli yordamida kompyuterda modellashirish orqali o'rganiladi.

Modellashtirish tafsilotlari. Toza va fBQNNning suv muhitidagi tabiatini yaxshiroq tushunish, ya'ni BQNNning suv bilan o'zaro ta'sir mexanizmlarini atomar darajada tadqiq qilish uchun ReaxFF potensialidan (yoki kuch maydonidan) [32] foydalangan holda reaktiv MD simulyatsiyalari amalga oshirildi. ReaxFF yordamida turli xil model tizimlar, jumladan, suv [33], UNN [34] va boshqa bir qancha strukturalarda MD simulyatsiya ishlari amalga oshirildi. Ushbu tadqiqot ishida ReaxFF kuch maydonining Zou va boshqalar [35] tomonidan ishlab chiqilgan parametrlar to'plamidan foydalanildi. Bu parametrlar to'plami UNNni juda yaxshi (ya'ni, aniq va ishonchli) tasvirlay olishi Xalilov va boshqalar tomonidan ko'rsatilgan [34]. Uni suv muhitini ham yaxshi tasvirlay olishi ushbu ishda qo'shimcha MD simulyatsiyasini bajarish orqali tekshirib olindi.

BQNNning suv muhitidagi tabiatini o'rganish uchun (5,5) xiralikli, $22 \text{ \AA}$ uzunlikka ega bo'lgan va $6.8 \text{ \AA}$ diametrlil toza BQNN model tizimi *Nanotube Modeler* dasturi yordamida hosil qilindi (1(a)-rasm). fBQNN model tizimlarini hosil qilish uchun esa ushbu toza BQNN sirtiga bitta, ikkita va uchta chumoli kislotasi radikali ($-CO_2H$) kovalent bog'langan holatda tayyorlandi (1(b-d)-rasm). Ushbu funksional guruhlar z-o'qi yo'nalishi bo'yicha BQNNning o'rta sohalariga bog'landi. So'ngra, ushbu 4 ta model tizimlar atrofi suv molekullari bilan qoplandi. Shunday qilib, toza va fBQNN atrofidagi suv molekullari bilan birgalikda $22 \times 22 \times 22.68 \text{ \AA}^3$ o'lchamdagi simulyatsiya qutisiga joylashtirildi. Simulyatsiya qutisining uchchala yo'nalishi bo'ylab davriy chegaraviy shartlar qo'llanildi: bu BQNNlarni xuddi eksperimental tadqiqotlardagi kabi yetarlicha uzun deb hisoblashga imkon beradi.



1-rasm. (5,5) xiralikli toza (a) hamda bitta (b), ikkita (c) va uchta (d) chumoli kislotasi radikali ($-CO_2H$) bilan funksionallashtirilmagan BQNNlarning tepadan (chapda) va yon tomondan (o'ngda) ko'rinishi. Qizil punktirli to'rtburchaklar BQNNdagi funksional guruhlar joylashgan sohalarini ko'rsatadi.

Dastlab, model tizimlar energiyasi birlashtirilmagan gradient usuli yordamida minimallashtirildi. So'ngra, tizimlarning harorati 310 K gacha NpT ansambli yordamida 1 atm bosim ostida 1 K/ps tezlik bilan 310 ps vaqt davomida sekin-asta qizdirildi. Bunda Berendsen termostati va barostatidan foydalanib, ularning ulanish davriyligi, mos ravishda, 0.1 va 5 ps qilib olindi [36]. Harorati 310 K ga yetgan model tizimlar yana 1 ns vaqt davomida NpT ansambliida Berendsen termostati va barostati yordamida termalizatsiya qilindi. Barcha MD modellashirishlarda vaqt qadami etib 0.25 fs tanlandi.

Natijalar va ularning muhokamasi

Funksional guruhning ($-CO_2H$) BQNN bilan o'zaro ta'siri

Gidrofilik funksional guruhlarining nanonaycha bilan o'zaro ta'sirini baholash uchun ushbu guruhlarining BQNN sirtiga bog'lanish energiyasi E_b quyidagicha aniqlandi:

$$E_b = E_{BQNN-(CO_2H)_n} - (E_{BQNN} + E_{(CO_2H)_n}) \quad (1)$$

bu yerda, n – funksional guruhlar soni ($n=1-3$), $E_{BQNN-(CO_2H)_n}$ – BQNN va funksional guruh(lar)dan tashkil topgan tizimning, E_{BQNN} va $E_{(CO_2H)_n}$ lar esa BQNN va funksional guruh(lar)ning alohida holatdagi potensial energiyalari (eV). Ushbu (1) formuladan foydalanib, $-CO_2H$ radikal(lar)ning (funksional guruh(lar)ning) BQNN sirtiga bog'lanish energiyasi vakuum va suvli muhit uchun hisoblandi (1-jadval).

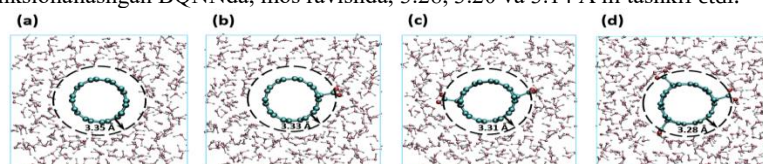
1-jadval. Vakuum va suv muhitidagi BQNN sirtiga $-CO_2H$ radikal(lar)ning bog'lanish energiyasi. Qavs ichida berilgan qiymatlar bitta $-CO_2H$ radikaliga to'g'ri keluvchi bog'lanish energiyasi hisoblanadi.

-CO ₂ H radikal soni	Bog'lanish energiyasi (eV)	
	vakuumda	suvda
1	-4.56	-4.58
2	-9.12 (-4.56)	-9.16 (-4.58)
3	-13.62 (-4.54)	-13.74 (-4.58)

Jadvaldan ko'rinadiki, ikkala holatda ham (ya'ni, vakuum va suv muhiti holatlarida) bitta radikalga to'g'ri keluvchi bog'lanish energiyasi radikal sonining ortishi bilan deyarli o'zgarmaydi. Chunonchi, vakuum muhitida bitta radikalga to'g'ri keluvchi bog'lanish energiyasi 1, 2 va 3 ta funksional guruhli BQNNlar uchun, mos ravishda, -4.56, -4.56 va -4.54 eV ga teng bo'lsa, suvli muhitda uning qiymati barcha holatlar uchun -4.58 eV ni tashkil etadi. Shuni ta'kidlash joizki, oldingi kvant-mexanik hisoblash natijalari BQNN sirtidagi radikal sonining ortishi ularning BQNNga bog'lanish energiyasining kamayishiga (ya'ni, bog'ning zaiflashishiga) olib kelishini ko'rsatgan [28]. Ushbu ishdagi natijalarning kvant-mexanik natijalardan farq qilishini tadqiqotlarda qo'llanilgan BQNN o'lchami va uning chetlari vodorodlanganligi orqali tushuntirish mumkin. Boshqacha qilib aytganda, kvant-mexanik tadqiqotlarda uzunligi 8.65 Å va cheklangan BQNN model strukturalari tanlangan bo'lib, uning chetlaridagi uzilgan bog'lar vodorod atomlari bilan to'yingan (bog'langan). Ushbu vodorod atomlari BQNNdagi funksional guruhlar bilan bog'lanmagan (ya'ni, Van der Waals va Kulon) kuchlar orqali o'zaro ta'sirlashishi ushbu guruhlarining BQNN bilan bog'lanish energiyasiga ta'sir qilishi mumkin. Bizning tadqiqotimizda BQNN strukturasida vodorod atomlarining mavjud emasligi ularning funksional guruhlar bilan o'zaro ta'sirlashish imkonini yo'qqa chiqaradi va shuning uchun bog'lanish energiyasi o'zgarmaydi (1-jadvalga qarang). Undan tashqari, BQNNning yetarlicha uzun (~22 Å) ekanligi uning chetlarida vodorod atomlari mavjud bo'lgan taqdirda ham ularning funksional guruhlar bilan o'zaro ta'sirlashmasligiga sabab bo'ladi (ya'ni, vodorod atomlari va funksional guruhlar bir-biri bilan ta'sirlashish doirasidan tashqarida joylashgan). Haqiqatan, yetarlicha uzun (~22 Å) BQNNning chetlari vodorodlangan strukturalari bilan o'tkazgan sinov modellashlarimiz yuqoridagi fikrimizni to'liq tasdiqladi. Xususan, vakuum muhitida bitta radikalga to'g'ri keluvchi bog'lanish energiyasi 1, 2 va 3 ta funksional guruhli vodorodlangan BQNNlar uchun, mos ravishda, -4.61, -4.62 va -4.59 eV ga teng ekanligi (ya'ni, deyarli bir xilligi) aniqlandi.

Toza va fBQNNning suv muhiti bilan o'zaro ta'siri

2-rasmda suv muhitiga joylashtirilgan toza BQNN hamda bitta, ikkita va uchta gidrofil $-CO_2H$ radikalli fBQNNlar sirti bilan ularga eng yaqin bo'lgan suv molekularining O atomlari orasidagi o'rtacha masofa keltirilgan. Olingan natijalar ushbu o'rtacha masofalarning adabiyotlardagi toza BQNN uchun DFT usuli yordamida hisoblangan masofa (ya'ni 3.2 Å [37]) ga yaqin ekanligini ko'rsatdi. Shunga e'tibor berish kerakki, DFT usuli yordamida toza BQNN atrofiga joylashtirilgan bitta suv molekulasining O atomi bilan unga eng yaqin bo'lgan BQNNdagi C atomi orasidagi masofa hisoblangan. 2-rasmdan ko'rinadiki, BQNN sirtidagi funksional guruhlar sonining ortishi bilan BQNN va suv molekulari orasidagi o'rtacha masofa kamayadi. Xususan, toza, bitta, ikkita va uchta radikalli BQNNlar uchun bu masofalar, mos ravishda, 3.35, 3.33, 3.31 va 3.28 Å ni tashkil etadi. Boshqacha qilib aytganda, bitta, ikkita hamda uchta radikal bilan funkcionallashgan BQNNdagi o'rtacha masofa toza BQNNdagiga qaraganda, mos ravishda, 0.02, 0.04 Å va 0.07 Å ga kamayadi (2-rasm). Bundan tashqari, tadqiqot natijalari BQNNning funksional radikal joylashgan sohasida (1-rasmdagi qizil punktirli to'rtburchaklarga qarang) ushbu masofalar nanonaychani qolgan sohalariga qaraganda yanada qisqaroq bo'lishini ko'rsatdi. Xususan, ushbu masofalar bitta, ikkita va uchta radikal bilan funkcionallashgan BQNNda, mos ravishda, 3.28, 3.20 va 3.14 Å ni tashkil etdi.



2-rasm. Toza (a), bitta (b), ikkita (c) va uchta (d) $-CO_2H$ radikallari bilan funkcionallashgan BQNNlarning suv muhitidagi ko'rinishi. Punktirli aylanalarda BQNN C atomlari bilan ularga eng yaqin suv molekularining O atomlari orasidagi o'rtacha masofani ko'rsatadi. BQNNdagi C atomlar hamda suvdagi O va H atomlar, mos ravishda, zangori, qizil va oq ranglarda tasvirlangan.

Umuman olganda, ushbu masofalarning kamayishini BQNNning gidrofil funksional guruhlar bilan suv molekulari orasida hosil bo'lgan vodorod bog'lari orqali tushuntirish mumkin. Haqiqatan, funksional radikal sonining ortishi bilan vodorod bog'larining soni ortib boradi. Bu esa, o'z navbatida suv molekularining nanonaycha sirtiga yanada ko'proq tortilishi tufayli unga yaqin masofaga joylashishiga sabab bo'ladi.

Vodorod bog'lari sonining ortishi bilan fBQNNga suv molekularining ko'proq tortilishini ular orasidagi o'zaro ta'sir energiyasini hisoblash orqali baholash mumkin. 2-jadvalda toza va fBQNNlarning suv molekulari bilan o'zaro ta'sir energiyalari keltirilgan. Shuni ta'kidlash kerakki, ushbu energiyalar (1) formulada keltirilgan bog'lanish energiyasiga o'xshash hisoblanadi. Boshqacha qilib aytganda, fBQNN va suv orasidagi o'zaro ta'sir energiyasi suvli sistemaning (fBQNN+suv) potensial energiyasidan fBQNN va suv muhitining alohida hisoblangan potensial energiyalari yig'indisini ayirish orqali aniqlanadi.

2-jadval. Toza hamda funkcionallashgan nanonaychalarning suv molekulari bilan o'zaro ta'sir energiyalari.

Nanonaycha	Nanonaychani suv bilan	Nanonaychadagi atomlar	Nanonaycha bitta atomiga to'g'ri
------------	------------------------	------------------------	----------------------------------

	o'zaro ta'sir energiyasi (eV)	soni	keluvchi energiya (eV)
BQNN	-6.13	180	-3.41×10^{-2}
BQNN-CO ₂ H	-6.46	184	-3.51×10^{-2}
BQNN-(CO ₂ H) ₂	-7.44	188	-3.96×10^{-2}
BQNN-(CO ₂ H) ₃	-8.72	192	-4.54×10^{-2}

Jadvaldan ko'rinadiki, toza BQNN bilan suv molekularlari orasidagi o'zaro ta'sir energiyasi -6.13 eV ga teng va bu energiya BQNNdagi funksional guruhlar sonining ortishi bilan ortib boradi. Xususan, 1, 2 va 3 ta radikalli BQNNlar uchun ushbu energiya, mos ravishda, -6.46 eV, -7.44 eV va -8.72 eV ga teng. Jadvaldan yana ko'rish mumkinki, ushbu o'zaro ta'sir energiyalarining BQNNdagi bitta atomga to'g'ri keluvchi o'rtacha qiymatlari ham BQNNdagi funksional radikallar sonining ortishi bilan ortib boradi, ya'ni, toza, 1, 2 va 3 ta radikalli BQNNlar uchun ularning qiymati, mos ravishda, -3.41×10^{-2} , -3.51×10^{-2} , -3.96×10^{-2} va -4.54×10^{-2} ga teng. O'zaro ta'sir energiyasining ortishi tufayli suv molekularlarining nanonaycha sirtiga ko'proq tortilishi fBQNNning suvdagi harakatiga to'sqinlik qilib, uning diffuziya koeffitsientini kamayishiga olib kelishi mumkin. Demak, ushbu natijalar fBQNNning suvdagi diffuziyasi bo'yicha olingan oldingi MD natijalari [31] bilan to'la mos keladi va fBQNNning suv muhitidagi tabiatini tushunishimizda yordam beradi.

Xulosalar. Ushbu MD tadqiqot ishida toza va fBQNNning suv muhiti bilan o'zaro ta'siri mexanizmlari atomar darajada tadqiq etildi. Olingan natijalar vakuum va suv muhitidagi BQNNda bitta funksional guruhga to'g'ri keluvchi bog'lanish energiyasi funksional guruhlar sonining ortishi bilan deyarli o'zgarishsizligini ko'rsatdi. Bu esa BQNNning yetarlicha uzun qilib tanlanganligi va chetlarida vodorod atomlari mavjud bo'lmashligi orqali tushuntirildi. Simulyatsiya natijalari yana shuni ko'rsatdiki, funksional guruhlar sonining ortishi ular bilan suv molekularlari orasidagi o'zaro ta'sir energiyasining vodorod bog'lari tufayli ortishiga olib keladi. fBQNN bilan suv molekularlari orasidagi o'zaro ta'sirning kuchayishi, o'z navbatida, fBQNN eruvchanligining oshishiga, bu esa uning sitotoksikligi kamayishiga olib keladi.

Tashakkurnoma. Ushbu tadqiqot ishi O'zbekiston Respublikasi Innovatsion rivojlanish vazirligi tomonidan moliyalashtirilgan F-FA-2021-512 fundamental loyiha doirasida amalga oshirildi. Modellashtirish ishlari O'zR FA Ion-plazma va lazer texnologiyalari institutidagi NanoSim guruhi tomonidan tashkil etilgan FISTUZ superkompyuterlar klasteri yordamida bajarildi.

ADABIYOTLAR

1. N.S. Kasáková et al., *Carbon nanostructures, nanolayers, and their composites*, J. Nanomater. 11, 2021, 9, 2368.
2. G. Rahman et al., *An Overview Of The Recent Progress In The Synthesis And Applications Of Carbon Nanotubes*, C–Journal of Carbon Research 5, 2019, 1, 3.
3. X. Liu et al., *Understanding the interaction of single-walled carbon nanotube (SWCNT) on estrogen receptor: A combined molecular dynamics and experimental study*, Ecotoxicol. Environ. Saf. 172, 2019, 373.
4. F. Zamani et al., *In "Nanostructures for Drug Delivery"*, Elsevier 2017, 239.
5. M. Kamel et al., *Assessment of the adsorption mechanism of Flutamide anticancer drug on the functionalized single-walled carbon nanotube surface as a drug delivery vehicle: An alternative theoretical approach based on DFT and MD*, Appl. Surf. Sci. 434, (2018), 492.
6. M. Sheikhi et al., *Adsorption properties of the molecule resveratrol on CNT (8, 0–10) nanotube: geometry optimization, molecular structure, spectroscopic (NMR, UV/Vis, excited state), FMO, MEP and HOMO-LUMO investigations*, J. Mol. Struct. 1160, 2018, 479.
7. M. Lotfi et al., *Comprehensive quantum chemical insight into the mechanistic understanding of the surface functionalization of carbon nanotube as a nanocarrier with cladribine anticancer drug*, Appl. Surf. Sci. 462, 2018, 720.
8. H. Liu et al., *Translocation of Single-Stranded DNA Through Single-Walled Carbon Nanotubes*, Science 327, 2010, 5961, 64.
9. Ch.Y. Lee et al., *Coherence resonance in a single-walled carbon nanotube ion channel*, Science 329, 2010, 5997, 1320.
10. J. Geng et al., *Stochastic transport through carbon nanotubes in lipid bilayers and live cell membranes*, Nature 514, 2014, 612.
11. L. Liang et al., *DNA fragment translocation through the lipid membrane assisted by carbon nanotube*, Int. J. Pharm. 574, 2020, 118921.
12. X. Yang et al., *Multi-functionalized single-walled carbon nanotubes as tumor cell targeting biological transporters*, J Nanopart Res 10, 2008, 815.
13. A. De La Zerda et al., *Carbon nanotubes as photoacoustic molecular imaging agents in living mice*, Nature Nanotech 3, 2008, 557.
14. N.W. Shi Kam et al., *Nanotube molecular transporters: internalization of carbon nanotube– protein conjugates into mammalian cells*, J. Am. Chem. Soc. 126, 2004, 22, 6850.
15. D.B. Warheit et al., *Comparative Pulmonary Toxicity Assessment of Single-wall Carbon Nanotubes in Rats*, J. Toxicol. Sci. 77, 2004, 1, 117.
16. K.R. Karnati et al., *Understanding the co-loading and releasing of doxorubicin and paclitaxel using chitosan functionalized single-walled carbon nanotubes by molecular dynamics simulations*, Phys. Chem. Chem. Phys. 20, 2018, 14, 9389.
17. W.A. Scrivens et al., *Potent solvents for C₆₀ and their utility for the rapid acquisition of ¹³C NMR data for fullerenes*, Chem. Commun. 15, 1993, 1207.
18. R.S. Ruoff et al., *Solubility of fullerene (C₆₀) in a variety of solvents*, J. Phys. Chem. 97, 1993, 3379.
19. B. Koh et al., *Mechanisms of Carbon Nanotube Aggregation and the Reversion of Carbon Nanotube Aggregates in Aqueous Medium*, J. Am. Chem. Soc. 30, 2014, 36, 10899.
20. A. Casey, *Single walled carbon nanotubes induce indirect cytotoxicity by medium depletion in A549 lung cells*, Toxicol. Lett. 179, 2008, 2, 78.
21. A.A. Shvedova et al., *Mechanisms of pulmonary toxicity and medical applications of carbon nanotubes: Two faces of Janus?*, Pharmacol. Ther. 121, 2009, 192.

22. C.W. Lam et al., *Pulmonary toxicity of single-wall carbon nanotubes in mice 7 and 90days after intratracheal instillation*, J. Toxicol. Sci. 77, 2004, 126.
23. R. Wang et al., *Cytotoxicity screening of single-walled carbon nanotubes: detection and removal of cytotoxic contaminants from carboxylated carbon nanotubes*, Mol. Pharm. 8, 2011, 4, 1351.
24. R. Singh et al., *Binding and condensation of plasmid DNA onto functionalized carbon nanotubes: toward the construction of nanotube-based gene delivery vectors*, JACS 127, 2005, 12, 4388.
25. A. Bianco et al., *Biomedical applications of functionalised carbon nanotubes*, Chem. Commun 5, 2005, 571.
26. M. Prato et al., *Functionalized carbon nanotubes in drug design and discovery*, Acc. Chem. Res. 41, 2008, 1, 60.
27. N.W.S. Kam et al., *Carbon nanotubes as intracellular protein transporters: generality and biological functionality*, JACS 127, 2005, 16, 6021.
28. M. Mananghaya et al., *Theoretical investigation of the solubilization of COOH-functionalized single wall carbon nanotubes in water*, J. Mol. Liq. 215, 2016, 780.
29. K.K. Jain, *Advances in use of functionalized carbon nano-tubes for drug design and discovery*, Expert Opin Drug Discov. 7, 2012, 11, 1029.
30. A.R. Kiran et al., *Carbon nanotubes in drug delivery: Focus on anticancer therapies*, J. Drug Deliv. Sci Technol. 59, 2020, 101892.
31. S. Lokavee et al., *Molecular Dynamics Simulation of Bi-Carboxyl Sidewall Functionalized Single-wall Carbon Nanotubes in Water*, Adv. Mat. Res. 1131, 2016, 106.
32. A. C. T. van Duin et al., *ReaxFF: a reactive force field for hydrocarbons*, J. Phys. Chem. A 105, 2001, 9396.
33. M. Yusupov et al., *Reactive molecular dynamics simulations of oxygen species in a liquid water layer of interest for plasma medicine*, J. Phys. D: Appl. Phys. 47, 2014, 025205.
34. U. Khalilov et al., *Molecular evidence for feedstock-dependent nucleation mechanisms of CNTs*, Nanoscale Horiz. 4, 2019, 674.
35. C. Zou et al., *Molecular Dynamics Simulations of the Effects of Vacancies on Nickel Self-Diffusion, Oxygen Diffusion and Oxidation Initiation in Nickel, Using the ReaxFF Reactive Force Field*, Acta Mater. 83, 2015, 102.
36. H.J.C. Berendsen et al., *Molecular dynamics with coupling to an external bath*, J. Chem. Phys. 81, 1984, 8, 3684.
37. R.A. Bell et al., *Does water dope carbon nanotubes?*, J. Chem. Phys. 141, 2014, 16, 164703.



Baxshillo OLIMOV,

O'zbekiston pedagogika fanlari ilmiy tadqiqot instituti professori v.v.b., f.-m.f.n
Tel. 97.755.13.32

O'zMu Fizika fakulteti professori, f.-m.f.d. S.Polvonov taqrizi asosida

FROM THEORY TO PRACTICE

Abstract

This article provides brief information on high temperature superconducting materials. Several proposals have been made in their application of physics as laboratory work, and examples have been given in their use in practice.

Keywords: physics high, low, temperature, superconducting, field, signal, state, texture.

NAZARIYADAN AMALIYOTGA

Аннотация

Ushbu maqolada yuqori haroratli o'ta o'tkazuvchi materiallar to'g'risida qisqacha ma'lumotlar berilgan. Ulardan fizika laboratoriya ishlari sifatida qo'llanishida bir nechta takliflar va amaliyotda foydalanishda namunalar keltirilgan.

Kalit so'zlar: fizika, yuqori, past, harorat, o'ta o'tkazuvchi, maydon, signal, holat, xossa.

ОТ ТЕОРИИ К ПРАКТИКЕ

Аннотация

В этой статье представлена краткая информация о высокотемпературных сверхпроводящих материалах. Из них даны несколько предложений по применению физики в качестве лабораторных работ и приведены примеры их применения на практике.

Ключевые слова: высокая, низкая, температура, сверхпроводимость, поля, сигнал, состояние, физика, свойства.

Kirish. Ta'lim sohasida amalga oshirilayotgan keng ko'llamli islohotlar tizimida faoliyat yuritayotgan pedagog – kadrlarning kasbiy kompetensiyalarni rivojlantirishni hozirgi zamon zaruriyatiga aylanayotganligini ko'rsatmoqda. Mazkur muammoni yechishda ta'lim muassalarida olib boriladigan amaliy mashg'ulotlar alohida o'ringa ega.

Fizik qonunlar, hodisalar va jarayonlarning mohiyatini atroflicha tushunish va tushuntirish uchun ularni albatta amaliyotda sinab ko'rish kerak. Fan va texnikaning kundan - kunga rivojlanib borishi, ta'lim sohasiga axborot va pedagogik texnologiyalarning kirib kelishi fizika fan o'qituvchilari uchun ham tegishlidir.

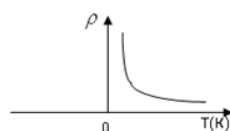
Ta'lim jarayonida o'quvchilarni fan, texnika yutuqlari bilan tanishtirishda laboratoriya ishlarining o'rni muhim. Bu o'z o'rnida o'qish samaradorligini yanada oshirishga yordam beradi. Fizika fanining hozirgi global va dolzarb muammolariga: o'ta o'tkazuvchi, nanotexnologiya, nanomateriallarni olish, quyosh energiyasidan foydalanish va boshqa shunga o'xshash mavzularni misol qilib olish mumkin. Yuqorida keltirilgan muammolar to'g'risida gapirishdan oldin, biz umumta'lim, o'rta maxsus kasb-hunar ta'limi va oliy ta'lim fizika kurslarida o'tkazgich va yarim o'tkazgichlarning solishtirma qarshiligining haroratga bog'liqligi va ularni mexanizmini yana bir bor eslab o'tishni lozim deb topdik.

Mavzuga oid adabiyotlarning tahlili. Umuman o'tkazuvchanlik nuqtai nazardan qaralsa metallar quyidagi turlarga bo'linadi:

1. Umuman tok o'tkazmaydigan materiallar (Izolyatorlar);
2. Yarim o'tkazgichlar;
3. O'tkazgichlar;
4. O'ta o'tkazgichlar:
 - a) Past temperaturali o'ta o'tkazgichlar;
 - b) Yuqori temperaturali o'ta o'tkazgichlar (YUTO'O').

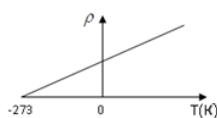
Umuman tok o'tkazmaydigan materiallarga rezina, havo, disterlangan suv, shisha va boshqa elementlar kiradi.

Yuqorida keltirilgan materiallarni asosiy fizik xossalardan biri bu temperaturani solishtirma qarshiligiga bog'liqligidir.



1-rasm

1. Yarim o'tkazgichlarda bu 1-rasmda keltirilgan bog'anishga bo'ladi ya'ni temperatura oshishi bilan solishtirma qarshiligi kamayib borishini ko'rasiz. Bu o'z navbatida kerakli nazariy tushunchalar bilan tushuntiriladi.



2-rasm

2. Endi o'tkazgichlarga kelsak, o'tkazgichlarga D.I Mendeleyev davriy sistemadagi ko'pchilik elementlari kiradi. Eng qizig'i shundaki, o'tkazgich temperaturasi solishtirma qarshiligiga bog'liqlik grafigiga etibor berilsa, 2-rasmda ko'rsatilgandek bog'lanishga ega. Temperatura oshishi bilan solishtirma qarshiligi monoton ravishda oshib boradi. Bu esa yarim o'tkazgichlarga nisbatan teskari effektga ega. Bu ham fizik nuqtai nazardan to'liq o'z ma'nosiga ega va mexanizmi to'liq tushuntiriladi.

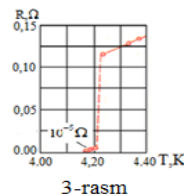
Bizga qiziqarli bo'lgan xuddi shunday bog'lanish o'tao'tkazuvchi materiallarga qanday bo'ladi.

Tadqiqot metodologiyasi.

3. X Kamerling - Onnes tajribasi

a) Past temperaturali o'tao'tkazuvchi materiallar.

Bu hodisani 1911 yilda Niderland olimi X Kamerling - Onnes tajribada kuzatgan. X Kamerling - Onnes asosan o'ta toza qo'rg'oshinni olib xona haroratidan boshlab, suyuq geliy haroratgacha sovitadi va qarshilikning haroratga bog'liqligini o'rganadi.



3-rasm

3-rasmda X. Kamerling Onnesning tajribasidan olingan natija keltirilgan.

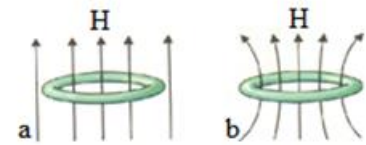
Juda past haroratlarda (4K) ba'zi metal va qotishmalar elektr tokiga qarshilik ko'rsatmay qo'lar ekan. X Kamerling - Onnes bunday materiallarni past temperaturali **o'tao'tkazgichlar** (birinchi tur) deb ataladi. Tajribada Hg uchun o'tao'tkazuvchi harorati 4,2Kga to'g'ri kelishini tasdiqlaydi. Bu qo'rg'oshin uchun kritik harorat deb ataladi, T_c (kritik harorat) bilan belgilanadi va qarshiligi $10^{-5}\Omega$ teng bo'lganini kuzatadi [1].

Shu davrda bunday bog'lanish faqatgina idial va past haroratli o'tao'tkazgichlarda namayon bo'lishi tasdiqlanadi. U berk zanjirda o'tao'tkazuvchi materiallar tok yo'qotmasdan, xohlagancha uzoq vaqt oqib turishi mumkinligi tajribada ko'rsatadi.

Keyinchalik o'tao'tkazuvchanlik faqat o'ta toza materiallardagina emas, balki ko'plab ximiyaviy birikmalar, qotishmalarda va yuqori temperaturalarda ham kuzatiladi; shu bilan birga o'tao'tkazuvchan birikma tarkibiga kiruvchi elementlarning o'zi ham o'tao'tkazgich bo'lmisligi mumkin. Bunday birikmalardan tayyorlangan namuna o'tao'tkazuvchan holatda quyidagi keltirilgan ajoyib xossalarga ega bo'lar ekan:

Birinchidan, o'tao'tkazgichlarda bir marta uyg'otilgan elektr toki tok manbaisiz uzoq muddat mavjud bo'lishi mumkin. Buning sababi shundaki qarshilik yo'q bo'lib qolgan uchun tokning so'nish vaqti $T=L/R$ nihoyatda katta bo'ladi.

Ikkinchidan o'tao'tkazuvchan holatda modda ichida magnit induksiya har doim nolga teng bo'ladi. O'tao'tkazgichdan qilingan biror jismni avval sovitib, o'tao'tkazuvchan holatga keltirib, so'ng uni induksiyasi $B_a = \mu_0 H_a$ ga teng bo'lgan tashqi magnit maydonga kiritib, magnit maydon ulanganda o'tao'tkazgichda qo'shimcha $B_i = \mu_0 H_i$ induksiya hosil qiluvchi induksion toklar paydo bo'ladi (4a.rasm). Bu qo'shimcha induksiya Lens qonuniga muvofiq V_a tashqi induksiyaning kompensasiyalaydi. Odatdagi o'tkazgichda induksion toklar darhol so'nadi va faqat magnitlovchi g'altak yuzaga keltirgan oqimgina qoladi. O'tao'tkazgich bo'lgan holda esa kompensasiyalovchi toklar mutlaqo so'nmaydi; shuning uchun jism ichida natijaviy induksiya hamma vaqt $B = V_a + B_i = 0$ bo'ladi. Tashqi fazoda natijaviy induksiya chiziqlari 4b rasmda ko'rsatilgandek bo'ladi: ularni jism o'zidan itaradi va ular jismni aylanib o'tadi.



4-rasm

O'tao'tkazuvchan holatning bu xossasi faqat elektr qarshilikning yo'qolishi bilangina bog'liq emas. Shunday o'tkazgichni ko'z oldimizga keltiraylikki, uning normal metallardan yagona farqi qarshiligining nolga intilishi bo'lsin.

O'tao'tkazuvchanlikning **uchinchi** o'ziga xos xususiyati magnit maydonning o'tao'tkazuvchanlik holatini buzish xossasidir. O'tao'tkazgich o'tao'tkazuvchan holatga o'tish haroratidan past haroratga qancha kuchli sovitilgan bo'lsa, o'tao'tkazuvchanlik yo'qoladigan "kritik" magnit maydon shuncha katta bo'ladi [3]. O'tao'tkazuvchanlik holatiga o'tish haroratida maydon nolga teng bo'ladi. O'tao'tkazuvchanlikni buzuvchi magnit maydon bo'lib o'tao'tkazgichdagi tokning o'zining kriteriyoni ham xizmat qilishi mumkin. Tok kuchi sim sirtidagi magnit maydon kritik qiymatiga yetadigan kattalikka erishganda o'tao'tkazuvchanlik yo'qoladi. Tokning bu maksimal (kritik) kuchi uning o'tish haroratida nolga teng bo'ladi va harorat pasaygan sari ortib boradi.

b) Yuqori temperaturali o'tao'tkazuvchi materiallar.

1986 yil Bednors va Myullerlar tomonidan qattiq jismlar fizikasiga yana bir yangilik kiritishdi. O'tao'tkazgichlarni yangi bir yangi turi, ya'ni yuqori temperaturali o'tao'tkazuvchan materiallarni olishga muyaassar bo'lishdilar (**ikkinchi tur**). YUTO o'tao'tkazuvchanlikni o'ziga xos xususiyati magnit maydonning o'tao'tkazuvchanlik holatini buzish xossasidir. O'tao'tkazgich o'tao'tkazuvchan holatga o'tish haroratidan past haroratga qancha kuchli sovitilgan bo'lsa, o'tao'tkazuvchanlik yo'qoladigan "kritik" magnit maydon shuncha katta bo'ladi [3]. O'tao'tkazuvchanlik holatiga o'tish haroratida maydon nolga teng bo'ladi. O'tao'tkazuvchanlikni buzuvchi magnit maydon bo'lib o'tao'tkazgichdagi tokning o'zining kriteriyoni ham xizmat qilishi mumkin. Tok kuchi sim sirtidagi magnit maydon kritik qiymatiga yetadigan kattalikka erishganda o'tao'tkazuvchanlik yo'qoladi. Tokning bu maksimal (kritik) kuchi uning o'tish haroratida nolga teng bo'ladi va harorat pasaygan sari ortib boradi.

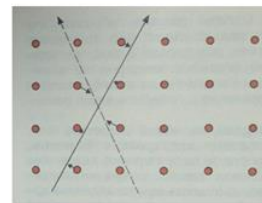
Elektron – fonon o'zaro ta'sirlashuv.

Eslatib o'tamiz, fononlar metallning kristalli panjara to'liqini. Shu bilan birga, biz ularni kvant mexanikasidan bilamizki bu - zarracha sifatida qabul qilingan. Bundan tashqari, biz ideal kristalli panjara elektronni sezmasligidan, shuning uchun to'liqini kristalli panjara elektronning tarqalishi fononlarda tarqalish deb hisoblanishi mumkin.

Elektron panjara to'liqinida tarqalganda yoki elektron fonon bilan to'qnashganda, bu zarrachalarning harakati energiyasi, tezligi va yo'nalishi o'zgaradi, lekin energiya tejash va momentum qonunlari kuzatiladi. Misol tariqasida ikkita billiardni o'zaro to'qnashuvini tasavvur qilishimiz mumkin, ammo elektron va fonon tabiatda juda ko'p turli zarralar va shuning uchun aniqroq boshqa tasvirdir:

Kuper juftliklarini hosil bo'lishi.

Bu qanday sodir bo'lishini tushinish uchun, elektron tomonidan uyg'otilgan fonon harakatini kuzatamiz (5-rasm). Shunday qilib, elektron panjara orqali uchib o'tadi va panjara tugunlarida joylashgan ionlarning tebranishiga sabab bo'ladi. Elektron manfiy zaryadga ega va ionlar musbat zaryadlangan. Shuning uchun ionlar uchayotgan elektronga bir oz tortilgan bo'ladi. Ammo ionlar elektronga qaraganda ancha og'ir, shuning uchun ularning harakati sekinroq. "Elektron allaqachon" uzoq vaqt oldin uchib o'tgan va ionlar u turgan joyga qadar tortilgan edi. Bu shuni anglatadiki, bu joyda kichik ortiqcha musbat zaryad (bir kiska vaqt) hosil bo'lgan va allaqachon bu joyda o'tgan yana bir elektron uni sezadi va harakatini o'zgartiradi, bu joyga jalb qilinadi.



5-rasm

Shunday qilib, fononlar elektronlar orasidagi zaif tortishishlarni yaratadi. Ammo uzoq masofalardagi elektronlar bir-biri bilan tortishadi. Axir, ikkinchi elektronni ionlar bilan tortishishi uchun birinchi elektron ancha uzoqqa uchib ketishi kerak, aks holda uning manfiy zaryadlari barcha tortishishlarni to'xtatadi. Yaqin atrofdagi elektronlar, Kulon qonuniga ko'ra, ikkita manfiy zaryadga ega bo'lishi kerak, va juda uzoq masofalarda ular fononlar tufayli ta'sir qilinadi. Uzoq masofalarda ikki elektronning repulsatsiyasi to'sqinlik qilmaydi, chunki atrofida va har ikkala elektron o'rtasida ko'plab ijobiy ionlar va boshqa elektronlar mavjud va barcha tortishish va tortish kuchlari tenglashadi.

Elektronlar orasidagi tortishishini Amerka olimlari J.Barden, L. Kuper va J. Shriffer tomonida tushuntiriladi. O'z o'rnida Kuper sharafiga kuper juftliklari deb atalgan.

Hozirgi zamon nazariyasida o'ta o'tkazuvchanlik hodisasi Kuper juftlaridan tashkil topgan elektronlar kollektivining hosil bo'lishi bilan tushuntiriladi (elektronlarnig juft-juft birlashmalarini 1956 yil L.Kuper tomonida tadbiq qilingan)?

Savol nima uchun o'ta o'tkazgichlarda elektronlar juftlashadi? Axir, Kulon qonuniga muvofiq, ular itarilishi kerak-ku. Sabab elektronlarning kristal panjara bilan o'zaro ta'sirlashuvda ekan. Elektronlar kristal panjara ionlarini o'zaro tortadi va go'yo musbat zaryadlardan tashkil topgan "po'stin" bilan o'ralgan. Natijada elektronlar orasidagi o'zaro ta'sir ishorasi o'zqarishi mumkin va ular bir-biriga tortiladi. (BKSha nazariysi)

Tahlil va natijalar. YUTO'O'larni maktab laboratoriya xonalarida tayyorlash.

Biz quyida fizika, ximiya o'qituvchilari yoki krujok rahbarlari yordamida yangi bir yo'nalish o'ta o'tkazuvchan namunalarni tayyorlashni va ularni ayrim magnit xossalarni o'rganishni taklif qilmoqdamiz. Bunday materallarni maktab sharoitida olish bilan chet el hamkasblarimiz allaqachon shug'illana boshlaganlar. Albatta, kimki o'zining qiziqishi bilan shug'illanar ekan unda u o'zining maqsadiga tezroq erishadi. Yuqoridagilarga asoslangan holda, quyida biz yuto'o' namunalarni tayyorlashni retseptini keltiramiz. Albatta hozircha bizning hamma maktablarimizda ximikatlar va namuna tayyorlash uchun o'lchov uskunalar yo'qligi sababli ularni amalga oshirishga ozgina qiynalamiz, lekin bunday materallarni tayyorlashda kasb-hunar kollejlari imkoniyatlar bor. Yuqori temperaturali o'ta o'tkazuvchan namuna (Y-Ba-Cu-O)lar qanday qilib tayyorlanadi. Buning uchun ittriy okisi Y_2O_3 , uglokis bariy $BaSO_3$ va mis okisi SuO lardan foydalanamiz.

YUTO'O' namunalarni tayyorlash retsepti.

1. 1,13 gr ittriy okisi, 3,95 gr bariy va 2,39 gr mis oksidi olamiz.
2. Oldin bu komponentlar yaxshilab qo'shiladi, stupkaga solib yoziladi va poroshok holiga olib kelinadi.
3. Tayyorlangan aralashmani 950°S haroratda 12 soat pechkaga solib qizdiriladi.
4. Namuna sovitilgandan keyin yana maydalanadi.
5. Parashok ko'rinishidagi namunani tabletkaga holiga olib kelinadi (balki boshqacha forma kerak bo'lsa, shunday formada).
6. Tabletkaga ko'rinishiga keltirilgan namunani yana o'sha haroratda va shu vaqt davomida kislorod bilan boyitish yordamida qizdiriladi.
7. Tayyorlangan namuna 100 grad/soatdan katta bo'lmagan tezlikda sovutilishi kerak.
8. Yuqoridagi retsept asosida tayyorlangan o'ta o'tkazuvchan (Y-Ba-Cu-O) namuna og'irligi 7gr atrofida bo'ladi. Yoki xuddi shunday diametri 1sm va qalinligi 1mm dan 5 ta tabletkaga tayyorlash mumkin. Bunday retsept asosida namunani tayyorlashda o'zining ayrim qiyinchiliklari ham bor, lekin oldindan aniq bo'lgan retsept asosida tayyorlashni ma'qul deb bilamiz.

O'ta o'tkazuvchan materallarni rangi, uning sifatini ko'rsatadigan ko'rsatkichdir. Agar tayyorlangan keramika rangi yashilroq rangda bo'lsa, unda tayyorlash uncha yaxshi olib borilmagan, bunday holatda namunalarni boshqattan tayyorlash kerak.

Yuqori haroratli o'ta o'tkazgichlar asosida laboratoriya ishlarini tashkillashtirish.

Ishdan maqsad: yuqori haroratli o'ta o'tkazuvchanlik haqida tasavvurga ega bo'lish va ularning magnit xossalarni tajribada kuzatish. Laboratoriya ishini bajarish davomida shu yo'nalish haqida umumta'lim maktab o'quvchilarga ozgina bo'lsa ham ma'lumot berish va shunga o'xshash yangi kashfiyotlar bilan tanishtirib turishdir[2].

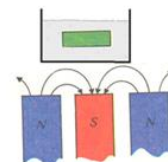
Laboratoriya ishlarini o'quvchilarning o'zlari mustaqil ravishda bajarishlari ham mumkin. Quyida ana shu laboratoriya ishlaridan biri misol tariqasida keltirilgan. Bu laboratoriya ishi yangi, shu bilan birga DTSni takomillashtirilgan variantiga to'liq mos keladi. Eng muhimi qiziqarli va hayotiy, o'quvchilarning bilim darajalari asosida tanlab olingan.

Ishning bajarilish tartibi:

a). Namuna tayyorlangandan so'ng o'ta o'tkazgich holatiga o'tdimi yoki normal holatdalgini aniqlash [4].

Agar namuna to'ri to'rtburchan shaklida tayyorlangan bo'lsa, unda tajriba quyidagicha amalga oshiriladi:

1. Magnitlarni bir nechtasini 6-ramda ko'rsatilgandek qutblari bilan joylashtiriladi.

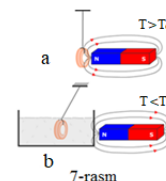


6-rasm

3. Penoplasdan tayyorlangan idishga suyuq azot quyib namunani ham idish ichiga tushirig.
4. O'zgaras magnitlarni 6- rasmda ko'rsatilganidek joylashtiring.
5. Suyuq azot solingan idishni namuna bilan birgalikda magnitlardan ma'lum balandlikda joylashtiring.
6. Ma'lum vaqtdan keyin namuna suyuq azot solingan idish tubidan yuqoriga ko'tariladi va mualliq turadi (o'tao'tkazuvchanlik holat).
7. Magnitlarni o'z o'qi atrofida aylantirilganda namuna ham aylansa u o'tao'tkazgich holatiga o'tgan bo'ladi.

b) laboratoriya ishi

1. Uzunligi 40-50sm bo'lgan ingichka ipga yuqori haroratli o'ta o'tkazgichni (keramika bublik shaklida) mahkam boylab, shtativga osing.
2. O'zgaras magnitni ipga osilgan o'ta o'tkazuvchan namunaga yaqinlashtiring.
3. Namuna bilan o'zgaras magnit maydon o'rtasida o'zaro ta'sirlashish kuzatilmaydi $T > T_c$ (7a- rasm).
1. Magnitni namunadan uzoqlashtiring.
2. Namunani suyuq azotga tushirib, magnitni yaqinlashtiring.
3. Namunani oldingi holatiga nisbatan ma'lum burchakka og'ishini kuzatasiz $T < T_c$ (7b- rasm).
4. Suyuq azot solingan idishni namunadan ma'lum masofaga uzoqlashtiring.
5. Bir necha sekunddan keyin namuna magnitga yaqinlashganini ko'rasiz $T > T_c$ (7a-rasm).
6. Tajribani bir necha marta takrorlang va bu hodisaning fizik mohiyatini tushuntiring.



Xulosa. Shaxsga yo'naltirilgan ta'lim sharoitida faoliyat yuritadigan har bir fan mutaxasisi, jumladan fizika o'quvchilari kasbiy kompetensiyalarni egallamasdan turib aniq natijalarga erishish juda qiyin. Aynigsa bo'lg'usi fizika o'qituvchilarini amaliy mashg'ulotlarni mustaqil ravishda tanlashga, o'zlari tashkil qilishda yoki bajarib o'rgatishlari, ularda kasbiy kompetensiyalarni shakllanishda muhim o'rin tutadi.

ADABIYOTLAR

1. Шмидт В. Введение в физику сверхпроводников.- М.: Наука .-1982.
2. Алиев М.К., Муминов Т.М., Олимов Б.А., Холбаев И. Свойства высокотемпературных сверхпроводящих керамик в слабых магнитных полях. Доклад II -школы молодых ученых ТашГУ, 1988, 27 мая.
3. Дмитренко И.М. В мире сверхпроводимости.-Киев: Наукова думка. -1981.
4. Olimov B.A. va boshqalar. O'ta o'tkazuvchi materiallarni magnit xossalarini o'rganish. Guvohnoma Intellektual mulk ob'ekti saqlashga kiritilganligi to'g'risida. Ro'yhat soni № 3987.-2022.



Сатимбой ПАЛВАНОВ,
Профессор Национальный университет Узбекистана
Гўзал АТАЖАНОВА,
Базовый докторант Национальный университет Узбекистана
Исобеков ХОЛБАЕВ,
Профессор Национальный университет Узбекистана
E-mail: fregatova@gmail.com

Рецензент: профессор Э. Бозоров

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ ИЗОМЕРНОГО СОСТОЯНИЯ В РЕАКЦИИ (γ, n) НА ЯДРАХ С $108 \leq A \leq 144$

Аннотация

Методом наведенной активности исследована возбуждение изомерного состояния $11/2^-$ ядер с $108 \leq A \leq 144$ в фотонейтронной реакции (γ, n) при максимальной энергии тормозного излучения $E_{\gamma\max} = 30$ МэВ. Измерены изомерные отношения выходов реакций $^{110}\text{Pd}(\gamma, n)^{109m,g}\text{Pd}$, $^{116}\text{Cd}(\gamma, n)^{115m,g}\text{Cd}$, $^{130}\text{Te}(\gamma, n)^{129m,g}\text{Te}$, $^{138}\text{Ce}(\gamma, n)^{137m,g}\text{Ce}$, $^{142}\text{Nd}(\gamma, n)^{141m,g}\text{Nd}$. Также определены интегральные сечения фотоядерных реакций типа $(\gamma, n)^m$ на ядрах $^{134,136,138}\text{Ba}$ и их изомерные отношения. Результаты сравниваются с данными других работ.

Ключевые слова: активность, изомер, ядро, ядерная реакция, фотоядерная реакция, изотоп, радиоактивность, сечение, спин, нейтрон.

$108 \leq A \leq 144$ ЯДРОЛАРДА (γ, n) РЕАКЦИЯ НАТИЖАСИДА ИЗОМЕР ҲОЛАТЛАР УЙҒОНИШИНИ ЎРГАНИШИ

Аннотация

Тормозланиш нурланишларнинг $E_{\gamma\max} = 30$ МэВ максимал энергиясида масса сони $108 \leq A \leq 144$ бўлган ядролардаги (γ, n) фотонейтрон реакцияларда $11/2^-$ изомер ҳолатлар уйғонишини индукцияланган активлик методи билан тадқиқ қилинган. $^{110}\text{Pd}(\gamma, n)^{109m,g}\text{Pd}$, $^{116}\text{Cd}(\gamma, n)^{115m,g}\text{Cd}$, $^{130}\text{Te}(\gamma, n)^{129m,g}\text{Te}$, $^{138}\text{Ce}(\gamma, n)^{137m,g}\text{Ce}$, $^{142}\text{Nd}(\gamma, n)^{141m,g}\text{Nd}$ реакциялар изомер чиқишлар нисбати ўлчанган. Шунингдек, $^{134,136,138}\text{Ba}$ ядросидаги $(\gamma, n)^m$ турдаги реакцияларнинг интеграл кесимлари ва уларнинг изомер нисбатлари аниқланган. Олинган натижалар бошқа ишларнинг натижалари билан солиштирилган

Калит сўзлар: активлик, изомер, ядро, ядро реакцияси, фотоядро реакцияси, изотоп, радиоактивлик, кесим, спин, нейтрон.

INVESTIGATION OF THE EXCITATION OF THE ISOMER STATE IN THE REACTION (γ, n) ON NUCLEI $108 \leq A \leq 144$

Annotation

The excitation of the isomeric state of $11/2^-$ nuclei with $108 \leq A \leq 144$ in the photoneutron reaction (γ, n) at the maximum bremsstrahlung energy $E_{\gamma\max} = 30$ MeV was studied by the method of induced activity. The isomeric ratios of the yields of the reactions $^{110}\text{Pd}(\gamma, n)^{109m,g}\text{Pd}$, $^{116}\text{Cd}(\gamma, n)^{115m,g}\text{Cd}$, $^{130}\text{Te}(\gamma, n)^{129m,g}\text{Te}$, $^{138}\text{Ce}(\gamma, n)^{137m,g}\text{Ce}$, $^{142}\text{Nd}(\gamma, n)^{141m,g}\text{Nd}$. The integral cross sections of photonuclear reactions of the $(\gamma, n)^m$ type on nuclei $^{134,136,138}\text{Ba}$ and their isomeric ratios are also determined. The results are compared with data from other works.

Keywords: activity, isomeric, nuclear of atom, nuclear reaction, photonuclear reaction, isotopes, radioactivity, cross section, spin, neutron.

Относительная вероятность возбуждения изомерных и основных состояний конечного ядра определяется как изомерные отношения выходов (Y_m/Y_g) или сечения (σ_m/σ_g) ядерных реакций. Сопоставление экспериментальных данных по изомерному отношению с результатами расчета основного на статистической теории позволяет получить информацию о спиновой зависимости плотности уровней ядра [1]. Важное значение имеет изучение образования изомерных состояний ядер в ядерных реакциях с различными бомбардирующими частицами, который позволяет получать сведения о механизмах ядерных реакций и о свойствах возбужденных состояний атомных ядер [2]. Особенно интересным является изучение ядерных реакций типа $(n, 2n)$ и (γ, n) в результате которых образуется одинаковое ядро [3].

В настоящей работе методом наведенной активности исследована возбуждение изомерного состояния $11/2^-$ ядер с $108 \leq A \leq 144$ в реакции (γ, n) при максимальной энергии тормозного излучения $E_{\gamma\max} = 30$ МэВ. Причина выбора максимальной энергии тормозного излучения 30 МэВ связано с тем, что большинство экспериментальных работ по изучению выходов фотоядерных реакций для γ -активационного анализа проводили при такой энергии. Кроме того, при этой энергии изомерные отношения выходов и сечений реакций для большинство ядер не проводилось.

Эксперименты проводили на тормозном γ -пучке сильноточного бетатрона СБ-50 НУУз методом наведенной активности. Временные режимы, т.е. время облучения, паузы и измерения выбрали в соответствии с периодом полураспада образующихся радионуклидов. Наведенную активность измерялись полупроводниковым гамма-спектрометром с детектором ДГДК-63В. γ -спектры регистрировались анализатором с 4096 каналами. Энергетическое разрешение спектрометра составляет $\sim 3,5$ кэВ (^{60}Co). γ -спектры мишеней измеряли после паузы 0,5-50 мин в течение 3-120 мин.

Заселенность изомерных m и основных g уровней дочерних ядер идентифицировали по соответствующим γ -линиям. Данные о схеме распада, необходимые для обработки результатов измерений, взяты из работы [4]. Изомерные отношения выходов $d=Y_m/Y_g$ фотоядерных реакций определяли методом сравнения площадей под фотопиками соответствующих γ -линий [5].

В случае реакции (γ, n) на ядрах $^{134,136,138}\text{Ba}$, который основной состояний образующих конечный ядра являются стабильными, изомерные отношений определи как изомерные отношение интегральных сечений реакции $r_{\text{int}} = \sigma_{\text{int}}^m / \sigma_{\text{int}}^g$, где σ_{int}^m - интегральные сечений изомерного состояний, σ_{int}^g - интегральные сечения основного состояний. Данные о интегральные сечения основного состояний были взяты из работы [6]. Интегральные сечений реакции определили через отношений выходов реакции. Причина выбора изотопа Ba для объектом исследована, связана с тем, что свойства стабильных изотопов Ba сильно меняются с изменением числа нейтронов в ядре. Наиболее тяжелый изотоп ^{138}Ba имеет замкнутую нейтронную оболочку ($N=82$), а наиболее легкий ^{130}Ba характеризуется значительной квадрупольной деформацией ($\beta_2=0,23$). Кроме того, в области высшие гигантского дипольного резонанса изомерные отношения сечений реакций $(\gamma, n)^m$ на изотопы Ba не определено.

Полученные результаты приведены в табл. 2. Как видно из табл. 2., наши результаты согласуются в пределах погрешности измерений с данными других работ.

Таблица 3. Изомерные отношения реакции (γ, n) для ядер с $108 \leq A \leq 144$

ФЯР	E_{max} , МэВ	d или g	σ , параметр ограничения спина	Источник
$^{108}\text{Pd}(\gamma, n)^{107m,g}\text{Pd}$	25	$0,054 \pm 0,06^*$		[9]
	30	$0,051 \pm 0,06^*$	3,4	Настоящая работ
$^{110}\text{Pd}(\gamma, n)^{109m,g}\text{Pd}$	20,5	$0,072 \pm 0,06$		[10]
	25	$0,060 \pm 0,07^*$		[9]
	30	$0,067 \pm 0,05$	3,2	Настоящая работа
$^{116}\text{Cd}(\gamma, n)^{115m,g}\text{Cd}$	22	$0,12 \pm 0,02$		[15]
	25	$0,18 \pm 0,02^*$		[9]
	30	$0,14 \pm 0,02$	2,7	Настоящая работа
$^{118}\text{Sn}(\gamma, n)^{117m,g}\text{Sn}$	25	$0,11 \pm 0,02$		[9]
$^{130}\text{Te}(\gamma, n)^{129m,g}\text{Te}$	20	$0,45 \pm 0,06$		[11]
	25	$0,45 \pm 0,05^*$		[9]
	25	$0,49 \pm 0,03$		[12]
	30	$0,48 \pm 0,03$		[15]
	30	$0,47 \pm 0,03$	2,5	[Настоящая работа]
$^{136}\text{Xe}(\gamma, n)^{135m,g}\text{Xe}$	22	$0,10 \pm 0,02$	2,8	[15]
$^{134}\text{Ba}(\gamma, n)^{133m,g}\text{Ba}$	25	$0,17 \pm 0,01^*$		[9]
	30	$0,17 \pm 0,01^*$	2,6	Настоящая работа
$^{136}\text{Ba}(\gamma, n)^{135m,g}\text{Ba}$	25	$0,15 \pm 0,01^*$		[9]
	30	$0,17 \pm 0,01^*$	2,4	Настоящая работа
$^{138}\text{Ba}(\gamma, n)^{137m,g}\text{Ba}$	25	$0,12 \pm 0,01^*$		[9]
	30	$0,11 \pm 0,01^*$	2,6	Настоящая работа
$^{138}\text{Ce}(\gamma, n)^{137m,g}\text{Ce}$	25	$0,12 \pm 0,02$		[12]
	30	$0,13 \pm 0,02$		[12]
	30	$0,12 \pm 0,02$	3,1	Настоящая работа
$^{140}\text{Ce}(\gamma, n)^{139m,g}\text{Ce}$	23,8	$0,182 \pm 0,018$		[14]
	25	$0,190 \pm 0,017$		[12]
	30	$0,201 \pm 0,015$		[12]
	30	$0,201 \pm 0,015$	3,5	Настоящая работа
	31	$0,193 \pm 0,014$		[13]
$^{142}\text{Nd}(\gamma, n)^{141m,g}\text{Nd}$	18	$0,045 \pm 0,003$		[14]
	25	$0,061 \pm 0,010^*$		[9]
	25	$0,043 \pm 0,002$		[12]
	30	$0,045 \pm 0,001$		[12]
	30	$0,046 \pm 0,002$	2,2	Настоящая работа
$^{144}\text{Sm}(\gamma, n)^{143m,g}\text{Sm}$	20,5	$0,044 \pm 0,003$		[10]
	25	$0,047 \pm 0,004^*$		[9]
	30	$0,044 \pm 0,002$	2,6	Настоящая работа

*Приведено значение $r_{\text{int}} = \sigma_{\text{int}}^m / \sigma_{\text{int}}^g$

Для фотоядерных реакций $^{110}\text{Pd}(\gamma, n)^{109m,g}\text{Pd}$, $^{116}\text{Cd}(\gamma, n)^{115m,g}\text{Cd}$, $^{134}\text{Ba}(\gamma, n)^{133m,g}\text{Ba}$, $^{136}\text{Ba}(\gamma, n)^{135m,g}\text{Ba}$, $^{138}\text{Ba}(\gamma, n)^{137m,g}\text{Ba}$ и $^{144}\text{Sm}(\gamma, n)^{143m,g}\text{Sm}$ значений изомерных отношения при $E_{\text{max}} = 30$ МэВ определены впервые.

Все ядер возбуждающий в фотоядерных реакции $^{136}\text{Xe}(\gamma, n)^{135m,g}\text{Xe}$, $^{138}\text{Ba}(\gamma, n)^{137m,g}\text{Ba}$, $^{140}\text{Ce}(\gamma, n)^{139m,g}\text{Ce}$, $^{142}\text{Nd}(\gamma, n)^{141m,g}\text{Nd}$ и $^{144}\text{Sm}(\gamma, n)^{143m,g}\text{Sm}$, имеют одинаковые спины и четности в изомерном и основном состоянии. Кроме того, эти ядер имеют одинаковые число нейтронов т.е. $N=82$.

Для сравнения с экспериментом нами проведены расчет изомерных отношений по статистической модели ядра. Плотность уровней возбужденного ядра оценивалась по формуле [16]:

$$\rho(U, J) = \frac{2J+1}{24\sqrt{2}a^{1/4}U^{5/4}\sigma^3} \cdot \exp\left[2\sqrt{aU} - \frac{(J+1/2)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (2)$$

где σ - параметр ограничения спина, a - параметр плотности уровней, U - энергии возбуждения, под которой понимается эффективная энергия [2],

Улучшить количественное согласие расчетов с экспериментом удалось при фиксации параметра спинового ограничения σ . При этом удовлетворительное согласие достигается при $\sigma = (2 \div 3)\hbar$. Полученные результаты приведены в табл. 2.

Экспериментальные результаты полученные в настоящей работе, могут быть использованы для оценка аналитических возможностей гамма-активационного анализа, при планировании экспериментов по изучению изомерных отношений в фотоядерных реакциях и при изучению механизм реакций.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гангрский Ю.П., Тончев А.П., Балабанов Н.П. // ЭЧАЯ. 1996. Т. 27. Вып. 4. С. 1043.
2. Мазур В.М. // ЭЧАЯ. 2000. Т. 31. Вып. 2. С. 1043.
3. Паланов С.Р. // ЯФ. 2014. Т. 77. № 1. С. 1.
4. C. Lederer, V. Shirley. Table of Isotopes (New York, John Wiley & Sons, Inc., 1978).
5. R. Vanska, R. Rieppo, Nucl. Instrum. Meth. 179, 525(1981).
6. S.S. Dietrich, B.L. Berman, Atomic Data and Nucl. Data Tabl. 38, 199(1988).
7. L. Katz, A.G. Cameron, Can. J. Phys. 29, 518 (1951).
8. S.C. Fultz, R.R. Bramblett, J.T. Candvell, R.R. Harvey, Phys. Rev. 133, 1149(1964).
9. А.Г. Белов, Ю.П. Гангрский, А.П. Тончев, Н.П. Балабанов, Ядерная физика 59, 57(1996).
10. Hong Dac Luc, Tran Duc Theip, Truong Thi An, Phan An. Bulg. J. Phys. 14, 153(1987).
11. Аракелян А.А., Данагулян А.С., Демехина Н.А. – Тезисы докл. Межд. Сов. По ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Л.: Наука, 1992, с.245.
12. С.Р. Палванов, О. Раджабов, Атомная энергия 87, 75(1999).
13. H. Fuchs, R. Kosiek, U. Meyer-Berkhout, Z. Phys. 166, 590(1962).
14. Желтоножский В.А., Мазур В.М., Биган Э.М. Тезисы докл. 41-го сов. по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра (Ленинград, Наука, 1991), с.293.
15. М.Г.Давыдов, В. Г.Магера, А.В. Трухов, Атомная энергия 62, 236, (1987).
16. Белов А.Б., Гангрский Ю.П., Тончев А.П., Балабанов Н.П. Возбуждение изомерных состояний $1h_{11/2}$ в реакциях (γ, n) . // Ядерная физика, 2006, т. 59, № 4, с. 585 – 591



УДК: 612.315.592.3

Якуббай САЙДИМОВ,

к.ф.-м.н., зав. лаб. Научно-исследовательского института
физики полупроводников и микроэлектроники при НУУЗ
E-mail: saydimov56@mail.ru

Файзулла УМАРОВ,

докторант Научно-исследовательского института
физики полупроводников и микроэлектроники при НУУЗ
E-mail: fajzullo.umarov.95@bk.ru

Рецензент: к.ф.-м.н. Тураев А.Р. Филиал федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования "Национальный исследовательский университет "МЭИ" в г. Ташкенте

IRRADIATION OF SINGLE-CRYSTAL SILICON BY PROTON BEAMS WITH ENERGIES FROM 350 TO 650 KEV

Abstract

This paper presents the results of measurements using the Hall effect of the main electrophysical parameters and surface characteristics on a scanning electron microscope (SEM) of irradiated samples in an EG-2 linear accelerator (electrostatic generator) with proton beam energies from 350 to 650 keV depending on the irradiation time (from 15 to 75 minutes).

Key words: electrostatic generator, EG-2, proton irradiation, Hall effect, scanning electron microscope, radiation resistance of materials, monocrystalline silicon.

ОБЛУЧЕНИЕ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ ПУЧКАМИ ПРОТОНОВ С ЭНЕРГИЕЙ ОТ 350 ДО 650 КЭВ

Аннотация

В данной работе приведены результаты измерения с помощью эффекта Холла основных электрофизических параметров и поверхностных характеристик на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) облученных образцов в линейном ускорителе ЭГ-2 (Электростатический Генератор), с энергиями пучков протонов от 350 до 650 кэВ в зависимости от времени облучения (от 15 до 75 мин.).

Ключевые слова: электростатический генератор, ЭГ-2, облучение протонами, эффект Холла, сканирующий электронный микроскоп, радиационная стойкость материалов, монокристаллический кремний.

KREMNIY MONOKRISTALLARINI ENERGIYALARI 350 DAN 650 KEV GACHA BO'LGAN PROTON DASTALARI BILAN NURLANTIRISH

Annotatsiya

Ushbu maqolada energiyasi 350 dan 650 keV gacha bo'lgan proton dastalarining EG-2 chiziqli tezlatkichda (Elektrostatik generator) nurlantirilgan kremniy monokristallarining Holl effekti yordamida asosiy elektrofizik parametrlar va sirt xususiyatlarining skanerlovchi elektron mikroskopida (SEM) foydalangan holda o'lchash natijalari keltirilgan.

Kalit so'zlar: elektrostatik generator, EG-2, proton dastasi, Holl effekti, skanerlovchi elektron mikroskop, materiallarning nurlanish qarshiligi, monokristalli kremniy.

Введение. При производстве полупроводниковых приборов предъявляются жесткие требования к механической прочности, термической и радиационной стойкости пластин кремния. Так как, многие современные полупроводниковые приборы используются в средах радиационных излучений (космические корабли, атомные электростанции, угольные шахты с присутствующим радиационным фоном и т.д.), как известно [1], радиационные излучения являются источником деградации электрофизических параметров полупроводниковых приборов. Поэтому повышение радиационной стойкости полупроводниковых материалов и приборов на их основе и по сей день является актуальным.

Подготовка образцов и методика эксперимента. Для исследования нами были использованы образцы монокристаллического кремния марки КЭФ-40 (ориентация {111}) с удельным сопротивлением $32 \div 42 \text{ Ом} \cdot \text{см}$, концентрация основных носителей заряда составляло $1,2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, Холловская подвижность была равна $1200-1600 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$. Образцы до облучения были подвергнуты механической и химической обработке, с поверхности образцов с помощью шлифовки, на стеклянной подложке с использованием абразивного, был удален слой равной $\sim 100 \text{ мкм}$ со всех сторон образцов. После механических обработок поверхности образцов было проведено химическая обработка. Химическая обработка (травление) является последовательностью химических воздействий на поверхность полупроводника и заключалась в том, чтобы удалить инородные загрязнения с поверхности монокристалла кремния с помощью химических реакций. В начале образцы кипятились в интервале 5-7 минут в толуоле, после чего кипятились в ацетоне более 2 минут. Образцы в азотной кислоте кипятились ровно 10 минут, после в растворе $\text{HF} + (\text{HNO}_3) + \text{CH}_3\text{COOH}$ в соотношении 5:3:5, так же образцы кипятились в химической смеси «царская водка» в течение 3 минут, после чего образцы были помещены в сосуд центрифуги с HF и прополаскивались. После каждой стадии химического воздействия образцы промывались дистиллированным или в деионизированной воде.

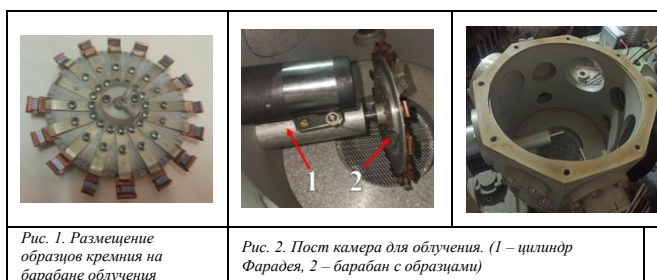


Рис. 1. Размещение образцов кремния на барабане облучения

Рис. 2. Пост камера для облучения. (1 – цилиндр Фарадея, 2 – барабан с образцами)

Облучение подготовленных образцов монокристаллического кремния проводился на линейном ускорителе ЭГ-2 (Электростатический Генератор), которая находится при НИИ ФПМ г. Ташкент. Подготовленные образцы были размещены на барабане облучения (см. рис. 1). После размещения поверхность образцов очищалась от прикосновений и загрязнений возникших во время фиксации медных держателей образцов на барабан. Готовый барабан с образцами, в количестве 15 шт., помещались в пост камеру для облучения (рис. 2). Барабан с образцами крепился на регулируемую стойку камеры, в которую также был подключен цилиндр Фарадея (рис. 2 (1)) для измерения тока пучка. Далее крышка камеры закрывалась и начинался процесс откачки воздух до разряжения 10^{-5} - 10^{-6} мм рт. ст.

Подготовленные образцы кремния облучались пучками протонов с тремя разными энергиями. Параметры облучения представлены на табл. 1 ($I_{\text{инт}}$ (мкА) – интегральный ток пучка; N – количество протонов приходящее на образец; t (мин) – время облучения. При каждой энергии образцы облучались в интервале времени от 15 до 75 минут с шагом 15 минут.

Таблица 1.

№	t , (мин.)	$E_p = 350$ кэВ		$E_p = 500$ кэВ		$E_p = 650$ кэВ	
		$I_{\text{инт}}$, (мкА)	$N_p \cdot 10^{16}$	$I_{\text{инт}}$, (мкА)	$N_p \cdot 10^{16}$	$I_{\text{инт}}$, (мкА)	$N_p \cdot 10^{16}$
1.	15	32263	0,201	39556	0,247	31450	0,196
2.	30	72082	0,450	72314	0,451	71769	0,450
3.	45	101569	0,634	119358	0,745	101713	0,630
4.	60	217547	1,360	150613	0,941	150509	0,940
5.	75	667241	4,170	207520	1,300	207813	1,300

Количество протонов приходящее на образец был рассчитан с помощью формулы:

$$I_{\text{имп}} = \frac{I_{\text{инт}}}{t_{\text{общ}}} \cdot \frac{1}{100} \text{ [мкА/сек]}; N_p = I_{\text{имп}} \cdot t_{\text{общ}} = \frac{I_{\text{имп}}}{1,6 \cdot 10^{-19}} \cdot t_{\text{общ}}$$

После облучения были исследованы основные электрофизические параметры на установке Холла, результаты которого представлены на табл. 2.

Таблица 2.

350 кэВ					500 кэВ			
№	ρ , Ом·см	μ , см ² /(В·с)	$n \cdot 10^{14}$ см ⁻³	$N_p \cdot 10^{16}$	ρ , Ом·см	μ , см ² /(В·с)	$n \cdot 10^{14}$ см ⁻³	$N_p \cdot 10^{16}$
1.	37,2	1209	1,40	0,201	35,5	1641	1,05	0,247
2.	31,1	1568	1,28	0,450	31,0	1621	1,19	0,451
3.	34,1	1280	1,45	0,634	33,8	1645	1,30	0,745
4.	36,1	1487	1,17	1,360	33,1	1751	1,07	0,941
5.	28,8	1628	1,34	4,170	32,0	1282	1,50	1,300
650 кэВ								
№	ρ , Ом·см	μ , см ² /(В·с)	$n \cdot 10^{14}$ см ⁻³	$N_p \cdot 10^{16}$				
1.	36,0	1285	1,30	0,196				
2.	35,0	1361	1,30	0,450				
3.	33,8	1244	1,88	0,630				
4.	40,6	1265	1,20	0,940				
5.	36,1	1601	1,15	1,300				

Анализ полученных результатов. Как видно из таблицы 2 изменение основных электрофизических параметров после облучения образцов марки КЭФ-40 не наблюдается, это может быть связано с тем, что с помощью эффекта холла определяются объемные характеристики, а проникающая способность протонных пучков с энергиями от 350 до 650 кэВ относительно размеров образцов является малым, размеры образцов были равны 2х4х8 мм, и они взаимодействуют в основном с поверхностью монокристалла кремния. Полученные результаты указывают на необходимость более детального исследования поверхностных характеристик облученных образцов.

Поэтому нами были исследованы поверхностные структуры облученных образцов с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) EVO MA10.

Для исследования образцы после облучения, проходили предварительную химическую обработку для удаления возникшего оксидного слоя в растворе фтороводорода. Далее образцы помещались на рабочую часть СЭМ. Полученные результаты приведены на рисунках 3-4. Из рис. 3 видно, что ускоренные протоны провзаимодействовали с поверхностью кремния в определенных местах.

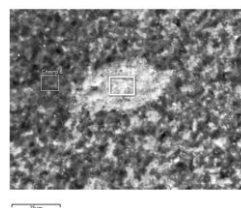
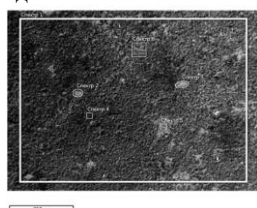


Рис. 3. Поверхность облученного образца

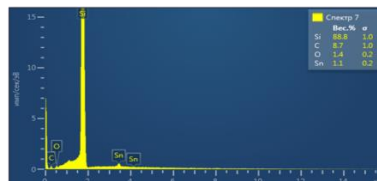
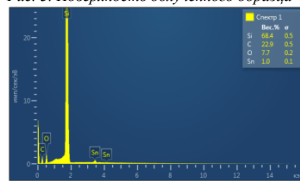


Рис. 4. Структурные данные облученного образца в разных точках

Диаграммы представленные на рис. 4, элементарный состав в кремнии, были получены относительно массы в точках попадания протонов. Общие результаты элементарного анализа в определенных точках на поверхности кремния представлены в табл. 3.

Таблица 3.

Образцы	Концентрация примесей относительно массы (%)					Время облучения (мин.)	Доза облучения ($N_p \cdot 10^{15}$)
	Si	C	O	Sn	Fe		
1 (не облученный)	79,6	16	2,8	1,4	0,3	-	-
2	67,9	22,1	9,1	1,0	-	20	1,2
	66,8	23,3	12,4	1,2			
	63,5	22,3	9,8	1,1			
	67,7	21,7	9,8	0,8			
	64,6	17,7	15,7	1,1			
3	67,2	24,7	7,0	1,3	-	40	2,4
	68,5	22,7	7,4	1,3			
	67,1	24,7	7,1	1,3			
	68,4	22,9	7,7	1,0			
	69,2	22,2	7,8	0,8			

Заключение. По данным элементарного анализа поверхности образцов до и после облучения видно, что относительная концентрация кремния уменьшилась, концентрация же углерода и кислорода повысилась. Мы предполагаем что причинами такого процесса могут быть следующие факторы:

- уменьшение концентрации кремния может быть связана с тем, что в инопроводе присутствуют, в малых количествах, масляные пары (масленных насосов), и при попадании на поверхность образцов пары могут образовывать слой который будет экранировать поток электронов;
- увеличение концентрации кислорода можно объяснить тем, что протоны попадая в оксидный слой на поверхности образцов вбивают атомов кислорода в кремний;
- так как в инопроводе ускорителя даже в вакууме 10^{-5} - 10^{-6} мм рт. ст. присутствуют атомы углерода (пары масел) и при ускорении протонных пучков они могут их захватывать и направлять на поверхность образцов, что влечет за собой увеличение концентрации углерода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Безродных И. П., А. П. Тютнев, В. Т. Семёнов. Радиационные эффекты в космосе. Часть 3. Влияние ионизирующего излучения на изделия электронной техники / – М.: АО «Корпорация «ВНИИЭМ», 2017. – 64 с.
2. Димс Дж., Дж. Винйард. Радиационные эффекты в твердых телах. М., 1960 стр. 11.
3. Гайдар Г.П., Отжиг радиационных дефектов в кремнии, Электронная обработка материалов, 2012, 48(1), 93-105.
4. Yong R.C., Corelli J.C. Photoconductivity Studies of Radiation Induced Defects in Silicon. Phys. Rev. B. 1972, 5(4), 1455–1467.
5. Sonder E., Templeton L.C. Gamma Irradiation of Silicon. I. Levels in n-Type Material Containing Oxygen. J. Appl. Phys. 1960, 31(7), 1279–1286.
6. Bemski G., Augustyniak W.M. Annealing of Electron Bombardment Damage in Silicon Crystals. Phys. Rev. 1957, 108(3), 645–648.
7. Watkins G.D., Corbett J.W. Defects in Irradiated Silicon: Electron Paramagnetic Resonance of Divacancy. Phys. Rev. 1965, 138(2A), A543–A544.



УДК: 537.533.537.534;

Алланазар ТАШАТОВ,
Профессор Каришинского государственного университета, д.ф.-м.н
E-mail: atashatov@mail.ru
Сардор ЭШБОБОВ,
Базовый докторант Каришинского государственного университета
Ёкуб ЭРГАШОВ,
Профессор Национального университета Узбекистана, д. ф.-м.н

APPLICATION OF ION IMPLANTATION FOR CREATION OF ULTRATHIN OHMIC CONTACTS ON THE SURFACE OF SILICON FILMS

Аннотация

It has been established that in these systems the low value of resistivity is due to both the high degree of doping of the near-surface layer and the low height of the Schottky barrier. Thus, the preliminary implantation of Ba⁺ ions in Si makes it possible to obtain sufficiently reliable ohmic contacts.

Key words: contact, surface, layer, films, morphology, resistance, doping, ion implantation, thermal annealing, silicide, distribution profile, diffusion, Schottky barrier, laser annealing.

ПРИМЕНЕНИЕ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ ДЛЯ СОЗДАНИЯ УЛЬТРАТОНКИХ ОМИЧЕСКИХ КОНТАКТОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ПЛЁНОК КРЕМНИЯ

Аннотация

Установлено, что в указанных системах малое значение удельного сопротивления обуславливается как высокой степенью легирования приповерхностного слоя, так и малой высотой барьера Шоттки. Таким образом, предварительная имплантация ионов Ba⁺ в Si позволяет получить достаточно надежные омические контакты.

Ключевые слова: контакт, поверхность, слой, пленок, морфология, сопротивление, легирования, ионная имплантация, температурный отжиг, силицид, профиль распределения, диффузия, барьер Шоттки, лазерный отжиг.

KREMNIY SIRT YUZASIDA ULTRAYUPQA OMIK KONTAKTLAR YARATISH UCHUN ION IMPLANTASINI QO'LLASH

Аннотация

Ushbu maqolada aniqlanishicha, bu tizimlarda qarshilikning past qiymati ham sirtga yaqin qatlamning yuqori darajada legirlanishi, hamda Shottki to'sig'ining balandligi pastligi bilan bog'liq. Shunday qilib, Si ga Ba⁺ ionlarining dastlabki implantatsiyasi natijasida yetarlicha ishonchli omik kontaktlarni olish imkonini beradi.

Kalit so'zlar: kontakt, sirt, qatlam, plyonkalar, morfologiya, qarshilik, doping, ion implantatsiyasi, termik tavlaniish, silitsid, tarqalish profili, diffuziya, Shottki to'sig'i, lazerli tavlaniish.

Введение. Одной из основных проблем микроэлектроники, особенно в системах БИС и УБИС, является создание надежных контактов. Эти системы состоят из множества разнообразных транзисторов, в частности, транзисторов с проникающей и металлической базой, созданных с применением слоев субмикронной толщины.

К контактам (контактирующему материалу), создаваемым на поверхности субмикронных слоев, предъявляются более высокие требования, чем к контактам для "толстых" пленок. Эти требования становятся гораздо более жесткими, если контакты создаются для высокочастотных транзисторов. Основными требованиями следующие:

- малая толщина переходного слоя металл-кремний;
- морфологическое совершенство пленки и неизменность фазового состава на всей площади контакта;
- стабильность свойств контактов в процессе изготовления и эксплуатации.

Литературный обзор. Омический контакт характеризуется удельным сопротивлением, значение которого определяется через полное сопротивление R_c [1-3].

$$R_c = (\rho_{II}/\pi d) \cdot f \cdot g^{-1} (4h/d) + (4\rho_c/\pi d^2) + R_0 \quad (1)$$

где, ρ_{II} – удельное сопротивление полупроводниковой пленки, h – толщина пленки, d – диаметр кругового контакта, f – частота генерации, g – активная межэлектронная проводимость, R_0 – сопротивление тыльного контакта.

Хороший омический контакт должен иметь $\rho_k < 10^{-2}$ Ом-см. Удельное сопротивление контакта есть обратная величина производной плотности тока по напряжению

$$\rho_k = (dI/dV)^{-1} V = 0 \quad (2)$$

В настоящее время существует несколько способов получения сверхмелких контактов на субмикронных структурах: метод фазового расслоения; метод низкотермического ионного легирования; метод осаждения многослойных композиций.

Независимо от метода создания контакта значение ρ_k зависит от уровня легирования полупроводника. В контактах "металл-полупроводник" с низким уровнем легирования преобладает термоэлектронная компонента тока. При этом согласно термоэмиссионно-диффузионной теории, ρ_k определяется по формуле:

$$\rho_k = \frac{k}{eA^*T} \exp\left(\frac{e\phi_{on}}{kT}\right) \quad (3)$$

где, k - постоянная Больцмана, e - заряд электрона, A^* - эффективная постоянная Ричардсона, $\phi_{\text{ш}}$ - высота барьера Шоттки.

Из формулы 3 следует, что в случае полупроводников с низким уровнем легирования для получения малых ρ_K нужно изготовить контакт с малой высотой барьера.

В контактах "металл-полупроводник" с высоким уровнем легирования преобладает туннельная компонента тока, поэтому ρ_K будет пропорционально выражению

$$\rho_K \approx \exp \left[\frac{2\sqrt{\epsilon_s m^*}}{h} \cdot \left(\frac{\phi_{\text{ш}}}{\sqrt{N_D}} \right) \right], \quad (4)$$

где, m^* - эффективная масса электрона, ϵ_s - диэлектрическая постоянная пленки, N_D - концентрация примесных уровней.

Анализ формул (3 и 4) показывает, что при $N_D < 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ток обусловлен термоэмиссией и значение ρ_K почти не зависит от уровня легирования, а при $N_D > 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ρ_K определяется, в основном, туннельными процессами и быстро уменьшается по мере повышения степени легирования.

Таким образом, для получения хороших омических контактов с малым ρ_K необходимы либо высокая степень легирования, либо малая высота барьера, либо, и то и другое. Основным требованием, предъявляемым к субмикронным контактам, помимо низкого ρ_K , является ограниченная глубина переходного слоя и однородность поверхности.

По сравнению с другими методами создания сверхмелких контактов, ионная имплантация обладает определенными преимуществами и обеспечивает получение хорошо воспроизводимых и однородных структур.

Методика исследования. В настоящее время для получения омических контактов к Si с использованием ионной имплантации чаще всего используется следующий способ [2,4]. Для устранения эффекта каналирования поверхность Si сначала аморфизуется ионами Ge (или Si), а затем вводятся ионы B^+ (или P^+). Послеимплантационный отжиг проводится высокотемпературным прогревом ($T \approx 1100-1300 \text{ K}$) в течение 10-15 с. Затем проводится металлизация: вводится 160 нм Ti и 800 нм Al. Послеметаллизационный отжиг производится в атмосфере Ag в течение 30-40 с при температуре 620-650 K.

Однако, изложенный метод не является высокоэффективным, так как он требует проведения последовательности разнообразных сложных технологических операций, после которых вблизи переходного слоя остается заметная концентрация дефектов.

В последние годы разработан низкотемпературный метод введения большой концентрации примеси ($10^{19} - 10^{20} \text{ см}^{-3}$) на небольшую (100 нм) глубину. В этом методе реализуется атермическая кристаллизация ионно-легированного слоя, называемого также "эффектом больших доз имплантации" [4,5]. Осуществляется имплантация примесей типа P, B, As в кремний с большой плотностью ионного тока (30 - 100 мкА·см⁻²). При малых дозах идет аморфизация приповерхностного слоя, а затем при больших дозах ($D \geq 10^{14} \text{ см}^{-2}$) происходит ориентационная кристаллизация разупорядоченного слоя [4].

При таких дозах легирования концентрация носителей в максимуме распределения превышает 10^{20} см^{-3} . Однако, при этом имплантация проводится ионами сравнительно высоких энергий ($E_0 \geq 15-20 \text{ кэВ}$). Это резко уменьшает плотность ионного тока затрудняет реализацию эффекта или даже делает его невозможным. Поэтому в работах [2] легирование кремния осуществлялось путем введения необходимой концентраций примеси (P или B) в тлеющем разряде. Количество внедренного фосфора (бора) контролируется по изменению тока разряда при введении паров фосфора, т.е. по изменению давлений в разрядной камере.

В данной работе мы попытались создать омические контакты на поверхности сверхтонких пленок ($\leq 500 \text{ Å}$) Si/CoSi₂ с использованием имплантации ионов Ba^+ . Для этого проводились следующие технологические операции: пленки Si легировались ионами Ba^+ с вариацией энергий ионов в следующей последовательности 5, 3, 1 и 0,5 кэВ. Во всех случаях доза ионов составляла $(4 \div 6) \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$. При этом высота потенциального барьера пленка-контакт уменьшалась до 0,35 - 0,4 эВ. Затем проводился послеимплантационный отжиг [5]. Кристаллизация разупорядоченного слоя пленки в случае лазерного облучения начиналась при плотности энергии $W \approx 1 \div 1,5 \text{ Дж} \cdot \text{см}^{-2}$, а в случае температурного прогрева - при $T \approx 1000 \text{ K}$. Увеличение W до 2,5 Дж·см⁻² приводило к формированию монокристаллической структуры, но с большой плотностью структурных дефектов. Дальнейший рост W сопровождался разложением BaSi и обогащением поверхности атомами бария. Поэтому после лазерной обработки проводился быстрый температурный отжиг (~10 с) при $T=1200 \text{ K}$. Это позволило получить более совершенную монокристаллическую структуру силицида.

Анализ и результаты. В случае температурного отжига увеличение T до 1100 K позволило получить монокристаллическую структуру. Но при этом в определенной мере сохранялись дендритовые блоки. Дальнейший рост T приводил к образованию островковой пленки.

На рис.1. представлен концентрационный профиль распределения Ba по глубине ионно-легированного кремния до и после отжига. Видно, что лазерный отжиг с $W \approx 2,5 \text{ Дж} \cdot \text{см}^{-2}$ приводит к образованию однородного слоя силицида в тонкой приповерхностной области, а температурный отжиг - к монотонному уменьшению концентрации бария от поверхности до определенной глубины.

Исследовалась основная характеристика контакта - удельное сопротивление переходного слоя и его зависимость от температуры. Необходимость знания такой зависимости прежде всего связана с особенностями технологического получения p-n переходов, гетероструктур, контактов и транзисторов в целом. Все эти процессы сопровождаются прогревом системы до определенной температуры.

На рис.2. приведена зависимость $\rho(T)$ для приповерхностного силицидного слоя, полученного имплантацией ионов Ba^+ с разными энергиями ($E_0 = 5, 3, 1, 0,5 \text{ кэВ}$) в кремний. Видно, что все эти зависимости имеют минимум в области $T \approx 1000-1100 \text{ K}$. При низких температурах значение ρ сравнительно высокое. В случае отожженных

образцов это в основном связано с адсорбцией на поверхности и некоторой диффузией в приповерхностную область атомов различных газов.

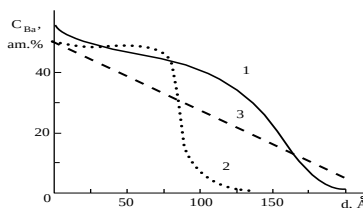


Рис.1. Зависимость C_{Ba^+} от d для Si, легированного ионами с энергией 5, 3, 1 и 0.5 кэВ при $D \approx 6 \cdot 10^{16} \text{ см}^2$. 1-до отжига; 2-после лазерного отжига с $W=2.5 \text{ Дж}\cdot\text{см}^{-2}$; 3-после прогрева при $T=1100 \text{ K}$.

В случае неотожженного образца высокое значение ρ при низких T главным образом обусловлено некристаллическостью ионно-легированного слоя и наличием большого числа структурных дефектов на границе силицид-кремний.

Затем для получения омического контакта на поверхность силицидов бария напылялись атомы контактирующего металла.

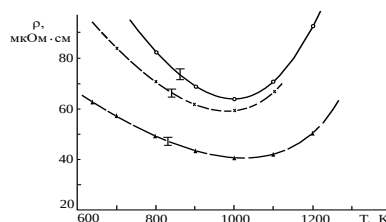


Рис.2. Зависимость удельного сопротивления силицидного переходного слоя от температуры для Si, легированного ионами Ba^+ .

На рис.3. приведен профиль распределения Ni по глубине ионно-легированного кремния. Ni напылялся на образец до и после отжига образца. Видно, что в случае отожженных образцов диффузия Ni происходит заметно, интенсивнее, чем для неотожженной структуры. Однако, во всех случаях глубина проникновения Ni небольшая и не превышает 100-150 Å.

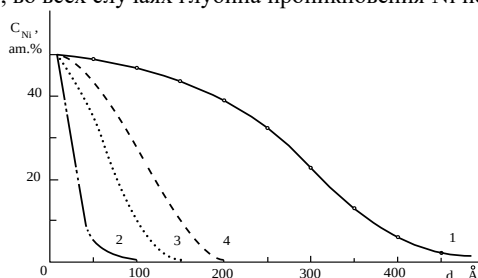


Рис.3. Зависимость C_{Ni} по глубине чистого и ионно-легированного кремния. 1-Ni-чистый Si<100>; 2-Ni- $Ba^+ \rightarrow Si<100>$ ($E_0=5 \div 0.5 \text{ кэВ}$, $D=6 \cdot 10^{16} \text{ см}^2$); 3-Ni- $Ba^+ \rightarrow Si<100>$ (лазерный отжиг $W=2.5 \text{ Дж}\cdot\text{см}^{-2}$); 4- Ni- $Ba^+ \rightarrow Si<100>$ (прогрев $T=1100 \text{ K}$).

Выводы/рекомендации. Дальнейшие наши исследования показали, что качество омического контакта слабо зависит от предварительной обработки ионно-легированного слоя (табл.1).

Таблица 1.

Значение удельного сопротивления и высота барьера Шоттки для системы

$Ni-Ba^+ \rightarrow Si$

Параметры системы	Ni- $Ba^+ \rightarrow Si$ (111)		
	Неотожженная структура	Температура $T=1100 \text{ K}$	Плотность энергии лазерного облучения $2.5 \text{ Дж}\cdot\text{см}^{-2}$
ρ , мкОм·см	1,6	1,3	1,2
ϕ_B , эВ	0,6	0,4	0,4

Значения ρ и ϕ_B измерены при комнатной температуре мишени. Отметим, что в указанных системах малое значение удельного сопротивления обуславливается как высокой степенью легирования приповерхностного слоя, так и малой высотой барьера Шоттки. Таким образом, предварительная имплантация ионов Ba^+ в Si позволяет получить достаточно надежные омические контакты.

ЛИТЕРАТУРА

1. Walden R.H.et.al The buried Channel Coupled Device.// Bell. Sist.Tech.J., - 1972. - V.51. - P. 180-183.
2. Wittmer M. Silicide contacts for shallow junction devices. //Thin Solid Films. - 1983. - V.107. - P. 99-110.
3. "Мелкие переходы для солнечных батарей, изготовленных в короне разряда в атмосфере BF_3 ", R.Wicher, IEEE, Photovoltaic Specialists Conf. - 1975. - 420 p.
4. Tusa J.E. Di, Parpia J.M. Quantum transport in ultrathin $CoSi_2$ epitaxial films. // Appl. Phys. Lett. - 1990. - V.57 (5). - P.452-454.

5. Ташатов А.К. Применение низкоэнергетической ионной имплантации для создания контактов к ультратонким пленкам. // Украинский физический журнал. - Киев, 2001. - №3 (46). – С. 383-385.
6. Ergashov Y.S., Tashmukhamedova D.A., Rabbimov E. // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. -Russia, 2015, -Vol. 9, №2, -P.350–354. © Pleiades Publishing, Ltd.
7. Умирзаков Б.Е., Ташмухамедова Д.А. Электронная спектроскопия нанопленок и наноструктур, созданных ионной имплантацией. – Ташкент: ТашГТУ, 2004. – 147 с.
8. 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
9. Donaev S.B. Tashatov A.K. Mustafoeva N.M. // Electronic and Optical Properties of GaAlAs/GaAs thin films // Technical Physics, Vol.64, Issue 10(2019), pp.1506-1508
10. Tashatov A.K. Mustafoeva N.M. // Surface Morphology of NiSi₂/Si Films Obtained by the Method of Solid-Phase Deposition // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2020, Vol.14, No 1, pp. 81-84.
11. Ташатов А.К. Мустафоева Н.М. // Морфология, состав и структура поверхности пленок NiSi₂/Si полученных методом твердофазной эпитаксии // Узбекский физический журнал, 23(2), 2021. С.55-60



Dildora TASHPULATOVA,
Jizzax Davlat Pedagogika universiteti o'qituvchisi
Kamol NURMATOV,
"Fizika va uni o'qitish metodikasi" kafedrası o'qituvchisi
E-mayl: dildora87@jspi.uz

Jizzax Politehnika Instituti professori U.Yuldashev taqrizi ostida

HETERO – STRUCTURED SOLAR PHOTOCELLS

Abstract

A comparative analysis of the prospects of creating ultra – thin, light and highly efficient solar cells based on AlGaAs/GaAs heterostructures was conducted. Technological challenges and prospects for each option are discussed. A micron - scale thinning of AlGaAs/GaAs heterostructures using efficient technological methods has been proposed, which has been shown to significantly increase the yield percentage of solar cells.

Keywords: heterostructure, solar energy, alternative energy sources, electricity, photovoltaics, solar cell, monocrystalline and polycrystalline silicon, cascade elements, amorphous silicon, solar module.

ГЕТЕРОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ СОЛНЕЧНЫЕ ФОТОЭЛЕМЕНТЫ

Аннотация

Проведен сравнительный анализ перспектив создания сверхтонких, легких и высокoeffективных солнечных элементов на основе гетероструктур AlGaAs/GaAs. Обсуждаются технологические вызовы и перспективы каждого варианта. Предложено микронное утонение гетероструктур AlGaAs/GaAs с использованием эффективных технологических приемов, позволяющее значительно увеличить протсент выхода солнечных элементов.

Ключевые слова: гетероструктура, солнечная энергетика, альтернативные источники энергии, электричество, фотовольтаика, солнечный элемент, монокристаллический и поликристаллический кремний, каскадные элементы, аморфный кремний, солнечный модуль.

GETEROSTRUKTURALI QUYOSH FOTOELEMENTLARI

Annotatsiya

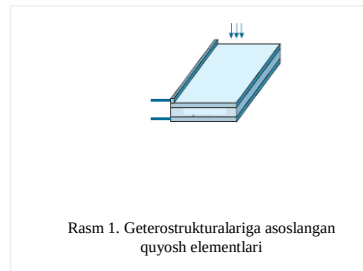
AlGaAs/ GaAs geterostrukturalari asosida o'ta nozik, yengil va yuqori samarali quyosh batareyalarini yaratish istiqbollarning qiyosiy tahlili o'tkazildi. Har bir variant uchun texnologik muammolar va istiqbollar muhokama qilinadi. Samarali texnologik usullardan foydalangan holda AlGaAs/ GaAs geterostrukturalarini mikron darajasida yupqalash usuli taklif qilingan, bu esa quyosh batareyalarining rentabellik foizini sezilarli darajada oshirish ko'rsatilgan.

Kalit so'zlar: geterostruktura, quyosh energetikasi, muqobil energiya manbalari, elektr energiya, fотовольтаика, quyosh elementi, monokristall va polikristallkremniy, kasakadli elementlarga, amorf kremniy, quyosh moduli.

Kirish. Hozirgi vaqtda quyosh batareyalarining energiya-massa xususiyatlarini oshirish zarurati dolzarb ahamiyatga ega. Ushbu muammoni hal qilishning asosiy yo'llari eng yuqori samaradorlikka ega bo'lgan AlGaAs/ GaAs birikmalar asosidagi quyosh batareyalarining samaradorligini oshirish va ularning hajmi va og'irligini kamaytirish hisoblanadi. Bunday samaradorlikka erishish uchun fотовольтаик tizimga optimallashtirilgan yangi arxitektura va yuqori sifatli yarimo'tkazgich materiallari talab qilinadi. Dunyoda yarimo'tkazgichlardagi p-n o'tishlari sonini to'rt, besh va hatto oltitaga oshirish orqali istiqbolli geterostrukturalarda quyosh batareyalarining samaradorligini 35% gacha oshirish bo'yicha intensiv tadqiqotlar olib borilmoqda. Fotoelektrik usul quyosh energiyasini aylantirishning eng istiqbolli usullaridan biridir. Hozirgi vaqtda kremniy quyosh batareyalari uchun asosiy materialdir. Kremniy asosidagi quyosh elementlarining samaradorligi Yerga yaqin fazo sharoitida to'g'ridan-to'g'ri nurlanganda 15-16% ni tashkil qiladi. Yer sharoitida kremniy elementlarining samaradorligi to'g'ridan-to'g'ri quyosh nurlanishi bilan taxminan 20% va quyosh nurlanishining (30-50) marta konsentratsiyasi bilan 25-27% gacha kamayadi. Yoritish intensivligining yanada oshishi bilan silikon elementlarning samaradorligi ish haroratining oshishi va omik yo'qotishlarning oshishi tufayli pasayadi. Geterostrukturalarga asoslangan quyosh elementlari esa yuqori samaradorlikni ta'minlaydi va yuqori radiatsiya qarshiligiga egadir. Geterofotokonvertorlarning muhim afzalligi ularning yuqori konsentratsiyali quyosh nurlanishini (1000-2000 martagacha) samarali aylantirish qobiliyatidir, bu quyosh batareyalarining maydoni va narxini sezilarli darajada (konsentratsiya darajasiga mutanosib) kamaytirish istiqbollari ochadi va natijada "quyosh" elektr energiyasi narxining pasayishiga olib keladi.

Mavzuga oid adabiyotlarning tahlili. Birinchi marta A.F. Ioffe nomli FTIda GaAs geterostrukturalariga asoslangan quyosh batareyalari taklif qilindi va yaratildi. Quyosh radiatsiyasiga deyarli to'liq shaffof bo'lgan Al GaAs qattiq eritmasining yupqa qatlamidan yasalgan keng bo'shliqli "deraza"dan foydalanish fotoaktiv hudud sirtining passivlanishini ta'minlaydi. Past haroratli suyuqlik fazali epitaksiya usulidan foydalanib, ko'p qatlamli AlGaAs/ GaAs geterostrukturalari yaratildi [1-5], bu bitta p-n o'tishga ega quyosh batareyalari uchun rekord samaradorlik ko'rsatkichlariga erishishni ta'minladi. Bunday samaradorlik ko'rsatkichlariga AlGaAs/ GaAs old qatlami qalinligining 30 -50 nm gacha pasayishi, faol mintaqada yuqori sifatli materialning kristallanishi va GaAs dan yasalgan orqa potensial to'siqni yaratish tufayli erishildi. So'nggi yillarda quyosh elementlari uchun AlGaAs/ GaAs geterostrukturalarini ishlab chiqarish uchun MOS-gidrid epitaksisi (metall-organik bug 'fazasi epitaksisi) usuli

keng qo'llanila boshlandi [6]. Ushbu usul bilan o'rnatilgan Bragg oynasi bilan olingan quyosh elementi geterostrukturasi katta qiziqish uyg'otadi (1-rasm).



Samaradorlikning yanada oshishi turli tarmoqli bo'shliqlarga ega bo'lgan materiallarda ikki yoki undan ortiq p-n birikmalari bo'lgan ko'p qatlamli geterostrukturalar asosida ishlab chiqarilgan kaskad quyosh elementlari tomonidan ta'minlanadi (1-rasm). Kaskad elementlarining samaradorligini sezilarli darajada oshirishi mexanik o'rnatish bilan loyihalashda ko'rsatildi. Ushbu dizayn keng bo'shliqli element materiali sifatida GaAs va tor bo'shliqli element sifatida InGaAs yoki GaSb dan foydalanadi. Bunday elementlarda kengroq bo'shliqli materialdan yasalgan "yuqori" p-n birikmasi quyosh nurlanishining qisqa to'liq qismini samarali aylantirish uchun mo'ljallangan va "pastki" p-n birikmasi tor- bo'shliqli material, keng polosali element orqali o'tadigan uzun to'liq nurlanishni aylantirish uchun optimallashtirilgan. Nazariy hisob-kitoblar shuni ko'rsatadiki, bunday murakkab fotokonvertorlarda 40% dan ortiq samaradorlikka erishish mumkin.

Tadqiqot metodologiyasi. Yuqori samarali quyosh elementlarini yaratish uchun eng istiqbolli materiallardan biri bu galliy-arsenid. Bu quyidagi xususiyatlar tufayli yuzaga keladi:

- bir tutashgan quyosh elementlari uchun deyarli ideal tarmoqli oralig'i 1,43 eV;
- quyosh radiatsiyasini yutish qobiliyatining oshishi: yuqori samaradorlik bilan birga bu materialni yuqori radiatsiya qarshiligi;

• GaAs asosidagi batareyalarning nisbiy issiqlik sezuvchanligi;

• aluminiy, mis, fosfor yoki indiy bilan GaAs qotishmalarining xarakteristikalariga GaAs xususiyatlarini to'ldiradi, bu esa quyosh batareyalarini loyihalashda imkoniyatlarni kengaytiradi.

Galliy arsenid va unga asoslangan qotishmalarining asosiy afzalligi GC dizayni uchun keng imkoniyatlaridir. GaAs asosidagi fotoelement turli tarkibdagi bir necha qatlamlar -geterostrukturalar iborat bo'lishi mumkin. Bu ishlab chiquvchiga kremniy GClarda ruxsat etilgan doping darajasi bilan cheklangan zaryad tashuvchilarning avlodini katta aniqlik bilan boshqarishga imkon beradi. Odatda GaAs asosidagi GC oyna sifatida AlGaAs ning juda yupqa qatlamidan iborat. Galliy arsenidning asosiy kamchiligi uning yuqori narxidir. Ishlab chiqarish tannarxini pasaytirish uchun quyosh batareyalarini arzonroq substratlarda shakllantirish taklif etiladi. Bunda polikristalli yupqa plyonkalar ham quyosh energiyasi uchun juda istiqbolli. Mis va indiy diselenidi (SnSe_2) quyosh nurlanishini o'zlashtirishning nihoyatda yuqori qobiliyatiga ega - yorug'likning 99% bu materialning birinchi mikronda yutiladi (tarmoq oralig'i 1,0 eV) [2,5]. SnSe_2 asosida quyosh batareyasi oynasini ishlab chiqarish uchun eng keng tarqalgan materialdir. Ba'zida oyna shaffofligini yaxshilash uchun kadmiy sulfidga sink qo'shiladi. SnInSe_2 qatlamidagi tarmoqli bo'shlig'ini oshiradi, bu esa ochiq kontaktlarning zanglashiga olib keladigan kuchlanishning oshishiga va natijada qurilmaning samaradorligini oshirishga olib keladi.

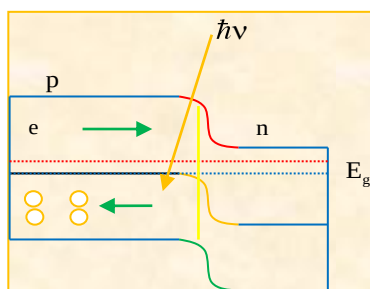
Tahlil va natijalar. Ko'pgina quyosh elementlari asosan katta maydon p-n birikmalaridir. Ularga yorug'lik tushsa, ular oqim va kuchlanish hosil qilishi mumkin. Buning sodir bo'lishining sababi p-tipi va n-tipli materialning o'rtasida "o'rnatilgan" elektr maydonidir. Avval kremniy quyosh elementi (p-n ulanishi) p va n kontaktlari o'rtasida tashqi tomondan ulangan past qarshilikli simga ega bo'lsa, nima bo'lishini ko'rib chiqamiz. Qorong'ida quyosh elementi oqim hosil qilmaydi. Agar quyosh batareyasiga yorug'lik tushsa, u holda oqim sim orqali p tipidagi tomondan n tipidagi tomonga (an'anaviy oqim) o'tadi. Yorug'lik kremniy kristalining ba'zi kimyoviy bog'lanishlarini buzish uchun yetarli energiyaga ega. Buning ma'nosi shundaki, odatda kremniy bog'lanishida ishtirok etadigan elektronlar yorug'lik ta'sirida yuqori energiya holatiga o'tadi va aloqa buziladi. Quyoshning yer yuzidagi yorug'lik intensivligi quyosh elementidagi har 100 million kremniy atomi uchun taxminan 1 ta aloqani uzish uchun yetarlicha kuchli. Qo'zg'otilgan elektronlar fosfor qo'shimcha atomlarining elektronlariga o'xshaydi - ular material bo'ylab erkin harakatlanadi. Xuddi shunday, yorug'lik natijasida hosil bo'lgan bo'sh joylar, xuddi kremniy va bor atomlari orasidagi bog'lanishlarda yetishmayotgan elektronlar kabi, teshik vazifasini bajaradi va bu teshiklar ham material bo'ylab erkin harakatlanishi mumkin. Shu tarzda yaratilgan elektronlar va teshiklar fizikaviy jihatdan bir- biriga yaqin: yorug'lik bilan qo'zg'atilgan har bir elektron uchun tegishli teshik hosil bo'ladi. Bu elektronlar va teshiklar faqat qisqa vaqt davomida qo'zg'olgan holda qolishi mumkin. Rekombinatsiya jarayonida qo'zg'olgan elektronlar teshiklarga juda yaqin keladi va ikkalasi yana bog'langan pozitsiyalarga joylashadilar. Bu jaraen sodir bo'lganda, juftlikning elektr energiyasi issiqlik sifatida yo'qoladi. Agar rekombinatsiya juda ko'p bo'lsa, quyosh elementining samaradorligi pasayadi. Quyosh elementida yorug'lik orqali qo'zg'otilgan elektronlar va teshiklar materialning butun hajmida, p-mintaqasida, n-mintaqada va "o'rnatilgan" elektr maydoni mavjud bo'lgan maydon hududida paydo bo'ladi. Maydon hududida yorug'lik bilan qo'zg'atilgan elektronlar va teshiklarni ko'rib chiqish orqali oqim oqimini tushunish eng oson.

Xuddi shunday, maydondan uzoqda joylashgan elektronlar va teshiklar, agar ular qayta birlashishdan oldin birlashma tomon yo'l topsa, "o'rnatilgan" elektr maydoni bilan ajratilishi mumkin. Bu shunchaki elektronlar va teshiklar material bo'ylab tasodifiy tarqalib ketishi sababli sodir bo'ladi. Agar ular qayta birlashishdan oldin "o'rnatilgan" elektr maydoniga tasodifiy kirib borishga muvaffaq bo'lsalar, ular tutashuv bo'ylab oqadigan oqimga hissa qo'shadilar. Ushbu zaryadlar, shuningdek, tashqi sim orqali elektronlar oqimiga olib keladi. Elektr tokini oddiygina tok o'lchagichni quyosh batareyasi bilan ketma-ket ulash orqali o'lchash mumkin. Ba'zan oqim o'lchagichdagi qarshilik juda past bo'lganligi sababli, quyosh batareyasi bo'ylab kuchlanish bo'lmaydi, lekin oqim oqishi mumkin. Bu qisqa tutashuv oqimi deb ataladi.

Quyosh elementining ishlashiga asos bo'lgan fotoelektr effekti yorug'lik bilan nurlantirilganda yarim o'tkazgich materiallarda tok tashuvchilar - elektronlar va teshiklarni hosil qilishdan iborat. Kaskadli materiallarni boshqalari bilan solishtirganda nisbatan past samaradorligining tabiati bunday tuzilmalarda erkin zaryad tashuvchilarning fotogeneratsiyasining

turli mexanizmida yotadi. Noorganik yarim o'tkazgichlar tarmoqli bo'shlig'ida erkin zaryad tashuvchilar (elektronlar va teshiklar) hosil bo'ladi, keyin ular bir-biridan ajratiladi.

Rasmda ko'rsatilganidek yarimo'tkazgichlarda fotonlarning yutilishi natijasida elektronlar eng yuqori egallangan molekular orbitallardan eng past bo'sh bo'lmagan molekular orbitallarga qo'zg'atiladi (3-rasm, 1-bosqich). Kaskadli materiallarda fotogeneratsiya mexanizmlarining muhim farqi shundaki, noorganik SClarda fotoqo'zg'alish natijasida materialning asosiy qismida erkin zaryad tashuvchilar hosil bo'ladi, boshqalarda esa ularning nisbatan past dielektrik o'tkazuvchanligi natijasida. materiallar, kulon o'zaro ta'siri bilan bog'langan elektron-teshik juftlari, eksiton hosil bo'ladi. Erkin zaryadlarni olish uchun qo'shimcha qo'zg'atuvchi dissotsiatsiya energiyasi (bog'lanish energiyasi) talab qilinadi, bu har xil organik yarim o'tkazgichlar uchun 0,2-1,0 eV ni tashkil qiladi. Eksitonlarning dissotsiatsiyasi tufayli zaryadlarning hosil bo'lishi ikkita yarimo'tkazgichlar (donor va akseptor) o'rtasidagi interfeysda, ya'ni geterobirlashmada amalga oshirilishi mumkin. Tegishli orbitalar orasidagi energiya sathining siljishi tufayli org nikal materiallar elektron donorlar yoki qabul qiluvchilar sifatida ishlashi mumkin. Donor-akseptor interfeysida zaryad o'tkazish jarayoni sodir bo'ladi, bu past ionlanish potentsiali (donor) bo'lgan materialda teshiklar va yuqori elektronga yaqinlik (akseptor) bo'lgan materialda elektronlar paydo bo'lishiga olib keladi (2-rasm, 3-bosqich).). Ushbu tashuvchilar hali ham Kolumb o'zaro ta'siri bilan bog'langan, ammo sendvich konfiguratsiyasidagi ikki xil elektrodning ish funksiyasidagi farq tufayli yaratilgan GCning ichki elektr maydoni (yoki o'rnatilgan potentsial) bilan ajratilishi mumkin. Teshiklar (elektronlar) donor (qabul qiluvchi) material orqali yuqori (past) ish funksiyasi bo'lgan elektrodlarga o'tadi (2-rasm, 5-bosqich).



Rasm 2. Ikki qavatli geterobog'lanish asosida organik quyosh kameralarida zaryad tashuvchilarning fotogeneratsiyasi

Organik yarim o'tkazgichlarda eksitonning o'zi bosib o'tgan xarakterli masofasi, ya'ni diffuziya uzunligi, ularning qisqa umr ko'rish muddati va kam harakatchanligi tufayli taxminan 10 nm masofalar bilan chegaralanadi [4]. Shuning uchun, faqat getero-birikma tekisligi yaqinidagi xarakterli qo'zg'alish diffuziya uzunligida so'rilgan fotonlar fototokga hissa qo'shishi va interfeys tomon samarali harakatlanishi mumkin, GC ning elektr qarshiligi bilan aniqlanadi va zaryad tashuvchilarni yig'ish jarayonining samaradorligini ko'rsatadi, bu qurilmadagi qochqin oqimlarining kattaligiga bog'liq. GS ning nazariy maksimal quvvat zichligi nisbati sifatida hisoblash mumkin :

$$\eta = \frac{J}{J_c} \cdot \frac{V}{V_c} \quad (1)$$

Pmpp ning tushayotgan yorug'lik quvvati zichligiga nisbati bilan aniqlanadi (R):

$$J_c = \int E \cdot Q \cdot E(\lambda) \cdot P_s \cdot \frac{e\lambda}{hc} d\lambda \quad (2)$$

qisqa tutashuv paytida GC ning tashqi zanjiri orqali oqib o'tadigan elektronlarga aylanadigan ma'lum bir to'lqin uzunligi R da tushgan fotonlar. Spektral javobdan AM1.5G yorug'ligi ostida GS ni taxmin qilish mumkin - quyosh spektrining quvvat zichligi (R):

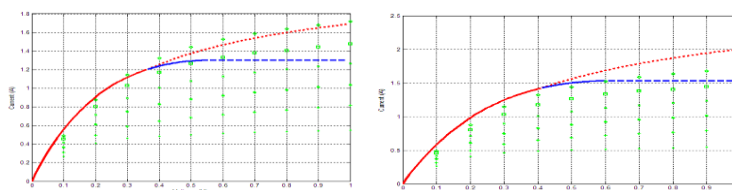
$$J_c = \int E \cdot Q \cdot E(\lambda) \cdot P_s \cdot \frac{e\lambda}{hc} d\lambda \quad (3)$$

bu yerda e - elektron zaryadi, $\hbar$ - Plank doimiysi, c - yorug'lik tezligi.

$$U = \frac{kT}{q} \ln \frac{I_{ph}}{I_s} + I. \quad (4)$$

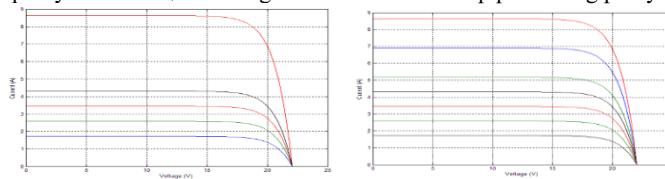
$$I = I_s \left[\exp \left(\frac{qU}{kT} \right) - 1 \right]. \quad (5)$$

bu yerda I_{ph} element fototokini ifodalaydi; I_s - massivning chiqish tok oqimi; U massivningchiqish kuchlanishi; q - elektronning zaryadi; T -element xarorati (K). Quyidagi rasmda quyosh nurlanishi va xaroratning belgilangan darajasi uchun xarakterli IV egri chizig'i berilgan. 3-rasm va 4-rasmda mos ravishda oqim - kuchlanish va kuchlanish - quvvat xarakteristikalarining egri chiziqlari aks ettirilgan. Grafikdan ko'rinadiki, elementdagi fototok oqimi doimiy xaroratli nurlanishga bog'liq. Biroq, nurlanish kuchayganda, fototok oqimi va kuchlanishi ortadi. Bu esa umumiy quvvatning oshishiga olib keladi.



3-rasm. 25° S doimiy xaroratda o'zgaruvchan nurlanishda kuchlanish xarakteristikalari

Bunday holda, geterostukturali tizim xarakteristikalar uchun, ish xarorati ko'tarilganda, oqim chiqishi biroz ko'tariladi, kuchlanish chiqishi esa keskin pasayadi va bu xaroratning ko'tarilishi bilan aniq quvvatning pasayishiga ta'sir qiladi.



4 rasm. Doimiy xaroratda element fototokining o'zgarish xarakteristikalar

Taxlil va natijalarni aniqlashga ko'ra, volt amper xarakteristikalar o'zgaruvchan shunt qarshiligida xarorat va nurlanishni 1000 v/m^2 va 25° S da doimiy ushlab turadi. Bunday o'lchovlarning aniqligi uchun birinchi muxim parametr - quyosh nurlanishini simulyatsiya qilish uchun ishlatiladigan quyosh nuri simulyatorining spektr turi va intensivligidir. Ushbu spektrlardagi farqlar quyosh simulyatori spektral xarakteristikasining yemirilishini hisobga olgan holda spektral sezgirlikni aniqlashga imkon beradi.

Xulosa va takliflar. Ushbu maqolada quyosh energetika qurilmasining geterostrukturaga asoslangan fotoelementlarning fizikaviy xossalari o'rganildi. Geterostukturali quyosh batareyasi fotoelementining foydali ish koeffitsienti, quvvati hamda elektr yurituvchi kuchining qiymatlari analitik yo'l bilan hisoblandi.

ADABIYOTLAR

1. Удалов Н. С. Возобновляемые источники энергии. – Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2009. – 412. – С. 305-306.
2. Виссарионов В. И. Солнечная энергетика : учебное пособие для вузов. – Москва: Издательский дом МЭИ, 2008. – 320 с. – С. 113-115.
3. Тайланов Н. Гетероструктурли куёш батареяси фотоэлементининг фойдали иш кoeffитсенти Физико-технологического образование.–2020.–1.-С. 23-28.
4. Местников, А.Е. Тепловая защита зданий на севере: материалы, изделия, конструкции. А. Е. Местников. М.: Издательство АВС. 2009. 112 с.
5. Христофорова Т.А. Внедряем новые энергосберегающие технологии. Т.А. Христофорова. Энергосбережение в Якутии. -2017.- 6 (12).- С. 10-11.
6. Тайланов Н.А. Расчет энергетических параметров автономной солнечной электростанции в Арнасайском районе. - Узбекский физический журнал, - 2018.- 20.-С. 43-48.



Ibrat O'RUNOV,

O'zbekiston Milliy universiteti Fizika fakulteti magistranti
O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti muhandisi
E-mail: ibraturunov@gmail.com

Faxriddin SAFAROV,

Denov tadbirkorlik va pedagogika instituti stajyor-o'qituvchisi
E-mail: safarov-faxriddin@mail.ru

Islomjon JO'RAYEV,

O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti kichik ilmiy xodimi
E-mail: islom1984jon@gmail.com

Kamoladdin EGAMBERDIEV,

O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti katta ilmiy xodimi
Geologiya fanlari universiteti Aniq va tabiiy fanlar kafedrasida dotsenti
E-mail: kegamberdiev@yandex.ru

Turg'unali AXMADJANOV,

O'zbekiston Milliy universiteti fizika fakulteti Fotonika kafedrtasi mudiri
E-mail: t.akhmadjanov@nuu.uz

Umedjon XALILOV,

O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti bosh ilmiy xodimi
Denov tadbirkorlik va pedagogika instituti o'qituvchisi,
E-mail: umedjon.khalilov@uantwerpen.be

Geologiya fanlari universiteti dotsenti, f.-m.f.d. X.Raximov taqrizi asosida

AGGREGATION MECHANISMS OF MONODISPERSED NiO NANOCCLUSERS

Abstract

Investigating nanocatalyst aggregation mechanisms is important for controlling the size of nanocatalysts in different environments. Despite the aggregation processes of NiO nanoparticles have been studied to some extent in ideal environments, i.e., gas and aqueous solutions, their interaction mechanisms between aqueous media and nanoclusters are still not fully understood. In this work, the environmental effect on the aggregation process of NiO nanoclusters with a size of about 1 nm has been studied using molecular dynamics simulations. Obtained results show that (1) nanoclusters are located at a longer distance from each other in aqueous media in comparison to vacuum due to the hydrodynamic shell (with a thickness of 0.08 nm) formed around the NiO nanoaggregates affected by the aqueous environment, and (2) the stability of NiO nanoclusters in the water environment decreases as a result of the formation of the hydrodynamic shell. The results of our study suggest that a better understanding of the tuning of nanocatalyst size will lead to the selective synthesis of nanomaterials with unique properties, which are the basis of nanotechnology.

Keywords: process modeling, nickel oxide nanocluster, aggregation, stability, reactive molecular dynamics

МЕХАНИЗМЫ АГРЕГАЦИИ МОНОДИСПЕРСНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ NiO

Аннотация

Изучение механизмов агрегации нанокатализаторов важно для контроля размера нанокатализаторов в различных средах. Несмотря на то, что процессы агрегации наночастиц NiO в той или иной степени изучены в идеальных средах, т.е. в газе и водных растворах, механизмы их взаимодействия между водными средами и нанокластерами до конца не изучены. В данной работе влияние окружающей среды на процесс агрегации нанокластеров NiO размером около 1 нм изучалось с помощью молекулярно-динамического моделирования. Полученные результаты показывают, что (1) нанокластеры располагаются на большем расстоянии друг от друга в водной среде по сравнению с вакуумом за счет гидродинамической оболочки (толщиной 0,08 нм), формирующейся вокруг наноагрегатов NiO под воздействием водной среды, и (2) устойчивость нанокластеров NiO в водной среде снижается в результате образования гидродинамической оболочки. Результаты нашего исследования показывают, что лучшее понимание настройки размера нанокатализатора приведет к селективному синтезу наноматериалов с уникальными свойствами, которые являются основой нанотехнологии.

Ключевые слова: моделирование процессов, нанокластер оксид никеля, агрегация, стабильность, реактивная молекулярная динамика.

MONODISPERS NiO NANOKLASTERLARINING AGREGATSIYA MEXANIZMLARI

Annotatsiya

Turli muhitlarda nanokatalizatorlar o'lgamini boshqarishda ularning muhitdagi agregatsiya mexanizmlarini o'rganish fundamental ahamiyatga ega. Garchi NiO nanozarralar agregatsiya jarayonlari ideal muhitlarda (ya'ni, gaz va suvli eritmalarda) qisman o'rganilgan bo'lsada, ularning suvli muhit bilan ta'sir mexanizmlari haligacha to'la tushinilmagan. Ushbu tadqiqotda o'lgami 1 nm atrofidagi NiO nanoklasterlari agregatsiya jarayoniga muhitning ta'siri molekulyar dinamika usuli yordamida o'rganildi. Hisoblash natijalari shuni ko'rsatadiki, (1) suvli muhit ta'sirida NiO nanoagregatlari atrofida hosil bo'lgan

gidrodinamik qobiq (qalinligi 0.08 nm) hisobiga bu nanoagregatlar vakuumdagiga nisbatan bir-biridan uzoqroq masofada joylashadi, hamda (2) bu gidrodinamik qobiqning hosil bo'lishi natijasida NiO nanoklastarlari suv muhitidagi barqarorligi pasayadi. Ushbu tadqiqot nanotexnologiyaning asosini tashkil qilgan noyob fizik xususiyatli nanomateriallarning selektiv sintezi uchun nanokatalizatorlar o'lchamini boshqarishni yaxshiroq tushinishda yordam beradi.

Kalit so'zlar: jarayonlarni modellashirish, nikel oksidi nanoklasteri, agregatsiya, barqarorlik, reaktiv molekulyar dinamika.

Kirish. Hozirda nano o'lchamdagi materiallar, xususan, nanozarralar o'zining noyob mexanik, optik va elektron xususiyatga ega ekanligi bilan mikro o'lchamdagi zarralar xususiyatlaridan tubdan farq qilib, zamonaviy nanotexnologiyada muhim o'ringa ega [1-3]. Xususan, hozirgi nanotexnologiyada, Au, Ag va Pt kabi qimmat metal nanozarralari o'rni bosuvchi nanozarralar olish va ularni sanoatda tadbiiq qilish ustivor vazifalardan biri hisoblanad [4].

Bunday turdagi nanozarralardan biri nikel oksid (NiO) nanozarralari bo'lib, ularning keng taqiqlangan sohaga (3.6–4.0 eV) [5,6] va fotokatalitik xususiyatga egaligi hamda tan narxining arzon ekanligi tufayli bugungi kunda ulardan katalizator [7,8], quyosh panellari [9], gaz sensorlari [10,11] va yuqori issiqlik o'tkazuvchanlikka ega nanosuyuqliklar yaratishda [12] keng qo'llanilmoqda. Bu yerda ularning bir jinsiligi va bir xil o'lchamga ega bo'lishi (monodispers) hal qiluvchi faktorlardan biri hisoblanadi [13].

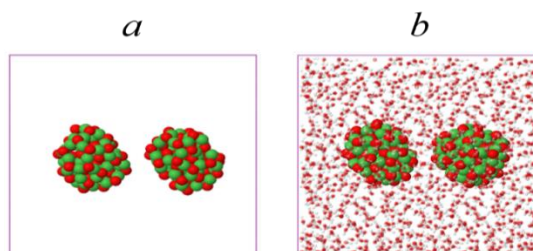
Shunga qaramay, NiO nanozarralari sintezi jarayonida ularning bir-biri bilan qo'shilishi (agregatsiya) sirt bilan bog'liq xususiyatlariga sezilarli ta'sir ko'rsatib, katalitik faolligini keskin tushirib yuborishi bir qator eksperimental tadqiqotlar orqali aniqlangan [14,15]. Ma'lumki, zol-gel usuli yordamida [16,17] bir jinsli NiO nanozarralarini olishda, asosan, yuqori 1073 K kaltsinatsiya temperaturasi (ya'ni qizdirish orqali qattiq kimyoviy birikma tarkibidan uchuvchi moddalarni olib tashlash temperaturasi) talab etiladi. Lekin temperaturani me'yorida ortib ketishi nanozarralar agregatsiya tezligini keskin oshib ketishiga sabab bo'lib, katta o'lchamdagi NiO nanozarralari hosil bo'lishiga olib keladi [14–18]. Bundan tashqari, turli muhitlarda nanozarralar o'lchamini boshqarishda [10] va ularning muhit molekullari bilan o'zaro ta'sirlashishi tufayli vujudga keladigan diffuziya hodisalari [19] mexanizmlarini talqin qilishda hamda nanosuyuqliklarning issiqlik o'tkazuvchanlik samaradorligini oshirishda [20] nanozarralar agregatsiya jarayonlarini o'rganish fundamental ahamiyatga ega [21].

NiO nanozarralar agregatsiya jarayonlari ideal muhitda (ya'ni, gaz va suvli eritmalarida) qisman o'rganilgan bo'lsada [22–25], ularning suyuqlik muhitidagi xususiyatlari molekulyar darajada yetarlicha o'rganilmagan [26,27]. Xususan, NiO nanozarralari konsentratsiyasi oshib borishi bilan nanosuyuqlikning issiqlik o'tkazish xususiyati yaxshilanib borsada [12], nanozarralar konsentratsiyasini 0.6% massaviy ulushdan oshishi nanosuyuqlikda nanoagregatlarning hosil bo'lishiga olib keladi [28]. Buning natijasida nanozarralar sedimentatsiyasi (ya'ni, cho'kma) paydo bo'lib, nanosuyuqlikda "suyuq-qattiq" fazalar vujudga keladi [29]. Bu esa nanosuyuqlik agregat holatining o'zgarishiga va nanosuyuqlik issiqlik tashish xususiyatining yomonlashishiga olib keladi [30,31]. Suyuq muhitda transmissiya elektron mikroskop (TEM) orqali nanoagregatlar o'lchamini aniqlashda namunani o'ta past temperaturada ushlab turish talab etiladi. Bu kabi eksperimental sharoitlar muhit bilan nanozarralar orasidagi o'zaro ta'sir jarayonlariga ta'sir etishi tufayli muhitda nanoagregatlar o'zaro ta'sirining tub mexanizmlari haqida to'liq ilmiy manzara yaratish [32] ham murakkabligicha qolmoqda [33]. Shuning uchun, ushbu ishda, NiO nanoklasterlarining xona temperaturasida agregatsiyalanish jarayoniga suv muhitining ta'siri kompyuterda modellashirish yordamida tadqiq qilindi.

Modellashirish usuli va tafsilotlari

1. *Modellashirish usuli.* NiO nanozarralarining agregatsiya jarayoni reaktiv molekulyar dinamika (MD) usuli [34] orqali modellashirildi. MD usulida, termodinamik tizimdagi har bir atomning joylashgan o'rni va tezligi vaqt birligi ichida Nyuton harakat tenglamalarini yechish orqali aniqlanadi. MD ga asoslangan modellashirishlarda, tizim atomlariga mos ta'sir potentsialini tanlash modellashirish natijalarining ishonchililigiga asos bo'lib xizmat qiladi. Ushbu tadqiqot ishida, tizimdagi Ni, O va H atomlari orasidagi o'zaro ta'sir Zou va boshqalar tomonidan ishlab chiqilgan parametrlarga asoslangan ReaxFF potentsiali orqali ifodalanadi [35]. Ushbu tadqiqot ishida, jarayonlarni modellashirish klassik MD usuliga asoslangan hamda materialshunoslikda fizik-kimyoviy jarayonlarni modellashirishda keng qo'llaniladigan LAMMPS dasturiy to'plamidan foydalanib bajarildi [36].

2. *Modellashirish tafsilotlari.* Bu tadqiqotda diametri 1.15 nm atrofiga bo'lgan 55 ta nikel va 55 ta kislorod atomidan tashkil topgan NiO nanoklasterlaridan foydalanildi. Bu nanoklasterlarning o'lchami eksperimental (1.48 nm [37]) va boshqa MD modellashirish usullari yordamida tadqiq qilingan NiO nanoklasterlarining o'lchamiga (1.30 nm [38]) yaqin. NiO nanoklasterlarining agregatsiyasida muhitning ta'sirini o'rganish uchun modellashirish jarayonlari vakuumda va suvda amalga oshirildi. Modellashirish jarayonlarida muhit sifatida tanlab olingan suv modelining strukturaviy, statik va dinamik parametrlari nazariy va eksperiment orqali olingan qiymatlar bilan mos keladi [39]. Xususan, suv muhitidagi vodorod va kislorod atomlari orasidagi kimyoviy bog' uzunligi 0.098 nm va H-O-H bog'lanish burchagi 104.5° ni tashkil qilib, bu qiymatlar eksperimental [40] va nazariy hisoblash natijalari [41] bilan mos keladi [42]. NiO nanoklasterlari vakuumda joylashgan holat uchun termodinamik tizim 2 ta Ni₅₅O₅₅ nanoklasteri (umumiy 220 ta atom) dan, suv muhitida esa 2 ta Ni₅₅O₅₅ nanoklasteri hamda 2055 ta H₂O suv molekullari (umumiy 6385 ta atom) dan tashkil topadi. Modellashirish jarayonida ikkita NiO nanoklasterlar vakuumda va suvda bir-biridan bir xil uzoqlikda joylashtirilib, ularning massa markazlari orasidagi dastlabki masofa 1.56 nm sifatida olindi. Ularning dastlabki holatdagi ko'rinishlari 1-rasmda tasvirlangan.



1-rasm. NiO nanoklastlarining vakuumdagi (a) va suvdagi (b) ko'rinishlari. Bu yerda Ni, O va H atomlari mos ravishda yashil, qizil, va oq ranglarda tasvirlangan.

Modellashtirish fazosining geometrik o'lchamlari $4 \times 4 \times 4 \text{ nm}^3$ ga teng. Atomlarning bir-biri bilan o'zaro ta'sir doirasi $r_{cut} = 1 \text{ nm}$ [35] ni e'tiborga olib, modellashtirish fazosi o'lchamlari yetarlicha katta ($> 2r_{cut}$) qilib tanlab olindi. Kompyuter imkoniyatlari cheklangani bois, termodinamik tizimdagi juda katta sondagi atomlarni hisobga olish uchun modellashtirish fazosining X, Y va Z yo'nalishlari bo'yicha davriylik shartlari qo'llanildi.

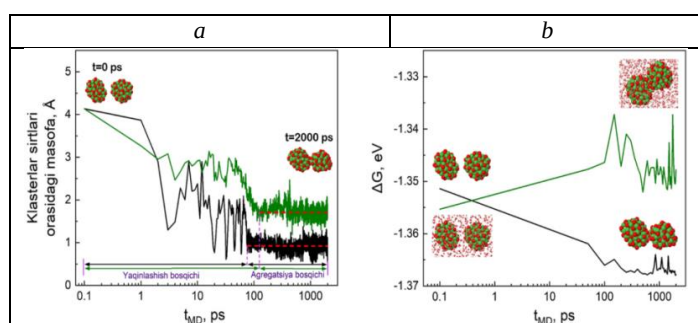
Modellashtirishlarda model tizim energiyasi, dastlab, *keskin tushish* va *birlashgan gradient* usullarini qo'llash orqali minimal darajaga keltirildi. So'ngra, tizimning temperaturasi Nose-Hoover termostati [43] yordamida (NVT ansamblida) 1 K/ps tezlik bilan 300 K gacha qizdirilib, 2 ns davomida ushbu temperaturada ushlab turiladi. Modellashtirishlarda vaqt qadami 0.5 fs sifatida tanlab olindi.

3. *Molyar Gibbs erkin energiyasi.* Muhitdagi NiO nanoklastlari va ular agregatsiya holatining barqarorligi quyidagicha ifodalangan molyar Gibbs erkin energiyasining o'zgarishi (δG) orqali baholandi [44]:

$$\delta G = E_{coh} - \sum \chi_i \mu_i$$

bu yerda E_{coh} – tizimning har bir atomiga to'g'ri keluvchi (kogesiya) energiya. χ_i va μ_i – tizimdagi i turdagi atom konsentratsiyasining tizimdagi jami atomlar konsentratsiyasiga nisbati va uning kimyoviy potentsiali bo'lib, Ni va O uchun bu qiymatlar mos ravishda -4.45 eV va -2.8 eV ga teng [44].

Olingan natijalar va ularning tahlili. NiO nanoklastlarining vakuum va suv muhitida bir-biriga yaqinlashishi nanoklastlar sirtlari orasidagi masofa orqali baholandi. Xususan, 2 a)-rasmida nanoklastlar sirtlari orasidagi masofaning vaqtga bog'liqlik grafigi tasvirlangan. Olingan natijalarga ko'ra, NiO nanoklastlarining agregatsiya jarayonini ikki bosqichga bo'lib tahlil qilish mumkin: (i) “yaqinlashish” (yoki “birikish”) va (ii) “agregatsiya” bosqichlari. Birinchi bosqichda, nanoklastlar sirtlari orasidagi o'rtacha masofa vaqt o'tishi bilan kamayishda davom etsa, ikkinchi bosqichda esa nanoklastlar sirtlari orasidagi o'rtacha masofa vaqt davomida o'zgarib qoladi. Ushbu tadqiqot ishida, NiO nanoklastlari dastlabki holatda bir-biriga juda yaqin joylashganligi sababli nanoklastlar orasida Braun harakati kuzatilmagan, jarayon to'g'ridan-to'g'ri yaqinlashish bosqichidan boshlangan. Vakuumda birinchi va ikkinchi bosqichlar mos ravishda 74 ps (0-74 ps) va 1926 ps (74-2000 ps) davom etsa, suvda esa bu bosqichlar mos ravishda 125 ps (0-125 ps) va 1875 ps (125-2000 ps) davomiylikni tashkil etadi. Xususan, nanoklastlarning agregatsiya jarayoni vakuumdagiga nisbatan 51 ps ga kechikish bilan sodir bo'lishini “nanoklast-suvli muhit” tizimining qovushqoqligi ortishi evaziga [45] Stoks – Eynshteyn qonuni bo'yicha NiO nanoklastlarining suv muhitidagi diffuziya koeffitsiyenti kamayishi [46] orqali tushuntirish mumkin. Nanoklastlar sirtlari orasidagi o'rtacha masofa, dastlab ($t=0$ ps), vakuum va suvli muhitda 0.41 nm ga teng bo'lib, birinchi bosqichda bu masofa vakuumda taxminan 0.09 nm gacha, suvda esa 0.17 nm gacha keskin kamayadi. Natijalar shunga dalolat qiladiki, agregatsiya jarayonida NiO nanoklastlari suvli muhitda vakuumdagiga nisbatan uzoqroq masofada joylashadi.



2-rasm. NiO nanoklastlarining vakuumdagi (qora chiziq) va suvdagi (yashil chiziq) sirtlari orasidagi o'rtacha masofaning (a), hamda molyar Gibbs erkin energiyalari o'zgarishining (b) vaqtga bog'liqligi.

Xususan, jarayonni modellashtirish davomida suvli muhitda joylashgan NiO nanoklastlari sirti bilan suyuq faza o'rtasida hosil bo'lgan qatlarning qalinligi 0.08 nm atrofida ekanligi aniqlandi. Yu [47] va boshqalar [48] tomonidan olib borilgan eksperimental tadqiqot ishlarida suyuqlikdagi nanozarralar atrofida gidrodinamik qobiq paydo bo'lishi va uning o'lchami maksimum 1 nm bo'lishi aniqlangan. Demak, modellashtirish natijasida olingan qiymat tajriba orqali olingan natijalarga yaqin bo'lib, agregatsiya jarayonini o'rganish orqali gidrodinamik qobiq va uning o'lchamini baholash imkonini beradi.

Nanoagregatlarning barqarorlik holatini baholash uchun molyar Gibbs erkin energiya o'zgarishi qo'llanildi [26]. 2 b)-rasmida NiO nanoklastlarning vakuumda va suvda molyar Gibbs erkin energiyaning vaqt o'tishi bilan o'zgarishi tasvirlangan. Natijalar shuni ko'rsatdiki, vakuumda NiO nanoklastlari molyar Gibbs erkin energiyasining jarayon boshidagi qiymati (-1.351 eV) nanoklastlar o'zining hali barqaror holatda emasligi tufayli yaqinlashish bosqichi davomida sekinlik bilan kamayib borib, agregatsiya bosqichida klasterlarning erkin energiyasi o'zining -1.367 eV qiymatida deyarli o'zgarib qoladi. Aksincha, suv muhitida esa vakuumdagidan farqli natijani ko'rishimiz mumkin. Xususan, suvdagi nanoklastlarning molyar Gibbs erkin energiyasi dastlab eng kichik -1.355 eV qiymatiga ega bo'lib, vaqt o'tishi bilan bu qiymat ortib borishi aniqlandi. Olingan qiymatlardagi kuchli o'zgarishlar shunga dalolat qiladiki, nanoagregatlar suv bilan o'zaro ta'sirlashishi tufayli o'zining barqarorligini vakuumdagiga nisbatan kamaytiradi.

Garchi Y. Zang va boshqalar olib borgan tadqiqotlarda turli xil metall oksidi nanozarralarining suv muhitidagi agregatsiyasi vakuumdagiga nisbatan barqarorroq ekanligi haqida xabar berishgan bo'lsada [49], aynan NiO nanozarralari agregatsiyasi bo'yicha ma'lumotlar adabiyotlarda uchramaydi. NiO nanozarralari bo'yicha olingan natijalarimiz boshqa nanoklastlarning suvli muhitda barqarorligi bilan bog'liq eksperimental tadqiqot natijalariga mos kelmasligini nanoklastlarning nisbatan juda kichik o'lchamga egaligi orqali izohlash mumkin. Xususan, ushbu tadqiqot ishida NiO

nanoklasterining o'ldhami eksperimental tadqiqotlarda [47] o'rganilgan nanozarralar o'ldhamidan ancha (taxminan 10–20 marta) kichik bo'lib, suyuq muhitda zarrachaning o'ldhami kichraygan sari uning barqarorligi ham kamayishi mumkinligi haqida boshqa tadqiqotlarda keltirilgan natijalar bilan tushuntirilishi mumkin [50]. Yuqoridagilarni inobatga olganda holda, olgan natijalarimiz shunga dalolat qiladiki, kichik (1.15 nm atrofida) o'ldhamga ega NiO nanoklasterlarining suv muhitidagi agregatsiyasi natijasida hosil bo'lgan nanoagregatlarning barqarorligi gidrofobik qobiq [45, 46] hosil bo'lishi natijasida pasayadi.

Xulosa. Ushbu ishda, NiO nanoklasterlarining agregatsiya jarayoni mexanizmlari reaktiv molekulyar dinamika (MD) usuli orqali o'rganildi. Natijalar shuni ko'rsatadiki, suv muhitida NiO nanoklasterlari orasida taxminan 0.08 nm qalinlikdagi gidrodinamik qobiq hosil bo'lishi sababli nanoklasterlar vakuumdagiga nisbatan bir-biridan uzoqroq masofada joylashadi. Xususan, NiO nanoklasterlari orasidagi masofa (ya'ni gidrodinamik qobiq qalinligi) eksperimental natijalar bilan mos kelib, olingan natijalar gidrodinamik qobiqning sintez jarayoniga ko'rsatadigan ta'sirini yaxshiroq tushunish uchun yordam beradi.

Undan tashqari, gidrodinamik qobiqning hosil bo'lishi natijasida NiO nanoklasterlari suv muhitidagi barqarorligining pasayishi molyar Gibbs erkin energiyasi orqali baholandi. Umuman olganda, ushbu tadqiqot diametri 1- nm atrofida bo'lgan NiO nanoklasterlarining agregatsiyasi tabiatini atomar darajada tushunishga yordam berib, sintez jarayonida nanokatalizatorlarning o'ldhamini boshqarish bo'yicha eksperimentatorlarga ma'lumot beradi.

Tashakkurnoma. Ushbu tadqiqot ishi O'zbekiston Respublikasi Innovatsion rivojlanish vazirligi tomonidan moliyalashtirilgan F-FA-2021-512 fundamental loyiha doirasida bajarildi. Modellashtirish ishlari O'zR FA, Ion-plazma va lazer texnologiyalari institutidagi NanoSim guruhi tomonidan tashkil etilgan FISTUZ superkompyuterlar klasteri yordamida olib borildi.

ADABIYOTLAR

1. Z. Lu and Y. Yin, Colloidal Nanoparticle Clusters: Functional Materials by Design, Chem. Soc. Rev. 2012, 41, 6874.
2. Huang, He, et al. Colloidal Lead Halide Perovskite Nanocrystals: Synthesis, Optical Properties and Applications, NPG Asia Mater. 2016, 8, e328.
3. Hu, Jiangtao, et al. Controlled Growth and Electrical Properties of Heterojunctions of Carbon Nanotubes and Silicon Nanowires, Nature 1999, 399, 48.
4. Jin, Rongchao, et al. Atomically Precise Colloidal Metal Nanoclusters and Nanoparticles: Fundamentals and Opportunities, Chem. Rev. 2016, 116, 10346.
5. Swagten, H. J. M., et al. Enhanced Giant Magnetoresistance in Spin-Valves Sandwiched between Insulating NiO, Phys. Rev. 1996, B 53, 9108.
6. Yang, Huaming, et al. Solid-State Synthesis and Electrochemical Property of SnO₂/NiO Nanomaterials, J. Alloys Compd. 2008, 459, 98.
7. Harraz, F. A., et al. Composition and Phase Control of Ni/NiO Nanoparticles for Photocatalytic Degradation of EDTA, J. Alloys Compd. 2010, 508, 133.
8. Hayat, Khizar, et al. Effect of Operational Key Parameters on Photocatalytic Degradation of Phenol Using Nano Nickel Oxide Synthesized by Sol–Gel Method, J. Mol. Catal. Chem. 2011, 336, 64.
9. J. Bandara and J. P. Yasomane, P-Type Oxide Semiconductors as Hole Collectors in Dye-Sensitized Solid-State Solar Cells, Semicond. Sci. Technol. 2006, 22, 20.
10. A. Aslani, V. Oroojpour, and M. Fallahi, Sonochemical Synthesis, Size Controlling and Gas Sensing Properties of NiO Nanoparticles, Appl. Surf. Sci. 2011, 257, 4056.
11. Liu, Bin, et al. Synthesis and Enhanced Gas-Sensing Properties of Ultralong NiO Nanowires Assembled with NiO Nanocrystals, Sens. Actuators B Chem. 2011, 156, 251.
12. Chen, Zhixiong, et al. Evaluation of Thermal Conductivity of Deionized Water Containing SDS-Coated NiO Nanoparticles under the Influences Of constant and Alternative Varied Magnetic Fields, Powder Technol. 2020, 367, 143.
13. Lang, Fengpei, et al. Improved Size-Tunable Synthesis of Monodisperse NiO Nanoparticles, Mater. Lett. 2016, 181, 328.
14. Han, D. Y., et al. Synthesis and Size Control of NiO Nanoparticles by Water-in-Oil Microemulsion, Powder Technol. 2004, 147, 113.
15. Du, Yu, et al. Preparation of NiO Nanoparticles in Microemulsion and Its Gas Sensing Performance, Mater. Lett. 2012, 68, 168.
16. Mateos, D., et al. Synthesis of High Purity Nickel Oxide by a Modified Sol-Gel Method, Ceram. Int. 2019, 45, 11403.
17. K. P. Raj, V. Thangaraj, and A. P. Uthirakumar, Synthetic Routes to Nickel Oxide Nanoparticles-an Overview, Chemistry 1990, 1980, 6.
18. N. N. M. Zorkipli, N. H. M. Kaus, and A. A. Mohamad, Synthesis of NiO Nanoparticles through Sol-Gel Method, Procedia Chem. 2016, 19, 626.
19. Jose-Yacaman, M., et al. Surface Diffusion and Coalescence of Mobile Metal Nanoparticles, J. Phys. Chem. B 2005, 109, 9703.
20. W. Yu and S. U. S. Choi, The Role of Interfacial Layers in the Enhanced Thermal Conductivity of Nanofluids: A Renovated Maxwell Model, J. Nanoparticle Res. 2003, 5, 167.
21. Jiang, Di, et al. Determining the Aggregation Kinetics of Nanoparticles by Single Nanoparticle Counting, ACS EST Water 2020, 1, 672.
22. J. A. Medford, A. C. Johnston-Peck, and J. B. Tracy, Nanostructural Transformations during the Reduction of Hollow and Porous Nickel Oxide Nanoparticles, Nanoscale 2013, 5, 155.
23. Siddiqui, Maqsood A., et al. Nickel Oxide Nanoparticles Induce Cytotoxicity, Oxidative Stress and Apoptosis in Cultured Human Cells That Is Abrogated by the Dietary Antioxidant Curcumin, Food Chem. Toxicol. 2012, 50, 641.
24. Sun, Jing, et al. UV Irradiation Induced Transformation of TiO₂ Nanoparticles in Water: Aggregation and Photoreactivity, Environ. Sci. Technol. 2014, 48, 11962.
25. S. Shrestha, B. Wang, and P. Dutta, Nanoparticle Processing: Understanding and Controlling Aggregation, Adv. Colloid Interface Sci. 2020, 279, 102162.

26. D. Spagnoli, J. F. Banfield, and S. C. Parker, Free Energy Change of Aggregation of Nanoparticles, *J. Phys. Chem. C* 2008, 112, 14731.
27. M. Alimohammadi and K. A. Fichthorn, Molecular Dynamics Simulation of the Aggregation of Titanium Dioxide Nanocrystals: Preferential Alignment, *Nano Lett.* 2009, 9, 4198.
28. Gupta, V., et al. Investigations on Acoustical and Thermal Properties of Ethylene Glycol Based Nickel Oxide Nanofluids: Concentration and Temperature, *Russ. J. Phys. Chem. A* 2020, 94, 2312.
29. Jiang, Weiting, et al. Modeling of Nanoparticles' Aggregation and Sedimentation in Nanofluid, *Curr. Appl. Phys.* 2010, 10, 934.
30. N. R. Karthikeyan, J. Philip, and B. Raj, Effect of Clustering on the Thermal Conductivity of Nanofluids, *Mater. Chem. Phys.* 2008, 109, 50.
31. K. S. Hong, T.-K. Hong, and H.-S. Yang, Thermal Conductivity of Fe Nanofluids Depending on the Cluster Size of Nanoparticles, *Appl. Phys. Lett.* 2006, 88, 031901.
32. P. Grammatikopoulos, M. Sowwan, and J. Kiouoglou, Computational Modeling of Nanoparticle Coalescence, *Adv. Theory Simul.* 2019, 2, 1900013.
33. Lizunova, A. A., et al. Comparison of the Results of Measurements of the Sizes of Nanoparticles in Stable Colloidal Solutions by the Methods of Acoustic Spectroscopy, Dynamic Light Scattering, and Transmission Electron Microscopy, *Meas. Tech.* 2017, 59, 1151.
34. B. J. Alder and T. E. Wainwright, Phase Transition for a Hard Sphere System, *J. Chem. Phys.* 1957, 27, 1208.
35. Zou, Chenyu, et al. Molecular Dynamics Simulations of the Effects of Vacancies on Nickel Self-Diffusion, Oxygen Diffusion and Oxidation Initiation in Nickel, Using the ReaxFF Reactive Force Field, *Acta Mater.* 2015, 83, 102.
36. S. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *J. Comput. Phys.* 1995, 117, 1.
37. Lu, Yulan, et al. A Combined DFT and Experimental Study on the Nucleation Mechanism of NiO Nanodots on Graphene, *J. Mater. Chem. A* 2018, 6, 13717.
38. P. Van de Sompel, U. Khalilov, and E. C. Neyts, Contrasting H-Etching to OH-Etching in Plasma-Assisted Nucleation of Carbon Nanotubes, *J. Phys. Chem. C* 2021, 125, 7849.
39. Yusupov, M., et al. Reactive Molecular Dynamics Simulations of Oxygen Species in a Liquid Water Layer of Interest for Plasma Medicine, *J. Phys. Appl. Phys.* 2014, 47, 025205.
40. F. Franks, *Water A Comprehensive Treatise: Aqueous Solutions of Amphiphiles and Macromolecules* 1975 (Springer US, Boston, MA).
41. S. W. Rick, S. J. Stuart, and B. J. Berne, Dynamical Fluctuating Charge Force Fields: Application to Liquid Water, *J. Chem. Phys.* 1994, 101, 6141.
42. Fogarty, Joseph C., et al. A Reactive Molecular Dynamics Simulation of the Silica-Water Interface, *J. Chem. Phys.* 2010, 132, 174704.
43. D. J. Evans and B. L. Holian, The Nose-Hoover Thermostat, *J. Chem. Phys.* 1985, 83, 4069.
44. U. Khalilov and E. C. Neyts, Mechanisms of Selective Nanocarbon Synthesis inside Carbon Nanotubes, *Carbon* 2021, 171, 72.
45. Huminic, Angel, et al. Thermal Conductivity, Viscosity and Surface Tension of Nanofluids Based on FeC Nanoparticles, *Powder Technol.* 2015, 284, 78.
46. G. Lu, Y.-Y. Duan, and X.-D. Wang, Surface Tension, Viscosity, and Rheology of Water-Based Nanofluids: A Microscopic Interpretation on the Molecular Level, *J. Nanoparticle Res.* 2014, 16, 2564.
47. Yu, C.-J., et al. Molecular Layering in a Liquid on a Solid Substrate: An X-Ray Reflectivity Study, *Phys. B Condens. Matter* 2000, 283, 27.
48. Li, Ling, et al. An Investigation of Molecular Layering at the Liquid-Solid Interface in Nanofluids by Molecular Dynamics Simulation, *Phys. Lett. A* 2008, 372, 4541.
49. Zhang, Yang, et al. Stability of Commercial Metal Oxide Nanoparticles in Water, *Water Res.* 2008, 42, 2204.
50. Nithiyanantham, Udayashankar, et al. Effect of Silica Nanoparticle Size on the Stability and Thermophysical Properties of Molten Salts Based Nanofluids for Thermal Energy Storage Applications at Concentrated Solar Power Plants, *J. Energy Storage* 2022, 51, 104276.



Nasiba XODJAEVA,

O'zMU Fizika fakulteti Yarimo'tkazgichlar va Polimerlar fizikasi kafedrası laboratoriya mudiri

Jaxongir XAQQULOV,

O'zMU Fizika fakulteti Yarimo'tkazgichlar va Polimerlar fizikasi kafedrası o'qituvchisi PhD

Zokir TEMIROV,

O'zMU Fizika fakulteti Yarimo'tkazgichlar va Polimerlar fizikasi kafedrası o'qituvchisi

Abdulfatto XOLMO'MINOV,

O'zMU Fizika fakulteti Yarimo'tkazgichlar va Polimerlar fizikasi kafedrası mudiri prof.f.m.f.d.,

E-mail: Xajayevanasiba588@gmail.ru

O'zRFA Polimerlar kimyosi va fizikasi instituti katta ilmiy xodimi, PhD S.S. Yarmatov taqrizi asosida

POLIMER TARKIBLI NANOTOLALI QOPLAMA: OLINISHI VA FIZIK-KIMYOVIY XOSSALARI

Annotatsiya

Mazkur maqolada akrilonitril sopolimeri asosida elektrospinning orqali nanotola olish uchun turli konsentratsiyali eritmalar olingan. Olingan eritmalarining qovushqoqlik xossalari aniqlangan. Akrilonitril sopolimeri eritmaları asosida elektrospinning usulida nanotolalar olingan va ularning morfologik xossalari xamda o'lchamlari skanerlovchi elektron mikroskop yordamida o'rganildi. Olingan natijalardan diametri 50-200 nm o'lchamli nanotolalar hosil bo'lganligi tasdiqlandi. Akrilonitril asosida olingan nanotolalarining rentgenotuzulish va sorbsion xossalari o'rganilgan.

Kalit so'zlar. nanotola, fizik-kimyoviy xossalar, nanokompozitsiya, polimer, elektrospinning, eritma.

ПОЛИМЕРСОДЕРЖАЩЕЕ НАНОВОЛОКОННОЕ ПОКРЫТИЕ: ПОЛУЧЕНИЕ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Аннотация

В данной статье получены растворы различной концентрации для получения нановолокон на основе сополимера акрилонитрила методом электроспиннинга. Определены вязкостные свойства полученных растворов.

Были получены нановолокна методом электроспиннинга на основе растворов сополимеров акрилонитрила, а их морфологические свойства и размеры изучены с помощью сканирующего электронного микроскопа. Из полученных результатов было подтверждено, что формируются нановолокна диаметром 50-200 нм. Исследованы рентгеноструктурные и сорбционные свойства нановолокон на основе акрилонитрила.

Ключевые слова. нановолокно, физико-химические свойства, нанокomпозиция, полимер, электроспиннинг, раствор.

POLYMER CONTAINING NANOFIBER COATING: PREPARATION AND PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES

Abstract

In this article, solutions of different concentrations were obtained for obtaining nanofibers based on acrylonitrile copolymer by electrospinning. Viscosity properties of the resulting solutions were determined. Nanofibers were obtained by electrospinning on the basis of acrylonitrile copolymer solutions, and their morphological properties and dimensions were studied using a scanning electron microscope. The obtained result confirmed the formation of nanofibers with a diameter of 50-200 nm. X-ray scattering and absorption properties of acrylonitrile-based nanofibers were studied.

Key words. Nanofiber, physicochemical properties, nanocomposites, polymer, electrospinning, solution.

Kirish. Nanokompozitsion qoplamalar olishning ilmiy asoslari ipak fibroini, xitozan, kollagen, natriy-karboksimetilsellyuloza, so-akrilonitril, poliakrilamid kabi mahalliy ionogen polimerlar asosida ishlab chiqiladi va bu hol mahalliy xom ashyolarni qayta ishlashning yangi fundamental asoslari va qonuniyatlarini ochib berilishi bilan ilmiy ahamiyat kasb etadi [1]. Keltirilgan polimerlar asosida nanozarrachalar va nanotolalar olingan bo'lsada [2], ularni elektrokimyoviy va elektrofizikaviy usullarda bir bosqichli jarayonlarda elektr maydonida to'ldiruvchi va matritsani shakllantirib nanokompozit qoplamalar olishning ilmiy asoslari va prinsiplari ishlab chiqilmagan [3].

Nanokompozitsion qoplamalar olish uchun makroionlar elektrokimyoviy tiklanish asoslarini yaratish maqsadida elektroliz usulini takomillashtirilishi va qo'llanilishi nanotexnologiyalar va nanomaterialshunoslik sohasida nanozarralar tutgan nanokompozitsion materiallar olishning yangicha yondashuvi sifatida muhim ilmiy ahamiyat kasb etadi [4]. Elektrokimyoviy tiklanish usuli asosan metal ionlarni tiklashda, qisman polimer makroionlarni tiklashda ham qo'llanilib kelinmoqda. Ammo bu usulning polimer makroionlar uchun keng imkoniyatlari ochib berilmagan, ayniqsa, makroion-ion tizimidan nanokompozitsion material olishning, ya'ni bir bosqichda metal ionlarni nanozarrachalar bo'lib, polimer makroionlarni matritsa bo'lib shakllanishining ilmiy prinsiplarini yaratish dolzarb muammolardan hisoblanadi [5].

Nanozarrachali va nanotolali noto'qima nanokompozitsion materiallar olishning elektrospinning usulini mahalliy ionogen polimerlar uchun takomillashtirilishi bu yo'nalishdagi dolzarb ilmiy tadqiqot vazifalardan bo'lib, fundamental prinsiplarini yaratilishi nanomaterialshunoslikda muhim ilmiy ahamiyat kasb etadi [6]. Hozirda elektrospinning usulida olingan nanotolali noto'qima qoplamali biomateriallar tibbiyot amaliyotida samarali qo'llanilmoqda [7]. Bunday bionanomateriallarni ochiq yaralar yuzasini qoplash orqali ularni himoyalovchi va davolovchi, suyuqlik va gazlarni tozalovchi selektiv nanofiltrlar sifatida qo'llanilishi mumkin. Mazkur yo'nalishda elektrospinning usulining imkoniyati juda keng bo'lib, bu usul vositasida nanotolalar asosida nanokompozitsion biomateriallar olinishi mumkin [8].

Mazkur maqolaning asosiy maqsadi akrilonitril sopolimeri asosida nanotolali materiallarni shakllantirish va ularning fizik-kimyoviy xossalarni belgilashdan iborat.

Tadqiqot metodologiyasi. Nanotolali materiallar olish usuli. Polimer eritma va aralashmalardan nanotolalar shakllantirishning oddiy laboratoriya elektrospinning qurilmasini surati 1-rasmda keltirilgan.



1-rasm. Elektrospinning qurilmasi (a) va nanotolalar (b)

Ushbu nanotolalar shakllantirish elektrospinning qurilmasi uch qismdan iborat:

- birinchi qismda, polimer eritma maxsus shpris filerasidan, ya'ni diametri 0,5 mm bo'lgan kapillyardan o'rtacha 1 ml/s hajmiy tezlik bilan siqib chiqariladi;

- ikkinchi qismda, kapillyardan chiqayotgan oqimga yuqori kuchlanishli anod toki ($U = 0,5 \div 50$ kV diapazonida) beriladi va oqim katodga tomon sochiladi. Bunda hosil bo'lgan elektr maydoni kuchlanganligi (E) berilayotgan yuqori kuchlanishni (U) anod (filera) va katod (ekran) orasidagi masofaga (l) nisbati ($E = U/l$, birligi kV/m) bilan ifodalanadi;

- uchinchi qismda esa katod (ekran) sochilgan oqimni o'ziga tortadi va natijada polimer va erituvchi o'rtasida fazaviy ajralish ro'y beradi, ya'ni tortilib, eshilib tola bo'lib shakllanayotgan polimer fazasi katodga boradi va erituvchi esa bug'lanib ketadi. Ekranga deyarli to'liq shakllangan nanotolalar kelib tushadi va yassi noto'qima material bo'lib taxlanadi.

Mazkur elektrospinning uskunasida bir qator mahalliy tabiiy va sintetik polimerlar asosida nanotolalar shakllantirilgan (1-jadval).

1-jadval. Mahalliy polimerlar asosida shakllantirilgan nanotolalar.

№	Elektrospinning uchun eritma tizimi			Elektrospinning natijasi	
	Polimer	Erituvchi	S, g/dl	E , kV/m	d_m , nm
1	Akrilonitril sopolimeri	DMFA	5 - 15	0,2 - 1,0	50 - 500

Tadqiqot ob'ekti sifatida tanlangan sopolimer akrilonitril, metakrilat va itakonik kislota birliklari "Navoiyazot" AJ tomonidan Nitron mikrotolalari (92 : 4.5 : 3.5) ishlab chiqarish uchun ishlatiladi [9].

Rentgenografik tadqiqotlar DRON-3M (Rossiya) difraktometrida 22kV kuchlanishda va 10 mA tok kuchida monoxromatlangan $\text{CuK}\alpha$ -nurlanishining, nikel yordamida filtrlangan to'lqin uzunligi $\lambda = 1,5418$ Å bo'lgan rentgen nurlarining, $2\theta = 2^\circ - 75^\circ$ sohaslarida olib borildi. Kristallanish darajasini hisoblash va maksimal cho'qqining intensivligini baholashda quyidagi tenglamadan foydalanildi.

$$\chi = \frac{I_k}{I_k + I_a} \cdot 100\%,$$

bu yerda, I_k va I_a -mos ravishda kristall va amorf holatlarning nur sochilish intensivligi, K – tuzatish koeffitsienti.

Kristallarning o'lchami Debay-Sherrer tenglamasi orqali hisoblandi. [10]

$$L = \frac{k\lambda}{\beta \cos\theta},$$

bu yerda L - kristallning hajmi (Å); λ - to'lqin uzunligi bo'lib, 1,5418 Å ga teng; 2θ -Bragg burchagi (gradus); k - kristall shakliga bog'liq koeffitsient, $k = 0,9$; β - yarim balandlikdagi pik (daraja).

Tahlil va natijalar. Nanotolalar nafaqat polimer eritmalaridan, balki ularning aralashmalaridan ham olinishi mumkin [11]. Bunda polimer komponentlarning tabiatiga bog'liq tarzda noyob va maxsus xossalarni namoyon bo'ladi. Shuningdek, alohida polimer eritmalarini ketma-ket nanotolalar shakllantirish orqali nanoqatlamli materiallar olinishi mumkin va bunday materiallar ham o'ziga xos noyob va maxsus xossalarni namoyon qiladi.

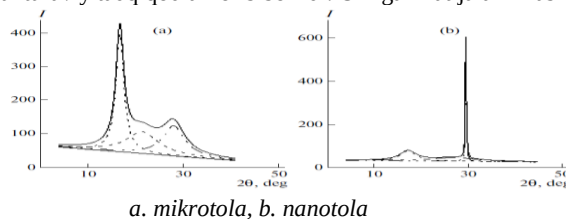
Polimer asosidagi nanotolali materiallarning o'ziga xos jihatlari:

- noyob xossalarni – bu nanotolalarni boshqa tur va o'lchamlardagi tolalardan yuqori ko'rsatkichlarda fizik xossalarni namoyon qilishidir;

- maxsus xossalarni esa – bu nanotolalarga, ularning tarkibiy elementlari, jumladan polimer turi va funksional imkoniyati hamda nanotolalar elektrospinning jarayonini ma'lum shakllantirish rejimini amalga oshirish tufayli yuzaga keladigan fizik xossalardir [12].

Har ikkala xossaning bir paytning o'zida namoyon bo'lishi muhim bo'lib, buni amalga oshirish uchun, avvalombor, nanotolalarning tabiatidan kelib chiqqan holda, ularning eng oddiy va muhim fizik xossalarni aniqlash zarur bo'ladi. Bunday birlamchi xossalardan biri, bu nanotolalarning sirt faolligi bo'lib, bu xossa barcha nanotolalarda o'ziga xos qonuniyatlar asosida namoyon bo'ladi.

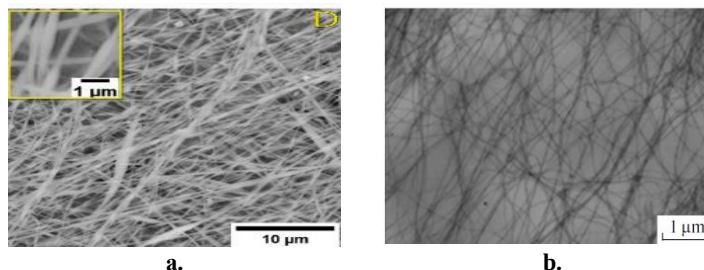
Ishni dastlabki bosqichida akrilonitril sopolimeri eritmalaridan elektrospinning asosida mikrotolalar va nanotolalar namunalari olindi va ularni rentgenostrukturaviy tadqiqodlari olib borildi. Olingan natijalar 2-rasmda keltirilgan.



2-rasm. Akrilonitril sopolimeri asosida olingan nanotolaning rentgenostrukturaviy tahlili natijasi.

Olingan natijalardagi 2-rasmdan ko'rinadiki akrilonitril sopolimeri asosida olingan mikrotolaga nisbatan nanotolalarda 29° burchakda intensivligi nisbatan yuqori bo'lgan piklarni namoyyon qilganligi va undagi kristallanish darajasi 88 % ga teng ekanligi aniqlandi. Akrilonitril asosida olingan mikrotolalarning kristallanish darajasi 57 % ga teng ekanligi Debay-Sherrer tenglamasi orqali hisoblandi. Bundan tashqari elektrosinning usulida nanotolalar olish jarayonida shakllanayotgan nanotolalarning o'lchamlarining kichrayishi va sirt yuzalarining ortishi hisobiga tolalarning o'zaro zich joylashishiga bog'liq bo'lishi mumkin. Mazkur taxminni tasdiqlash uchun akrilonitril sopolimeri asosida olingan mikrotolalar va nanotolalarning elektron mikroskopik tadqiqotlar olib borildi. Olingan natijalar 2-rasmda keltirilgan.

Skannerlovchi elektron mikroskopik tadqiqotlardan olingan natijalardagi 3- rasmdan ko'rinadiki akrilonitril asosida olingan mikrotolalarning o'lchamlarining diametri 400-900 mkm bo'lgan va tolalarning orasidagi bo'shliq nisbatan bir-biridan keng joylashgan. (3-rasm, a).



3-rasm. Akrilonitril sopolimeri asosida olingan mikrotola (a), nanotolaning (b) skannerlovchi elektron mikroskopik (SEM) tahlili natijasi.

Akrilonitril sopolimeri asosida olingan nanotolalarning o'lchamlari 60 - 200 nm diametrgacha bo'lgan va tolalar orasi nisbatan zich joylashganligini kuzatish mumkin (3-rasm, b).

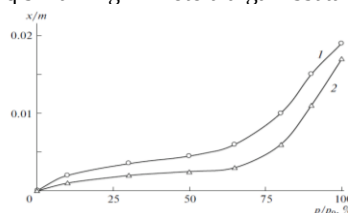
Ishning navbatdagi qismida akrilonitril sopolimeri asosida olingan mikrotolalar va nanotolalarning sorbsion xossalarini aniqlash uchun ilmiy tadqiqotlar olib borildi. Olingan natijalar 2-jadvalda keltirilgan.

Olingan 2 - jadvaldagi natijalardan ko'rinadiki akrilonitril sopolimeri asosida olingan nanotolalarning sorbsion xossalari akrilonitril sopolimeri asosida olingan mikrotolalarga nisbatan kichik qiymatlarga ega (4-rasm).

2 - jadval. Akrilonitril sopolimeri asosida olingan mikrotola (a), nanotolaning (b) sorbsion xossalari.

No	Namunalar	X_m , g/g	S_{sp} , m ² /g	W_0 , sm ³ /g	r_{co} , Å
1	Akrilonitril sopolimeri asosida olingan mikrotola	0.00280	9.859	0.019	38.54
2	Akrilonitril sopolimeri asosida olingan nanotola	0.00174	6.110	0.017	21.40

Bu esa o'z navbatida akrilonitril asosida olingan nanotolalar orasida nanog'ovaklar hosil bo'lganligi va tolalarning kristallanish darajasining yuqoriligi undagi amorf qismlarning mikrotolalarga nisbatan kamligi bilan izohlanishi mumkin.



4-rasm. Akronitril sopolimeri asosida olingan mikrotola (1) va nanotolaning (2) suv bug'larini sorbsiyalash xossalari.

Olingan natijalardagi 3-rasmdan ko'rinadiki akrilonitril sopolimeri asosida olingan mikrotolalarning (1) suv bug'larining sorbsiyalashda nanotolalarga (2) nisbatan yuqori bo'lgan. Bu holat mikrotolalarning nanotolalarga nisbatan yuqori g'ovak qatlamlarga egaligi undagi kristallik darajasining nisbatan pastligi va tolalar orasidagi mikrog'ovaklarning o'lchami kattaligi bilan izohlanadi. Akrilonitril asosida olingan nanotolalarda esa kristallanish darajasining yuqoriligi undagi makromolekula qatlamlarining zich joylashganligi va nanog'ovaklarning yig'indisi nisbatan kichikligi undagi suv bug'larini sorbsiyalash imkoniyatlarini chegaralashga olib kelganligi mumkin.

Xulosalar. Tanlangan polimer namunalarni elektrokimyoviy va elektrofizikaviy tadqiqotlarini o'tkazish uchun suyuq fazali tizimlarini hosil qilish maqsadida akrilonitril sopolimeri uchun erituvchi tanlangan, hamda ulardan ionogen tabiatli eritmalar tayyorlashning optimal sharoitlari aniqlangan.

Akrilonitril sopolimeri asosida olingan nanotolalarning o'lchamlari 60 - 200 nm diametrgacha bo'lgan tolalar olindi va ularning fizik-kimyoviy xossalari o'rganildi. Akrilonitril sopolimeri asosida olingan nanotolalarning sorbsion xossalari akrilonitril sopolimeri asosida olingan mikrotolalarga nisbatan kichik qiymatlarga egaligi va akrilonitril asosida olingan nanotolalar orasida nanog'ovaklar xosil bo'lganligi va tolalarning kristallanish darajasining yuqoriligi undagi amorf qismlarning mikrotolalarga nisbatan kamligi tajriba asosida ko'rsatib berildi.

Akrilonitril sopolimeri asosida olingan nanotolalar tibbiyot amaliyotida yiringli yaralarni davolashda samarali vosita sifatida keng qo'llanilishi mumkin.

ADABIYOTLAR

1. Zamani M., Prabhakaran M.P., Ramakrishna S. /Advances in drug delivery via electrospun and electrosprayed nanomaterials. Int. J. Nanomedicine, 2013, 8, pp. 2997-3017.
2. Reddy V.S., Tian Y., Zhang C., Ye Z., Roy K., Chinnappan A., Ramakrishna S., Liu W., Ghosh R. /A Review on Electrospun Nanofibers Based Advanced Applications: From Health Care to Energy Devices. Polymers, 2021, 13(21), pp. 3746-3785.
3. Zheng-Ming Huang., Zhang Y.-Z., Kotaki M., Ramakrishna S. / A review on polymer nanofibers by electrospinning and their applications in nanocomposites, Composites Science and Technology, 2003, 63(15), pp. 2223-2253.

4. Zulfi Akmal, Наридин Диан Ahmad, Мунир Muhammad Miftahul, Iskandar Ferry, Khaingurrijal Khaingurrijal /The synthesis of nanofiber membranes from acrylonitrile butadiene styrene (ABS) waste using electrospinning for use as air filtration media. RSC Advances, 2019, 9(53), pp. 30741–30751.
5. Luo C., Stoyanov S.D., Stride E., Pelan E., Edirisinghe M. /Electrospinning versus fibre production methods: from specifics to technological convergence. Chem. Soc. Rev., 2012, 41, pp. 4708-4735.
6. Bhardwaj N., Kundu S.C. /Electrospinning: a fascinating fiber fabrication technique. Biotechnol. Adv., 2010, 28, pp. 325-347.
7. Ghajari A., Navi S., Talebian A. /Biomedical Applications of Nanofibers. Russ J Appl Chem., 2021, 94(7), pp. 847–872.
8. Rimmann M., Jünger A., Mousavi S., Moeschlin N., Calcagni M., Wuertz-Kozak K., Brunner F., Dudley S., Distler O., Adlhart C. / Acrylonitrile and Pullulan Based Nanofiber Mats as Easily Accessible Scaffolds for 3D Skin Cell Models Containing Primary Cells. Cells. 2022, 11(3), pp. 445-461.
9. Mukhamedzhanova M. Yu., Shirshova N. D., Khamrakulov G., Rashidova S. Sh., Tr. IkhFP Akad. Nauk Resp. Uzbekistan, 2001, s. 64.
10. Мартинов М.А., Вилегжанина К.А. Рентгенография полимеров. Л.: Химия. Методы исследования структуры и свойств полимеров. 1972. s. 94.
11. Ganesan Anusiya, Rengarajan Jaiganesh /A review on fabrication methods of nanofibers and a special focus on application of cellulose nanofibers, Carbohydrate Polymer Technologies and Applications, 2022, 4, pp. 100262-100276.
12. Fadil F, Affandi N.D.N., Misnon M.I., Bonnia N.N., Harun A.M. Alam M.K. /Review on Electrospun Nanofiber-Applied Products. Polymers, 2021, 13, pp. 2087-2118.



Исобеков ХОЛБАЕВ,
Профессор Национальный университет Узбекистана
Сатимбой ПАЛВАНОВ,
Профессор Национальный университет Узбекистана
Гўзал АТАЖАНОВА,
базовый докторант Национальный университет Узбекистана
E-mail: guatajanova@gmail.com

Рецензент: доцент М. Юлдашев

ВОЗБУЖДЕНИЕ ИЗОМЕРНЫХ СОСТОЯНИЙ В РЕАКЦИИ ТИПА (n,2n) НА ЯДРАХ $^{108,110}\text{Pd}$

Аннотация

Методом наведенной активности измерены изомерные отношения выходов и сечений (n,2n)-реакций на ядрах $^{108,110}\text{Pd}$. Экспериментальные изомерные отношения сравниваются с результатами других работ и рассчитанными результатами по статистической модели ядра.

Ключевые слова: активность, изомер, ядро, ядерная реакция, фотоядерная реакция, изотоп, радиоактивность, сечение, спин, нейтрон.

$^{108,110}\text{Pd}$ ЯДРОЛАРДАГИ (n,2n) ТУРДАГИ РЕАКЦИЯЛАРДА ИЗОМЕР ҲОЛАТЛАР УЙҒОНИШИ

Аннотация

Киритилган активлик методи билан $^{108,110}\text{Pd}$ ядроларда (n,2n)-реакциялар изомер чиқишлар ва кесимлар нисбати ўлчанган. Экспериментал изомер чиқишлар нисбати бошқа ишлар натижалари ва ядро статистик модели бўйича ҳисобланган натижалар билан солиштирилган.

Калит сўзлар: активлик, изомер, ядро, ядро реакцияси, фотоядро реакцияси, изотоп, радиоактивлик, кесим, спин, нейтрон.

EXCITATION OF ISOMERIC STATES IN REACTIONS OF THE (n,2n) TYPE ON $^{108,110}\text{Pd}$ NUCLEI

Annotation

The isomeric yield ratios and cross-section ratios of (n,2n)-reactions on nuclei $^{108,110}\text{Pd}$ have been measured by the induced radioactivity method. Experimental isomeric ratios are compared with other experimental data and with calculations by a statistical model of nuclei.

Keywords: activity, isomeric, nuclear of atom, nuclear reaction, photonuclear reaction, isotopes, radioactivity, cross section, spin, neutron.

Исследование относительная вероятность возбуждения, т.е. изомерные отношения выходов и сечений реакции позволяет получить информацию о механизме реакции, в частности, о моменте инерции ядра, о спиновой зависимости плотности уровней и о характере переходов между высоковозбужденными ядерными состояниями [1].

Изомерные отношения выходов и сечений реакции $^{110}\text{Pd}(\gamma, n)^{109\text{m}}\text{Pd}$ изучены в основном в области гигантского дипольного резонанса. В области энергий выше 24 МэВ имеется несколько работ [2,3]. В случае реакции (n,2n), несмотря на проведение многочисленных экспериментов при 14 МэВ, очень мало данных по отдельным измерениям сечений изомерного и основного уровней.

В настоящей работе методом наведенной активности исследованы сечения образования изомерных состояний $^{109\text{m}}\text{Pd}$ в реакциях типа (n,2n) на ядре ^{110}Pd при энергии нейтронов $E_n=14,1$ МэВ. Также с помощью программного пакета TALYS-1.6 была моделирована фотоядерная реакция $^{110}\text{Pd}(\gamma, n)^{109\text{m}}\text{Pd}$ в области энергий от порога до 40 МэВ.

Эксперименты проводились на нейтронном генераторе НГ-150 ИЯФ АН РУз [4]. Нейтронный генератор НГ-150 реализует потоки быстрых нейтронов с энергиями ~ 2.4 и 14 МэВ из реакций $D+d \rightarrow {}^3\text{He}+n$ или $T+d \rightarrow \alpha+n$ при использовании дейтериевых и тритиевых мишеней. При этом потоки нейтронов составляют соответственно ~ 10^8 и 10^{10} н/сек. Время облучения нейтронным потоком с энергией 14,1 МэВ составляет 50 мин. Мониторинг потока нейтронов осуществлялся с помощью пластинки из алюминия натурального изотопного состава, которые облучались вместе с мишенями. В качестве мишеней использовались образцы палладия в природной смеси изотопов массой 1-2 г в виде металлической фольги. Время облучения 40÷60 мин.

Наведенная γ -активность мишеней измерялась на гамма-спектрометре фирмы Canberra, состоящем из германиевого детектора HPGe (с относительной эффективностью - 15 %, разрешением для линии ^{60}Co 1332 кэВ – 1,8 кэВ), цифрового анализатора DSA 1000 и персонального компьютера с программным пакетом Genie 2000 для набора и обработки гамма-спектров. Гамма-спектрометр по энергии калибровали с помощью стандартного набора источников ОСГИ. Измерения выполняли в стандартной геометрии, в которой градуировали детектор по эффективности. Время измерения наведенной γ -активности мишеней составляет 30-60 мин.

Калибровка гамма спектрометра по энергии проводилась с помощью стандартного набора гамма источников ОСГИ. Измерения выполняли в стандартной геометрии, в которой проводилась градуировка детектора по эффективности. Под эффективностью здесь понимаем отношение числа зарегистрированных импульсов в фотопиках к общему числу квантов, испущенных в телесный угол 4π.

Заселение изомерного и основного уровней идентифицировали по γ -линиям. Спектроскопические характеристики ядер-продуктов реакции $(n,2n)$, необходимые для обработки результатов измерений, взяты из работ [5,6] и приведены в табл.1, где Q – энергия реакции, I^π – спин и четность уровня, $T_{1/2}$ – период полураспада ядра, E_γ – энергия γ – квантов, I_γ – интенсивность γ – квантов данной энергии на распад, p – коэффициент ветвления γ -перехода.

Таблица 1. Спектроскопические характеристики исследуемых ядер

Ядерная реакция	Q , МэВ	I^π	$T_{1/2}$	E_γ , кэВ	I_γ , %	p
$^{110}\text{Pd}(\gamma,n)^{109\text{m}}\text{Pd}$	- 8,806	11/2 ⁻	4,69 мин	188,9	58	1
$^{110}\text{Pd}(\gamma,n)^{109\text{g}}\text{Pd}$	- 8,806	5/2 ⁺	13,47 ч	88,10	5	-
$^{108}\text{Pd}(\gamma,n)^{107\text{m}}\text{Pd}$	- 9,551	11/2 ⁻	21,3 с	210	88	1

Для получения абсолютных значений сечений основного и изомерного состояний использовались методы сравнения выходов исследуемой и мониторинг реакции. В качестве мониторинг реакции использовались $^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$ ($T_{1/2}=15$ ч, $E_\gamma=1368$ кэВ), сечение которого равно: $\sigma_m=114\pm 6$ мбн при $E_n=14,6\pm 0,3$ МэВ [7].

Полученные экспериментальные результаты об изомерных отношениях выходов и сечений реакций $(n,2n)$ на ядрах $^{108,110}\text{Pd}$ приведены в табл. 2.

Таблица 2. Сечение реакции $(n,2n)$ на $^{108,110}\text{Pd}$

Ядерная реакция	E_n , МэВ	σ_m , мб	σ_s , мб	Источник
$^{108}\text{Pd}(n,2n)^{107\text{m}}\text{Pd}$	14,0*	474	-	Настоящая работа
	14,5*	481	-	Настоящая работа
	14,1	478 $\pm$ 22	-	Настоящая работа
	14,7	511 $\pm$ 15	-	[8]
	14,0*	490	1067	Настоящая работа
$^{110}\text{Pd}(n,2n)^{109\text{m,g}}\text{Pd}$	14,5*	510	1068	Настоящая работа
	14,1	561 $\pm$ 40	1371 $\pm$ 56	Настоящая работа
	14,2	-	1650 $\pm$ 105	[9]
	14,6	-	2510 $\pm$ 110	[11]
	14,8	551 $\pm$ 12	-	[12]
	14,6	510 $\pm$ 35	-	[10]
	14,0*	490	1067	Настоящая работа

Примечание. *Расчет сечений проводился по программе TALYS-1.6.

Как видно из табл. 2 значения сечения возбуждения изомерного состояния для реакции $^{108}\text{Pd}(n,2n)^{107\text{m}}\text{Pd}$ при энергии нейтронов 14,1 МэВ в области экспериментальных ошибок согласуются с данными теоретического расчета, полученных с помощью программного пакета TALYS-1.6. Только значения, полученные в работе [8] отличаются от данных других работ. Значения сечения возбуждения изомерного состояния для реакции $^{108}\text{Pd}(n,2n)^{107\text{m}}\text{Pd}$ в области экспериментальных ошибок согласуются между собой.

Функция возбуждения реакции $^{110}\text{Pd}(n,2n)^{109\text{g}}\text{Pd}$ и $^{110}\text{Pd}(n,2n)^{109\text{m}}\text{Pd}$ приведена на рис. 1 и 2 соответственно. Энергетическая зависимость сечения реакции $^{108}\text{Pd}(n,2n)^{107\text{m}}\text{Pd}$ и $^{110}\text{Pd}(n,2n)^{109\text{m}}\text{Pd}$, получена с помощью программного пакета TALYS-1.6.

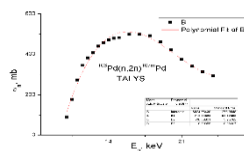
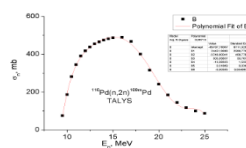


Рис.1. Сечение реакции $^{108}\text{Pd}(n,2n)^{107\text{m}}\text{Pd}$.



с. 5.6. Сечение реакции $^{110}\text{Pd}(n,2n)^{109\text{m}}\text{Pd}$

Полученная энергетическая зависимость изомерного отношения выходов реакций $^{108}\text{Pd}(\gamma,n)^{107\text{m}}\text{Pd}$ и $^{110}\text{Pd}(n,2n)^{109\text{m,g}}\text{Pd}$ может быть использована при изучении механизма фотоядерных реакций и разработки методик гамма- и нейтронного-активационного анализа.

ЛИТЕРАТУРА

1. Palvanov S.R. Excitation of Isomeric States in the (γ, n) , $(n, 2n)$, and $(\gamma, 2n)$ Reactions on the ^{113}In Nucleus // Physics of Atomic Nuclei. – Moscow (Russia), 2014. – Vol. 77, No. 1. – pp. 35-38.
2. Palvanov S., Akhmadzhanov T. Isomeric ratios $^{109\text{m,g}}\text{Pd}$ in the reactions (γ, n) and $(n, 2n)$ // Ukrainian Journal of Physics. – Kyiv (Ukraine), 2021. – Vol. 66, No. 6. – p. 461-465.
3. Nguyen Thi Hien, Guinyun Kim, Kwangsoo Kim et all. J Radioanal Nucl Chem (2017) 311:1559–1564.
4. <http://inp.uz>
5. Lederer C., Shirley V. Table of Isotopes. New York: Wiley & Sons. Inc. 2001.
6. Randa Z., Kreisinger F. // Journal of Radioanalytical Chemistry. 1983. v.77. N2. P. 279.
7. Holub E., Cindro N. // Jour. of Physics, Part G (Nucl.and Part.Phys.). 1976. V.2. P.405.
8. B.Minetti, A.Pasquarelli. Isomeric cross section ratio for $(n,2n)$ reactions. Nuclear Physics, Section A, Vol. 118, P. 449-455, 1968.

-
9. Kong X. et al. Cross sections for 13.5–14.7MeV neutron induced reactions on palladium isotopes // Appl. Radiat. Isot. - 1999. - Vol. 50, № 2. - pp. 361–364.
 10. Бычков В.М., Манохин В.Н., Пащенко А.Б., Пляскина В.И. Сечения пороговых реакций, вызываемых нейтронами. - М.: Энергоиздат, 1982. -216 с.
 11. Zhou Muyao, Zhang Yongfa, Wang Chuanshan, Zhang Lu, Chen Yitai, Zhou Shuxin, Zhang Shenjin, Xie Kuanzhong, Zhou Shenmuo, Chen Xueshi, Zhang Yiping, Yan Qinguan//Chinese J.of Nuclear Physics (Beijing). – 1987. - Vol. 9. - pp. 34-38.
 12. Gonçalves I.F. et al. (n,p), (n, α) and (n,2n) reaction cross-sections for some isotopes of Zr, Pd, and Cd at 14.8 MeV // Int. J. Radiat. Appl. Instrumentation. Part A. Appl. Radiat. Isot. - 1987. - Vol. 38, № 11.- pp. 989–991



Dilafroz XUDOYBERDIYEVA,
O'zbekiston Milliy universiteti tayanch doktoranti
E-mail: xudoyberdiyevadilafroz915@gmail.com
Shavkat OTAJONOV,
O'zbekiston Milliy universiteti professori, f.m.-f.d
Bahodir ESHCHANOV,
Chirchiq davlat pedagogika universiteti professori, f.m.-f.d

Toshkent davlat texnika universiteti professori, f.-m. f.d D.B. Yusupov taqrizi asosida

IN RESEARCHING THE STRUCTURE OF CONDENSED MEDIA, THE MANIFESTATION OF ROTATION-SHAKING MOTIONS RELATED TO THE LAWS OF INTERMOLECULAR INTERACTION IN THE VIBRATIONAL SPECTRA OF MOLECULES.

Abstract

In this article, the relaxation processes resulting from vibrational and rotational motions for the bromobenzene molecule in a wide spectral range ($0\div 3500\text{ cm}^{-1}$) were investigated using light Raman scattering (RS) spectra. On the basis of experimental and quantum-chemical calculations, it was determined that the hydrogen-bonded carbon atoms in bromobenzene play a key role in the manifestation of H-bonds. In the range of lower frequencies, high-intensity RS spectra were observed, and the mechanisms of their formation were explained in connection with the rotational-shaking motions of the bromobenzene molecule, which has a complex structure. This makes it possible to analyze the rotational oscillations and draw appropriate conclusions in the formation of the RS spectrum in the future in the lower frequency range.

Key words: spectrum, Raman scattering, bromobenzene, intermolecular interaction, rotational-shaking motion.

ПРОЯВЛЕНИЕ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ - КАЧАНИЙ, СВЯЗАННЫХ С ЗАКОНАМИ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРАХ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ СТРУКТУРЫ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД.

Аннотация.

В данной работе исследованы релаксационные процессы, возникающие при колебательных и вращательных движениях молекулы бромбензола в широком спектральном диапазоне ($0\div 3500\text{ см}^{-1}$), с использованием спектров комбинационного рассеяния света (КРС). На основе экспериментальных и квантово-химических расчетов, установлено, что водородно-связанные атомы углерода в бромбензоле играют основную роль в проявлении Н-связей. Обнаружены спектры КРС с высокой интенсивностью в нижнем диапазоне частот и объяснены механизмы их образования в связи с вращательно-качаниями движениями молекулы бромбензола сложного строения. Это дает возможность проанализировать вращательно-качаное движения при формировании спектра КРС в нижнем диапазоне частот и в дальнейшем сделать соответствующие выводы.

Ключевые слова: спектр, комбинационного рассеяния, бромбензол, межмолекулярное взаимодействие, вращательных-качаний движения.

KONDENSIRLANGAN MUHITLARNING TUZILISHINI TADQIQ QILISHDA MOLEKULALARNING TEBRANMA SPEKTRLARIDAGI MOLEKULALARARO TA'SIRLASHUV QONUNIYATLARIGA TEGISHLI AYLANMA – CHAYQALMA HARAKATLARINING NAMOYON BO'LISHI

Annotatsiya

Ushbu maqolada brombenzol molekulasi uchun keng spektral sohada ($0\div 3500\text{ sm}^{-1}$) tebranma va aylanma harakatlardan hosil bo'lgan relaksatsion jarayonlar yorug'likning kombinatsion sochilish (YOKS) spektrlari yordamida tadqiq qilindi. Eksperimental va kvant - kimyoviy hisoblashlar asosida brombenzol tarkibidagi vodorod bilan bog'langan uglerod atomlari H-bog'lanishlarini namoyon bo'lishida asosiy o'rin egallashi aniqlandi. Quyi chastotalar oralig'ida intensivligi katta bo'lgan YOKS spektrlari kuzatilib, ularning hosil bo'lish mexanizmlari murakkab strukturaga (tuzilishga) ega bo'lgan brombenzol molekulasi aylanma-chayqalma harakatlari bilan bog'langan holda tushuntirildi. Bu esa kelajakda quyi chastotalar oralig'idagi YOKS spektrining hosil bo'lishida aylanma-chayqalma tebranishlarni tahlil qilish va tegishli xulosalar chiqarish imkoniyatini beradi.

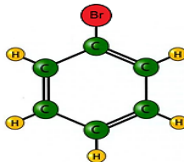
Kalit so'zlar: spektr, kombinatsion sochilish, brombenzol, molekulalararo ta'sirlashuv, aylanma-chayqalma harakat.

Kirish. Ma'lumki, elektromagnit to'lqin nurlanishi ta'sirida kondensirlangan muhitlarda sodir bo'ladigan relaksatsion jarayonlar bilan bog'liq bo'lgan fizik qonuniyatlarni tadqiq qilish bugungi kunda fundamental va amaliy ahamiyatga ega bo'lgan muammolardan hisoblanib, tadqiqot natijalari asosida muhit strukturasi tegishli ilmiy asoslangan ma'lumotlar olib, amaliyot uchun tavsiyalar berish imkonini beradi. YOKS (Raman effekti) esa hozirda kondensirlangan muhit molekulalarining energetik sathlardagi relaksatsion jarayoni qonuniyatlarini o'rganishning eng samarali usullardan biri bo'lib qolmoqda [1-11].

Monogaloid birikmalari kiritilgan benzollarning turli xil fizik xususiyatlarining qonuniyatlari to'g'risida juda ko'p eksperimental ma'lumotlar bo'lishiga qaramay, hozirgi vaqtda ushbu suyuqliklarda molekulyar darajada sodir bo'ladigan jarayonlar to'g'risida yagona fikr mavjud emas. Bu holat ushbu obyektlarni kengroq tadqiq qilish kerakligini anglatadi. Ushbu tadqiqot ishi ham bu yo'nalishdagi ishlarning mantiqiy davomi bo'lib hisoblanadi.

Bu ishda tadqiqot obyekti sifatida qutblanuvchanlik tenzori bo'yicha asimmetrik hossasiga ega bo'lgan brombenzol - C_6H_5Br moddasi tanlangan. Ushbu maqola brombenzol - C_6H_5Br molekulasini uchun keng spektral sohada ($0\div 3500\text{ sm}^{-1}$) tebranma va aylanma harakatlaridan hosil bo'ladigan relaksatsion jarayonlarni YOKS spektri yordamida tadqiq qilish natijalariga bag'ishlangan.

Brombenzol molekulasini tanlanishining sabablaridan biri, bu O'zMU Fotonika kafedrasida laboratoriyasida monogaloid kiritilgan benzollarning jumladan, brombenzolning molekulararo ta'sirlashuv qonuniylari yorug'likning molekulyar sochilish (YOMS) spektri yordamida o'rganilgan bo'lib, har ikkala sochilish turlari bo'yicha spektrlarning namoyon bo'lish sabablarini o'rganish imkoniyatini beradi.



1-rasm. Brombenzol molekulasining fazoviy struktura formulasi

Brombenzol molekulasining fazoviy struktura formulasi 1-rasmda ifodalangan. Rasmdan ko'rinadiki, brombenzol molekulasini atomlari (uglerod, vodorod) benzol halqasida joylashgan bo'lib, molekulaning yuqori qirrasida galoid birikmali brom atomi joylashgan. Ushbu tadqiqot ishining maqsadlaridan yana biri brom atomining YOKS spektriga ta'sirini o'rganishdan iborat.

Ekspirimental qism. Ma'lumki, spektroskopik tadqiqotlarda sochuvchi muhitga alohida talablar qo'yilgan bo'lib o'rganiladigan muhitlar begona zarrachalardan mutlaqo holi bo'lishini ta'minlash katta ahamiyatga ega.

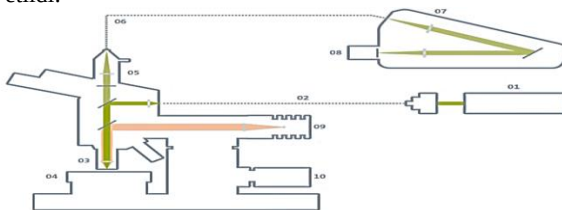
Shu sababdan ushbu tadqiqot obyekti hisoblangan brombenzol moddasi mavjud usullar yordamida [12-16] qo'shimcha tozalandi. Brombenzolning tozalik darajasi refraktometrik usul bilan aniqlangan sindirish ko'rsatkichining qiymati hamda, qaynash temperaturasi orqali tekshirildi.

YOKS spektrlari lazerli skanerlovchi konfokal mikroskopi yordamida olingan (2-rasm). Konfokal mikroskopli STR250 lazerli Raman spektrometri juda ixcham va moslashuvchan tizim bo'lib, hatto o'ta kichik intensivlikka ega bo'lgan YOKS ni qayd qilish imkoniyatini beruvchi, sezgirligi yuqori bo'lgan qurilma hisoblanadi. Tizim fokus uzunligi 250 mm bo'lgan spektrometrdan ($0,7$), $50\text{-}7000\text{ sm}^{-1}$ spektral sohada Cherni-Tyorner skanerlash mexanizmidan iborat bo'lib, u antistatik ta'sirga ega, avtomatik ravishda uch xil diffraksiyon panjarasi bilan almashtiriladi (1 mm da shtrixlar soni 600 ; 1200 ; 1800) va CCD (08) kamerasi -60 S haroratgacha sovutiladi.

To'plamga o'lchamlari $<1\text{ mm}$ dan kichik bo'lgan namunani o'lchaydigan optik mikroskop (1) va ko'rinadigan soha (532 nm) uchun faollashtiruvchi lazer (01) kiradi. Tizim Windows platformasi asosida ma'lumotlarni boshqarish va qayta ishlash uchun qulay dasturiy ta'minotni o'z ichiga oladi. YOKS spektrlari 1800 burchak ostida o'lchandi, ya'ni sochilgan nur tushayotgan nurga nisbatan 1800 burchak ostida qayd etildi.

Tajriba quyidagicha bajarildi: brombenzolni o'rganish uchun kvarts kyuvetasi ishlatilgan. Suyuqlik solingan kvarts kyuvetasi mikroskop stoliga joylashtirilgan va unga lazer nurlari yo'naltirilgan. Sochilgan yorug'lik obyekti yordamida to'plangan.

Qurilma $50\text{-}700\text{ sm}^{-1}$ spektral sohada skanerlash mexanizmiga ega spektrometrdan iborat bo'lib, avtomatik ravishda 1 mm da 600 , 1200 , 1800 ta shtrixlari bo'lgan turli xil diffraksiyon panjalarini almashtiradi. YOKS spektrlari tushayotgan nurga nisbatan 1800 burchak ostida qayd etildi.



2-rasm. YOKS spektrini qayd qiluvchi eksperimental qurilma. (01)-molekulani faollashtiruvchi lazer (532 nm); 02 , 06 - o'tkazuvchanlik koeffitsiyenti 90% gacha bo'lgan optik tola; 03 - obyektiv; 04 - mikroskop stoli; 05 - filtri; 07 - spektrometr STR250; 08 - pyezoelektrik detektor; 09 - oq yoritgich; 10 - fokuslash vinti.

Ekspiriment yordamida olingan YOKS spektrining konturi shakli va kengligi bo'yicha haqiqiy konturdan sezilarli darajada farq qilishi mumkin. YOKS spektrining haqiqiy kengligi kuzatilgan konturning kengligi bo'yicha aniqlashning mavjud usullarining eng katta samaradorligi va natijaviyligi [18] da taklif qilingan formula (1) bilan berilgan.

$$\sigma_{\text{хақ}} = \sigma_{\text{эксп}} \left[1 - \left(\frac{\Delta_{\text{анп}}}{\sigma_{\text{эксп}}} \right)^2 \right] \quad (1)$$

Bu yerda $\sigma_{\text{хақ}}$ - YOKS konturining haqiqiy kengligi, $\Delta_{\text{анп}}$ - apparat funksiyasining kengligi, $\sigma_{\text{эксп}}$ - eksperimental ravishda olingan spektr kengligi hisoblanadi. Ushbu usul bilan olingan spektr kengligi qiymatlari boshqa usullar bilan yaxshi mos keladi.

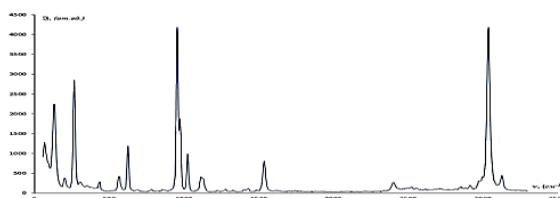
Natijalar va muhokama. Brombenzol molekulasining $0\div 3500\text{ sm}^{-1}$ spektral sohada tebranma va aylanma harakatlaridan hosil bo'lgan YOKS spektrlari 3-rasmda ko'rsatilgan.

3-rasmdagi YOKS spektrining taqsimoti tahlili shuni ko'rsatadiki quyi chastotalar sohasida turli hil intensivlikka ega bo'lgan bir qator spektrlar mavjud bo'lib, ular ichida yuqori intensivlikdan tashkil topgan spektr 266 sm^{-1} chastotaga to'g'ri kelishi aniqlandi. Tajribada olingan ushbu spektrning qiymati kvant - kimyoviy usul bilan hisoblangan qiymatga yaqin ekanligi isbotlandi (1-jadval). Bundan tashqari, $135\text{ - }625\text{ sm}^{-1}$ chastotalar oralig'ida ham, intensivligi nisbatan katta bo'lgan 2 ta YOKS spektri kuzatildi, ularning qiymati 133 sm^{-1} va 624 sm^{-1} ga teng. Shuni alohida qayd qilish lozimki, eksperiment yordamida kuzatilgan brombenzol molekulasining harakati hisobiga namoyon bo'ladigan YOKS spektrlarining soni ayrim adabiyotlarda

keltirilgan spektrlar sonidan ko'pligi qayd etildi. Buning asosiy sabablaridan biri biz eksperimentda foydalangan Raman spektrometrining sezgirligi yuqoriligidir.

Suyuq muhitlarda quyi chastotalar sohasidagi YOKS spektrlarini o'rganish natijalari shuni ko'rsatdiki, bu sohada eksperimental ishlar chegaralanganligi aniqlandi. Jumladan, ayrim galoid birikmalaridan tashkil topgan muhitlarda molekulaning aylanma – chayqalma harakatlari natijasida qo'shimcha spektrlarning hosil bo'lishi to'g'risida ayrim mulohazalar mavjud bo'lib, nazariy jihatdan hisoblangan natijalar bilan solishtirilgan emas. Shuning uchun ham, lazer nurlanishi ta'sirida ($\lambda = 532 \text{ nm}$) quyi chastotalarda sodir bo'ladigan YOKS spektrining tarkibidagi molekulaning aylanma-chayqalma harakati bilan bog'liq bo'lgan spektrlarning namoyon bo'lishiga alohida e'tibor qaratildi.

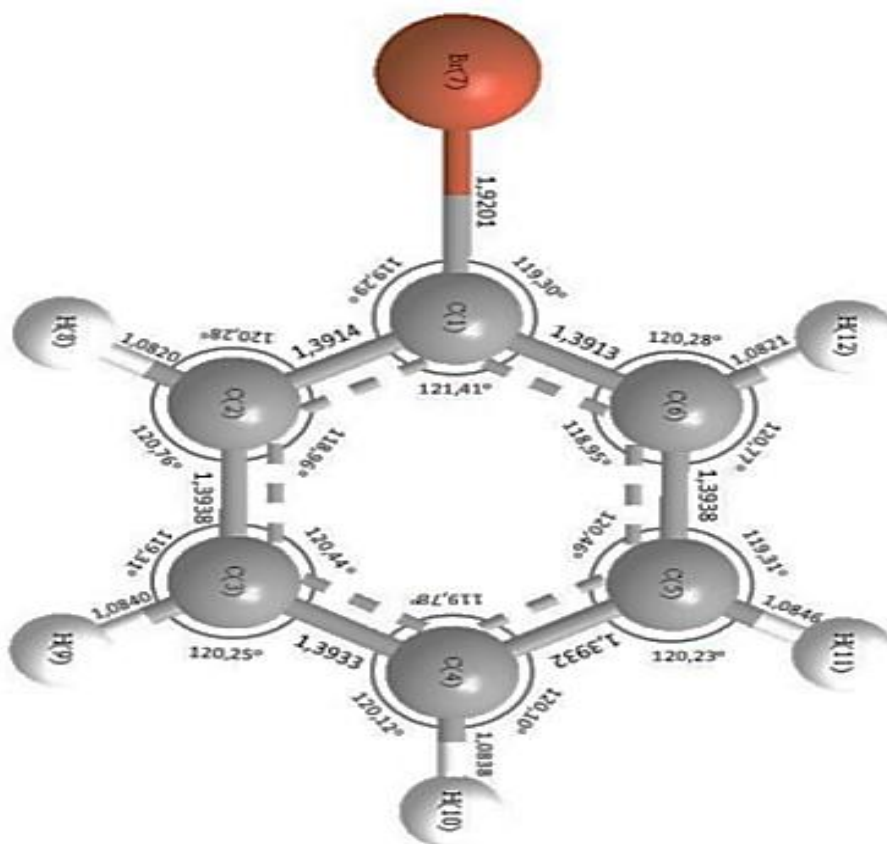
Eksperiment yordamida olingan YOKS spektrini tahlil qilishda xususan, ba'zi spektrlarni molekulaning aylanma – chayqalma harakatlariga bog'lashni, nazariy tahlilsiz to'g'ri deb bo'lmaydi, chunki quyi chastotalar oralig'ining o'zida ham turli intensivliklarga ega bo'lgan spektrlar mavjud. Bu shuni anglatadiki, qo'shimcha hosil bo'lgan spektrning namoyon bo'lish mexanizmiga nafaqat molekulaning aylanma – chayqalma tebranishi balki, deformatsion tebranishlari ham sabab bo'ladi.



3-rasm. Brombenzolning xona temperaturasida $0\div 3500 \text{ cm}^{-1}$ chastota sohasidagi YOKS spektri.

Quyi chastota sohasida joylashgan spektrlar og'irroq atom guruhlarini o'z ichiga olgan molekulalarning, bizning holatimizda brombenzol molekulasida bromning aylanma – chayqalma harakatlariga tegishli bo'lishi mumkin. Agar aylanma – chayqalma tebranishlar potensial chuqurligining balandligi ma'lum bo'lsa, aylanma – chayqalma tebranishga mos keladigan chastotani ($\nu \sim \sqrt{U}$) nazariy hisoblash orqali aniqlash mumkin.

Potensial chuqurlikni hisoblash [11,17] metodikasi yordamida amalga oshirildi. Potensial chuqurliklarning balandligini aniqlash uchun esa molekula tarkibidagi atomlarning bog'lanish uzunligi va ular orasidagi burchaklar va boshqa kattaliklar ma'lum bo'lishi lozim. Ushbu kattaliklarni aniqlash bo'yicha HF/6-31G Xartri Fok metodi asosida ishlaydigan ORCA maxsus dasturi yordamida kvant - kimyoviy hisoblash natijalari 4-rasmga ko'rsatilgan. Kvant - kimyoviy hisoblash natijalariga ko'ra masalan uglerod(2) va vodorod(8) atomlari orasidagi bog'lanish uzunligi $1,0820 \text{ \AA}$ ga, uglerod(1) va brom atomlari orasidagi bog'lanish uzunligi esa $1,9201 \text{ \AA}$ ga teng. Uglerod(2), uglerod(1) va uglerod(6) atomlari bog'lanishi orasidagi burchak $121,410$ ga teng.



4-rasm. Brombenzolning kvant - kimyoviy hisoblash usuli bilan aniqlangan strukturasi.

Potensial chuqurlikni hisoblash natijalari, brombenzol molekulasi aylanma – chayqalma harakatlariga tegishli intensivligi yuqori bo'lgan YOKS spektri uchun chastotalarning nazariy hisoblangan va eksperiment yordamida olingan qiymatlari 1-jadval.

1-jadval.

Muhit	U, kal/mol (nazariy)	ν , sm^{-1}	
		nazariy	eksperiment
$\text{C}_6\text{H}_5\text{Br}$	5500	240	266

Jadvalni tahlil qilish shuni ko'rsatadiki, amalga oshirilgan hisoblashlarga ko'ra, potensial chuqurlikni aniqligi 26 sm^{-1} dan oshmaydi.

Brombenzol molekulasi uchun quyi chastotalar oralig'idagi YOKS spektrlariga tegishli olingan natijalardan ko'rinib turibdiki, spektr tarkibida atom guruhlarining aylanma – chayqalma harakatlarining namoyon bo'lishiga to'la asosimiz bor. Atom guruhlarining aylanma – chayqalma harakatlaridan hosil bo'ladigan YOKS spektrlarini quyi chastotalar oralig'iga to'g'ri kelishi va ularning intensivliklarining nisbatan kichik qiymatga ega bo'lishi boshqa muhitlarda o'tkazilgan oldingi ilmiy tadqiqot ishlarimizda ham o'z aksini topgan.

Xulosa. Spektroskopik tadqiqotlar asosida jumladan, YOKS spektrlari $0\text{--}3500 \text{ sm}^{-1}$ chastotalar oralig'ida qayd qilingan bo'lib, quyi chastotalar oralig'ida hosil bo'lgan YOKS spektri brombenzol molekulasi tarkibidagi atomlar guruhining aylanma – chayqalma harakatlari bilan bog'liqligi aniqlandi. Eksperimentda olingan va nazariy hisoblash natijalariga solishtirilgan ma'lumotlarga asoslanib, molekulaning aylanma – chayqalma harakatidan tashqari YOKS spektrining hosil bo'lishiga deformatsion tebranishlar ham o'z ta'sirini ko'rsatishi aniqlandi. Bu esa spektrlarning qaysi ko'rinishidagi tebranishlar bilan bog'liqligini aniqlash imkoniyatini yaratadi. Eng muhimi bizning tadqiqotlar shuni ko'rsatadiki, molekularning aylanma – chayqalma harakatidan hosil bo'ladigan spektrlar $\sim 150 \text{ sm}^{-1}$ chastotalar oralig'ida namoyon bo'lib, ularni eksperiment yo'li bilan qayd qilish o'ta yuqori sezgirlikka ega bo'lgan eksperimental qurilmalarda tadqiqot olib borishni taqozo etadi.

ADABIYOTLAR

- Kirillov S.A., Morresi A., Paoltoni M. Recovery of the depolarization ratio of single lines from overlapping isotropic and anisotropic Raman profiles and assignment of molecular vibrations, with special reference to toluene and toluene-d8 //J. Raman Spectrosc. 2007. V.38. P.383-388
- Pogorelov V., Bulavin L., Doroshenko J., Fesjin O., Veretennikov O. The structure of liquid alcohols and the temperature dependence of vibrational bandwidth //J. Molec. Stuc. 2004. V. 708. V1-3. P.61-65
- Ka B.J., Geva E. Vibrational Energy Relaxation of Polyatomic Molecules in Liquid Solution via the Linearized Semiclassical Method //J. Phys. Chem. A 2006, V.110. P. 9555-9567.
- Wang D., Mittauer K., Reynolds N. Raman scattering of carbon disulfide: The temperature effect // Am. J. Phys., 2009. V. 77. N. 12. P. 1130-1134.
- Lindner J., Vohringer P., Pshenichnikov M.S., Cringus D., Wiersma D.A., Mostovoy M. Vibrational relaxation of pure liquid water // Chemical Physics Letters 2006. V. 421 P. 329–333.
- Bakker H.J., Lock A.J., Madsen D. Strong feedback effect in the vibrational relaxation of liquid water // Chemical Physics Letters. 2004. V. 384. P. 236–241.
- Eshchanov B., Otajonov Sh., Isamatov A. Study of Molecular Dynamics of Condensed States of a Substance by Spectroscopy //Ukraine Journal of Physics, 2014, vol.9, No.3, pp.254–256.
- Eshchanov B., Otajonov Sh., Isamatov A., Babajanov D. Dynamics of Relaxation Processes in Liquids: Analysis of Oscillation and Orientation Spectra //Journal of Molecular Liquids, 2015, vol.202, pp.148–152.
- Takasu Y., Matsumoto S., Fujii Y., Nishio I. Raman study of the low temperature behavior of tetrahydrofuran molecule in the cage of clathrate hydrate // Chemical Physics Letters. 2015. V. 627. P. 39–43.
- Vasylieva A., Doroshenko I., Vaskivskiy Y., Chernolevska Y., Pogorelov V. FTIR study of condensed water structure // J. Mol. Struct., 2018, V. 1167, P.232-238.
- Eshchanov, B., Otajonov, S., Xudoyberdiyeva, D. Dynamics of rotational oscillations in molecules xylene by the low frequencies spectrum of the raman scattering of light //Journal of Advanced Research in Dynamical and Control Systems, 2020, 12 (6 Special Issue), pp. 713–718
- Гордон А., Форд Р. Спутник химика. М. МИР. 1976. 443 стр.
- Варгафтик Н. Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. -М: Наука. -1972.-720 стр.
- Свердлов Л.М., Ковнер М.А., Крайнов Е.Н. Колебательные спектры многоатомных молекул. М: Наука. 1970.
- Вейсбергер А., Проскауэр Э., Риддик Дж., Тупс Э. Органические растворители. Физические свойства и методы очистки. М: Изд-во иностр. лит. 1958. 419 стр.
- Вульфсон Н.С. Препаративная органическая химия. М: Хим. лит-ра. 1959. 88 стр.
- Eshchanov B., Otajonov Sh., Mukhamedov G., Doroshenko I., Karpova O., Allakulieva Sh. Experimental study of raman spectra of some aromatic hydrocarbons //Ukraine Journal of Physics, 2020, vol.65, No.4, pp.284–290.
- Tanabe K., Hiraichi J. Truncation effects on second moments of vibrational bands //Spektroscop feta 1980, V.36, P. 341



Dilfuza HUSANOVA,

O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti kichik ilmiy xodimi

E-mail: dilfuzahusanova75@gmail.com

Jur'at OCHILOV,

O'zbekiston Milliy Universiteti magistranti

O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti muhandisi

E-mail: juratochilov@gmail.com

Odina XOLMATOVA,

O'zbekiston Milliy universiteti talabasi

E-mail: kholmatova2001@list.ru

Umedjon XALILOV,

f.-m.f.d, O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti bosh ilmiy xodimi

E-mail: umedjon.khalilov@uantwerpen.be

O'zR FA Bioorganik kimyo instituti professori, k.f.d J.M.Ashurov taqrizi asosida

SIMULATION OF PRENUCLEATION PROCESSES OF PERYLENE-BASED ORGANIC NANOCRYSTALS

Abstract

Although perylene-based organic nanocrystals are used in various fields, understanding their pre-nucleation processes (considered the first stages of the synthesis) by experimental outcomes is still elusive. Therefore, in this work, the nature of pre-nucleation processes of organic crystal synthesis based on selected planar perylene (PERLEN08 and WUFJEM) molecules was studied using reactive molecular dynamics (MD) simulations. The obtained results indicate that the additional methoxy group significantly affects the clustering rate of molecules and the structure of the formed clusters. In addition, the formation of clusters in both molecule cases explains by the Ostwald ripening, and the analysis based on the Gibbs free energy clarified that this phenomenon depends on the volume-dependent stability of clusters. In general, this study contributes to a better understanding of the synthesis onset of organic nanocrystals based on planar perylene molecules for modern nanotechnology.

Keywords: organic nanocrystals, pre-nucleation mechanism, molecular dynamics, clustering, flat perylene molecules.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПРЕНУКЛЕАЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ НАНОКРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ПЕРИЛЕНА

Аннотация

Хотя органические нанокристаллы на основе перилена используются в различных областях, понимание их процессов преднуклеации (считающихся первыми стадиями синтеза) по экспериментальным результатам все еще неуловимо. Поэтому в данной работе природа процессов преднуклеации синтеза органических кристаллов на основе выбранных планарных молекул перилена (PERLEN08 и WUFJEM) была изучена с использованием моделирования реактивной молекулярной динамики (МД). Полученные результаты свидетельствуют о существенном влиянии дополнительной метоксигруппы на скорость кластеризации молекул и структуру образующихся кластеров. Кроме того, образование кластеров в обоих случаях молекул объясняется созреванием Оствальда (переконденсация), а анализ, основанный на свободной энергии Гиббса, показал, что это явление зависит от стабильности кластеров, зависящей от объема. В целом данное исследование способствует лучшему пониманию начала синтеза органических нанокристаллов на основе плоских молекул перилена для современных нанотехнологий.

Ключевые слова: органические нанокристаллы, преднуклеация, молекулярная динамика, кластеризация, перилен.

PERILEN ASOSLI ORGANIK NANOKRISTALLARNING NUKLEATSIYAOLDI JARAYONLARINI MODELLASHTIRISH

Annotatsiya

Perilen asosli organik nanokristallar turli sohalarida qo'llanilayotgan bo'lsada, ular sintezining ilk bosqichlari hisoblangan nukleatsiyaoldi jarayonlarining eksperimental natijalar orqali tushunilishi hali ham murakkabligicha qolmoqda. Shuning uchun, ushbu ishda, reaktiv molekulyar dinamika (MD) modellashirish usulini qo'llagan holda, tanlangan yassi perilen (PERLEN08 va WUFJEM) molekulari asosidagi organik kristal sintezining nukleatsiyaoldi jarayonlari tabiati o'rganildi. Olingan natijalar shunga dalolat qiladiki, qo'shimcha metoxy guruhi molekularlarning klasterlanish tezligiga hamda hosil bo'lgan klasterlar strukturasiga sezilarli ta'sir ko'rsatadi. Undan tashqari, ikkala holatda ham klasterlarning paydo bo'lishi Ostvald suyultirish qonuniga asoslanib, Gibbs erkin energiyasi bo'yicha tahlil bu hodisa klasterlarning hajmiy barqarorligiga bog'liq ekanligini ko'rsatdi. Umuman olganda, ushbu tadqiqot zamonaviy nanotexnologiyada qo'llaniluvchi yassi perilen molekulariga asoslangan organik nanokristallar sintezining boshqaruvi uchun uning dastlabki bosqichlarini yaxshiroq tushinishga yordam beradi.

Kalit so'zlar: organik nanokristallar, nukleatsiyaoldi mexanizmi, molekulyar dinamika, klasterlanish, yassi perilen molekulari.

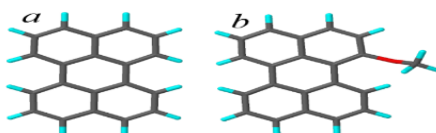
Kirish.Organik nanokristallar (ONK) farmatsevtika [1], biologik tizimlar [2], topokimyoviy polimerlashda [3] va boshqa istiqbolli sohalarida jadal sur'atlar bilan qo'llanilmoqda. ONKlarning bu kabi keng qo'llanilishi ularning sintezi bilan izchil shug'ullanishga sabab bo'lib, ularni olishda qayta cho'ktirish usuli [4], superkritik suyuqlik kristallanish usuli [5], qayta tiklash usuli

[6] va boshqa usullardan keng qo'llanila boshlandi [7]. Bu usullar ichida qayta tiklash (reprepitatsiya) usuli ma'lum o'lcham va morfologiyaga ega bo'lgan ONKlar sintezi uchun qulay hisoblanadi. Chunki, bu usul yordamida olingan ONKlarning o'lchami va morfologiyasi sintez parametrlarini, jumladan, haroratni, molekullarning aralashtirish tezligini va boshqa parametrlarni tanlash orqali boshqarilishi mumkin [5]. Xususan, qayta tiklash usulida dastlab organik molekullar erituvchi muhitida yadrolanadi va keyinchalik ular kristal sifatida shakllanib o'sadi.

So'nggi tadqiqotlar shunga dalolat qiladiki, organik molekullarning yadrolanishi va natijada kristal sifatida o'sish mexanizmlarini chuqurroq tushunish ONKlarni muvaffaqiyatli tanlab sintez qilish uchun juda muhim [6]. Umuman olganda, nanokristallar o'sishining ilk bosqich mexanizmlarini tushuntirish uchun ikkita asosiy nazariya klassik [8] va klassik bo'lmagan (noklassik) [9] yadrolanish nazariyalari qo'llaniladi. Klassik nazariyaga ko'ra, kristall yadrolari asl kristal bilan bir xil tuzilishga ega bo'ladi, deb hisoblansa, noklassik nazariya esa kristall yadrolanish jarayonini ikki bosqichli mexanizmlardan iborat, deb tushuntiradi. Xususan, bu nazariyaga ko'ra, dastlab suyuqlikka o'xshash boshlang'ich klasterlar paydo bo'ladi, so'ngra bu klasterlar tarkibida kristall tartibli yadro paydo bo'ladi. Ikkala nazariya ham u yoki bu eksperimental natijalarni muvaffaqiyatli tushuntirib bergan bo'lsada, kristalning yadrolanish jarayonini tushuntirishda hamon ikki xil qarash qolmoqda [10]. Bu muammoni ijobiy hal qilish esa nukleatsiyaoldi jarayonlarini ham yaxshiroq tushunishni taqozo etmoqda [10].

Shuning uchun, ushbu tadqiqot ishida, biz mavjud eksperimental dalillar va nazariy gepotezalarni e'tiborga olgan holda, ONKlarda aromatik uglevodorod nukleatsiyaoldi jarayonlarining mexanizmlarini kompyuter modellashtirishlari asosida tushunishni maqsad qildik. Xususan, reaktiv molekulyar dinamika (MD) modellashtirish usulini qo'llagan holda, biz tanlangan yassi perilen molekullari asosidagi kristal sintezining nukleatsiyaoldi jarayonlari tabiatini o'rgandik.

Modellashtirish usuli va tafsilotlari. Ushbu tadqiqotda ONK o'sishini o'rganish uchun ikki xil perilen molekullari tanlangan (1-rasm). Perilen ($C_{20}H_{12}$) (1a-rasm) polisiklik aromatik uglevodorod bo'lib, u ikkita naftalin ($C_{10}H_6$) molekulasining birikishidan hosil bo'ladi. Bundan tashqari, perilening methoxy group bilan birikkan holati 1-metoksiperilen molekulasini ($C_{21}H_{14}O$) ham mavjud (1b-rasm). Ushbu tadqiqot ishida, perilen va 1-metoksiperilen molekullarining mos ravishda Kembrij strukturaviy ma'lumotlar bazasi (Cambridge Structural Database) bo'yicha ma'lumotnoma kodlari (refcode) PERLEN08 [11] va WUFJEM [12] sifatida beriladi.

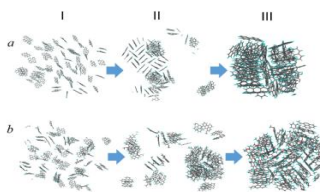


1-rasm. (a) PERLEN08 ($C_{20}H_{12}$) va (b) WUFJEM ($C_{21}H_{14}O$) molekullarining strukturaviy ko'rinishi. Bu yerda, C, H va O atomlari mos ravishda kulrang, zangori va qizil ranglarda ko'rsatilgan.

Ushbu molekullar asosidagi ONKlarning sintez jarayoni reaktiv molekulyar dinamika (MD) usuli yordamida kompyuterda modellashtirish orqali o'rganiladi [13]. Har bir atomlar o'rtasidagi o'zaro ta'sirlar, xususan, atomlararo bog'lanishlarning hosil bo'lish va uzilish reaksiyalari ReaxFF potentsialining Zhang va boshqalar tomonidan kiritilgan parametrlaridan orqali ifodalanadi [14,15]. Modellashtirishlar MD algoritimga asoslangan LAMMPS dasturiy paketi yordamida amalga oshiriladi [16].

Perilen molekullarining klasterlanish jarayonini modellashtirishda NVT ansamblidan foydalanilib, jarayon davomida barcha parametrlar (ya'ni, N, V va T kattaliklar) o'zgarmas saqlanishi ta'minlanadi. Modellashtiriluvchi fazoda ikkala perilen molekullarining soni 27, 64 va 125 ga teng holatlar qaralib, termodinamik tizimdagi atomlar soni (N) PERLEN08 va WUFJEM molekullari uchun mos ravishda 864, 2048, 4000 va 972, 2304, 4500 dan iborat bo'ladi. Molekullalar fazoning butun hajmi bo'yicha bir xil zichlikda joylashtirilib, fazo chegaralari uchun davriy chegara shartlari qo'llaniladi. Termodinamik tizimning haroratini 300 K da ushlab turishni har 100 fs da nazorat qilib turish uchun Nose-Hoover termostatidan foydalaniladi [17]. Modellashtirishda tanlangan vaqt qadami 0,5 fs bo'lib, butun jarayonlar 2.5 ns gacha kuzatiladi. Termodinamik tizimdagi atomlarning koordinatalari (trayektoriya) haqidagi ma'lumotlar har 1 ps da saqlanib boriladi. Modellashtirishlar har bir holat uchun 5 marta takrorlanib, hisoblangan kattaliklar ushbu 5 holat bo'yicha o'rtalashtiriladi.

Natijalar va ularning muhokamasi. 2-rasmda PERLEN08 va WUFJEM klasterlarining hosil bo'lish evolyutsiyasi ko'rsatilgan. Klasterlanish jarayonida turli xil miqdordagi molekullarni o'z ichiga olgan klasterlar soni asta-sekin o'sib borib yaxlit klasterga aylanadi.



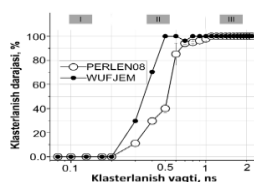
2-rasm. (a) PERLEN08 va (b) WUFJEM klasterlarining hosil bo'lish evolyutsiyasi.

Klasterlanish jarayonida, katta klasterlar Ostvald suyultirish qonuniga asosan tobora kattalashib borsa, kichik klasterlar esa yo'qolib ketguncha kichrayib boradi [18]. Bu hodisa klasterlarning hajmiy barqarorligiga bog'liq bo'lib, uni Gibbs erkin energiyasining o'zgarishi orqali tushuntirish mumkin. Gibbs erkin energiyasining o'zgarishi (ΔG) sirt erkin energiyasi va hajmiy erkin energiyasining yig'indisiga teng (ya'ni $\Delta G = 4\pi r^2 \gamma + \frac{4}{3}\pi r^3 \Delta G_V$ [20]) bo'lib, bu yerda r -klaster radiusi, γ -sirt energiyasi va ΔG_V -quyma erkin energiyasi. Klasterning sirt energiyasi doim musbat (ya'ni, beqaror), hajmiy erkin energiyasi esa manfiy (ya'ni, barqaror) bo'ladi. Shuning uchun, tizimdagi klaster kattalashgan sari undagi hajmiy energiyaning miqdori ortib boradi va klaster tobora barqarorlashadi. Aksincha, kam molekullali klasterlarda sirt erkin energiyasi hajmiy energiyasidan katta bo'lganligi tufayli ular tobora beqarorlashib, o'z hajmlarini kamaytirib boradi.

Klasterlanish jarayoni davomida, vakuumda joylashtirilgan yassi perilen, ya'ni PERLEN08 va WUFJEM molekullari o'zaro ta'sirlashish natijasida, asosan, ikki xil, ya'ni, yuzma-yuz (parallel) va yuzma-yon (T-simon) holatlarda bog'lanishlar hosil qilishlari kuzatiladi [19]. Xususan, 2-rasmda ko'rsatilganidek, yassi perilen molekullari o'zaro ta'sir natijasida avval dimer, so'ngra trimer, tetramer, kichik hajmdagi molekulyar birikmalar va nihoyat yaxlit klaster hosil qiladi. Natijalar shuni ko'rsatadiki, yassi perilen molekulasidagi C atomlari orasida π - π bog' hosil bo'lganligi sababli dimerlar yuzma-yuz (parallel) holatda joylashadi va keyingi monomerni biriktirib trimerni hosil qiladi [20]. Hisoblashlarni ko'rsatishicha, PERLEN08 tetramerining hosil bo'lish energiyasi trimerning hosil bo'lish energiyasiga, trimerning energiyasi esa dimerining hosil bo'lish energiyasiga nisbatan pastroq bo'lib, bu energiyalar mos ravishda yuzma-yuz joylashgan dimer, trimer va tetramerlar uchun -0.7005 eV, -0.7027 eV va -0.7137 eV ni tashkil etadi. WUFJEM holatida yuzma-yuz joylashgan dimer, trimer va tetramerlar uchun ularning hosil bo'lish energiyalari esa mos ravishda -0.8195 eV, -0.7429 eV va -0.8959 eV ni tashkil etadi. Energiyalarning bunday taqsimlanishi WUFJEM trimerni yana qaytib dimer va monomerga aylinishiga, keyin esa bu dimer qo'shni dimerga parallel ravishda birikib tetramerni hosil qilishiga olib keladi.

Yassi perilen molekullaridagi H va C atomlarining qisman zaryadlari mos ravishda PERLEN08 uchun 0.042e va -0.032e ga, WUFJEM uchun esa 0.0523e va -0.0108e oraliqda bo'ladi. Natijada, hosil bo'lgan elektrostatik hamda London dispersion o'zaro ta'sirlar qo'shni molekullar orasida kovalent bo'lmagan C---H aloqalarining ham shakllanishiga olib keladi [21]. Bu esa yassi perilen molekullarining yuzma-yuz holatdan tashqari yuzma-yon (T-simon) holatda ham to'planishiga sabab bo'ladi [19]. Molekullarning bu kabi yig'ilish tabiati ikkala perilen molekulasiga ham tegishli bo'lsada, WUFJEM molekulasida ularning yig'ilishiga qo'shni molekullarning H va O atomlari orasida hosil bo'luvchi vodorod bog'lanishlar (H---O) ham yordam berib, ularning yuzma-yuz to'planishini quvvatlaydi [22]. Xususan, PERLEN08 tetramerining yuzma-yuz (IIII) va yuzma-yon (IIII) holatda hosil bo'lish energiyalari mos ravishda -0.7137 eV va -0.7528 eV ekanligi klasterda yuzma-yon joylashgan molekullar sonini ko'payishiga olib keladi. Aksincha, WUFJEM holatida esa bu energiyalar mos ravishda -0.8959 eV va -0.8244 eV bo'lishi klasterda molekullarning ko'proq yuzma-yuz joylashishiga sabab bo'ladi. Umuman olganda, olingan natijalar shunga dalolat qiladiki, klasterlanish jarayonida, WUFJEM holatida T-simon to'planishlar PERLEN08 holatidagiga nisbatan kamroq hosil bo'ladi (2-rasm, II).

Molekullar orasidagi o'zaro bog'lanishlar tabiati ularning to'planish yoki klasterlanish tezligiga ham ta'sir ko'rsatadi. Xususan, 3-rasmda ikkala molekula holati uchun klasterlanish darajasining klaster shakllanish vaqtiga bog'liqligi keltirilgan.



3-rasm. Klasterlanish darajasining klasterlanish vaqtiga bog'liqligi.

Grafikdan ko'rinib turibdiki, klasterlanish holati, yuqorida aytilganidek, 3 bosqichga bo'linadi. Klasterlanishning ilk bosqichi 0.2 ns davom etib, bu vaqt intervalida molekullar bir-biri bilan bog'lanmaydi. Ilk molekulyar bog'lanishlar 0.2 ns dan boshlanadigan ikkinchi bosqichda sodir bo'ladi. Bu bosqichning 0.3, 0.4, 0.5 ns larida, jami yig'ilgan PERLEN08 molekullari maksimum hajmga ega bo'luvchi klasterning mos ravishda 11, 30, 40% ini tashkil qilsa, bu ko'rsatkichlar WUFJEM holatida esa mos holda 30, 70, 100% ga ko'tariladi. Umuman olganda, PERLEN08 klasterning to'la shakllanishi uchun 1.1 ns kerak bo'lsa, uchinchi bosqichda (ya'ni >1.1 ns), bu klasterlar to'la yig'ilgan holda o'zining barqaror holatini saqlaydi. WUFJEM klasterining to'la shakllanishiga esa 0.5 ns ketib, 0.8 ns dan boshlanuvchi III-bosqichda klaster o'zining barqaror holatini saqlaydi. Umumiy natijalar shuni ko'rsatayaptiki, WUFJEM molekullarining klasterlanish tezligi PERLEN08 molekullariga nisbatan 2-3 marta kattaroq bo'ladi va bu esa WUFJEM molekullari orasidagi vodorod bog'larining hosil bo'lishi orqali tushuntiriladi.

Xulosa. Ushbu ishda, PERLEN08 va WUFJEM molekullaridan iborat organik nanokristallarning nukleatsiyaoldi (klasterlanish) jarayonlari reaktiv Molekulyar Dinamika usuli asosida modellashirish orqali solishtirib tadqiq etiladi. Natijalar shuni ko'rsatadiki, ikkala holatda ham molekullarning klasterlanish jarayoni Ostvald suyultirish nazariyasi asosida ro'y berib, dastlab hosil bo'lgan har xil o'lchamdagi klasterlar bitta yaxlit klasterga aylanishi ko'rsatiladi. Klasterlanishning dastlabki qadamlarida, PERLEN08 molekullari yuzma-yuz va keyinchalik yuzma-yon (T-simon) joylashuvlari asosida birlashsa, WUFJEM molekullari esa vodorod bog'lari tufayli ko'proq yuzma-yuz (parallel) holatda birlashishi aniqlanadi. Undan tashqari, vodorod bog'lanish sababli WUFJEM molekullarining klasterlanish darajasi PERLEN08 molekullariga qaraganda yuqori bo'lishi ko'rsatildi. Olingan natijalar vakuumda PERLEN08 va WUFJEM molekullaridan tashkil topgan organik nanokristallar sintezining ilk qadamlari mexanizmlarini yaxshiroq tushunishga yordam beradi.

Tashakkurnoma. Ushbu tadqiqot ishi O'zbekiston Respublikasi Innovatsion rivojlanish vazirligi tomonidan moliyalashtirilgan F-FA-2021-512 fundamental loyiha doirasida amalga oshirildi. Modellashirish ishlari O'zR FA, Ion-plazma va lazer texnologiyalari institutida NanoSim guruhi tomonidan tashkil etilgan FISTUz superkompyuterlar klasteri yordamida bajarildi.

ADABIYOTLAR

1. R. Cox, L. A. Ferris, and V. R. Thalladi, Selective Growth of a Stable Drug Polymorph by Suppressing the Nucleation of Corresponding Metastable Polymorphs, *Angew. Chem.* 2007, 119, 4411.
2. R. J. Davey, S. L. M. Schroeder, and J. H. ter Horst, Nucleation of Organic Crystals-A Molecular Perspective, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2013, 52, 2166.
3. T. Ishizaka, H. Kasai, H. Oikawa, and H. Nakanishi, Unique Luminescence Properties of Eu³⁺-Doped Polyimide, *J. Photochem. Photobiol. Chem.* 2006, 183, 280.
4. H. Kasai, H. S. Nalwa, H. Oikawa, S. Okada, H. Matsuda, N. Minami, A. Kakuta, K. Ono, A. Mukoh, and H. Nakanishi, A Novel Preparation Method of Organic Microcrystals, *Jpn. J. Appl. Phys.* 1992, 31, L1132.

5. Y. Komai, H. Kasai, H. Hirakoso, Y. Hakuta, S. Okada, H. Oikawa, T. Adschiri, H. Inomata, K. Arai, and H. Nakanishi, Size and Form Control of Titanylphthalocyanine Microcrystals by Supercritical Fluid Crystallization Method, *Mol. Cryst. Liq. Cryst. Sci. Technol. Sect. Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 1998, 322, 167.
6. D. E. Milovzorov, Nonlinear Optoelectronic Devices Based On Nanocrystalline Silicon Films Acoustoelectrical Switches For Optical Modes, Nonlinear Optical Switches and Lasers (IntechOpen, S.l., 2011).
7. K. Baba, H. Kasai, S. Okada, H. Oikawa, and H. Nakanishi, Novel Fabrication Process of Organic Microcrystals Using Microwave-Irradiation, *Jpn. J. Appl. Phys.* 2000, 39, L1256.
8. I. Weissbuch, M. Lahav, and L. Leiserowitz, Toward Stereochemical Control, Monitoring, and Understanding of Crystal Nucleation, *Cryst. Growth Des.* 2003, 3, 125.
9. D. Gebauer and H. Cölfen, Prenucleation Clusters and Non-Classical Nucleation, *Nano Today* 2011, 6, 564.
10. D. Gebauer, M. Kellermeier, J. D. Gale, L. Bergström, and H. Cölfen, Pre-Nucleation Clusters as Solute Precursors in Crystallisation, *Chem Soc Rev* 2014, 43, 2348.
11. J. Merz et al., Synthesis, Photophysical and Electronic Properties of Tetra-Donor- or Acceptor-Substituted Ortho -Perylenes Displaying Four Reversible Oxidations or Reductions, *Chem. Sci.* 2019, 10, 7516.
12. Š. Vyskočil et al., 2,8'-Disubstituted-1,1'-Binaphthyls: A New Pattern in Chiral Ligands, *Chem. - Eur. J.* 2002, 8, 4633.
13. M. P. Allen and D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Second edition (Oxford University Press, Oxford, United Kingdom, 2017).
14. A. C. T. van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant, and W. A. Goddard, ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons, *J. Phys. Chem. A* 2001, 105, 9396.
15. W. Zhang and A. C. T. van Duin, Improvement of the ReaxFF Description for Functionalized Hydrocarbon/Water Weak Interactions in the Condensed Phase, *J. Phys. Chem. B* 2018, 122, 4083.
16. S. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *J. Comput. Phys.* 1995, 117, 1.
17. S. Nosé, A Molecular Dynamics Method for Simulations in the Canonical Ensemble, *Mol. Phys.* 1984, 52, 255.
18. N. T. K. Thanh, N. Maclean, and S. Mahiddine, Mechanisms of Nucleation and Growth of Nanoparticles in Solution, *Chem. Rev.* 2014, 114, 7610.
19. U. Khalilov, M. Yusupov, A. Tojiboev, P. Nematollahi, D. Husanova, and S. Mirzaev, Growth Onset of Perylene-Based Nanocrystals, «Узбекский Физический Журнал» 2021, 23, 7.
20. Z.-F. Yao, J.-Y. Wang, and J. Pei, Control of π - π Stacking via Crystal Engineering in Organic Conjugated Small Molecule Crystals, *Cryst. Growth Des.* 2018, 18, 7.
21. P. G. Vekilov, Nucleation, *Cryst. Growth Des.* 2010, 10, 5007.
22. M. Yusupov, E. C. Neyts, P. Simon, G. Berdiyev, R. Snoeckx, A. C. T. van Duin, and A. Bogaerts, Reactive Molecular Dynamics Simulations of Oxygen Species in a Liquid Water Layer of Interest for Plasma Medicine, *J. Phys. Appl. Phys.* 2014, 47, 025205.



Мохинур ЭЛБОЕВА,

Базовый докторант Институт ионно-плазменных и лазерных технологий

E-mail: elboyevatoxinur1990@gmail.com,

Фарход АХМЕДЖАНОВ,

Доцент институт ионно-плазменных и лазерных технологий, заведующий лабораторией – д.ф.-м.н.

Рецензент: Институт химии и физики полимеров АН РУз., заведующий лабораторией – д.ф.-м.н.с.н.с., И.Н. Нургалиев

INFLUENCE OF THE PIEZOEFFECT ON PHOTOELASTIC PROPERTIES OF BISMUTH SILICATE CRYSTALS

Abstract

The influence of the piezoelectric effect on the anisotropy of the elastic and photoelastic properties of bismuth silicate crystals was studied by the Bragg light diffraction method. The possibility of controlling the efficiency of such diffraction by changing the direction of the wave vector of an acoustic wave in a certain plane of symmetry is shown. The propagation directions of acoustic waves with the maximum values of the acousto-optic quality factor are determined

Keywords: bismuth silicate crystals, Bragg light diffraction, photoelasticity, piezoelectric effect, acoustic wave velocity, acousto-optic Q factor.

ВЛИЯНИЕ ПЬЕЗОЭФФЕКТА НА ФОТОУПРУГИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ СИЛИКАТА ВИСМУТА

Аннотация

Исследовано влияние пьезоэффекта на анизотропию упругих и фотоупругих свойств кристаллов силиката висмута методом Брэгговской дифракции света. Показана возможность управления эффективностью такой дифракции, путем изменения направления волнового вектора акустической волны в определенной плоскости симметрии. Определены направления распространения акустических волн вдоль которых наблюдаются максимальные значения акустооптической добротности.

Ключевые слова: кристаллы силиката висмута, Брэгговская дифракция света, фотоупругость, пьезоэлектрический эффект, скорость акустической волны, акустооптическая добротность.

PYEZOEFFEKTNING VISMUT SILIKAT KRISTALLARIDAGI FOTOELASTIK XUSUSIYATLARGA TA'SIRI

Annotatsiya

Pyezelektrik effektning vismut silikat kristallarining elastik va fotoelastik xossalarning anizotropiyasiga ta'siri Bregg yorug'lik difraksiyasi usulida o'rganildi. Akustik to'lqin vektorining yo'nalishini o'zgartirish orqali bunday difraksiyaning samaradorligini boshqarish imkoniyati ma'lum bir simmetriya tekisligi ko'rsatildi. Akustooptik sifat ko'rsatkichining maksimal qiymatlari kuzatiladigan akustik to'lqinlarning tarqalish yo'nalishi aniqlandi.

Kalit so'zlar: vismut silikat kristallari, Bregg yorug'lik difraksiyasi, fotoelastiklik, pyezelektrik effekt, akustik to'lqin tezligi, akustooptik sifat ko'rsatkichi.

Введение. Кристаллы силиката висмута ($\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ - BSO) являются кубическими кристаллами, принадлежащими к точечной группе 23, имеют бледно-желтую окраску и обладают электрооптическими и пьезоэлектрическими свойствами. Связь между фотоупругими и электрооптическими свойствами этих кристаллов используется в пространственных модуляторах света, электрооптических датчиках и позволяет разрабатывать различные устройства, такие как голографические записывающие устройства, оптические преобразователи и ячейки Поггеля. Таким образом, изучение фотоупругих свойств кристаллов важно для определения наиболее эффективных срезов кристаллов, используемых в качестве активных сред, и для улучшения параметров акустооптических устройств. [1, 2].

Образцы и методы исследования. В настоящей работе методом Диксона исследована зависимость акустооптической добротности M_2 от направления волнового вектора квазипродольных акустических волн в кристаллах BSO в кристаллографической плоскости (110). Известно, что этот коэффициент был введен Диксоном как свойство, определяющее интенсивность дифрагированного света в материале независимо от размеров пьезопреобразователя и мощности акустической волны [3]:

$$M_2 = \eta \frac{n^6}{V} \quad (1)$$

Здесь n — показатель преломления света, V — скорость акустических волн. В соотношении (1) введен новый параметр η — коэффициент акустооптической эффективности

Исследования фотоупругих свойств проводились на длине волны света $\lambda_0=630$ -нм, с помощью Брэгговской дифракции света на акустических волнах [5]. Эффективные фотоупругие константы определялись модифицированным методом Диксона-Коэна, в котором сравниваются интенсивности дифрагированного света в исследуемом образце и в образце-этalone [6]. В этом методе акустическая волна возбуждается попеременно со стороны эталонного образца, или со стороны исследуемого образца [8]. При возбуждении акустических волн со стороны эталона измерялись значения интенсивности света, дифрагированного в эталонном I_1 и исследуемом образце I_0 . Затем акустические волны возбуждались со стороны образца и измерялись интенсивности света в образце I_2 и эталоне I_3 .

Схема метода при возбуждении акустических волн со стороны эталонного образца приведена на рис. 1. На схеме применены следующие обозначения: 1 – эталонный образец, 2 – исследуемый образец, 3 – пьезодатчик, q – волновой вектор акустической волны, k_1 и k_2 – волновые вектора падающего и дифрагированного света, соответственно, I_0 – интенсивность падающего света, θ_B – внешний угол Брэгговской дифракции. Направление поляризации падающего на образец света, относительно поляризации акустической волны определялось с помощью поляризационного анализатора.

Значение эффективной фотоупругой константы для каждой исследованной геометрии Брэгговской дифракции света определялось из соотношения [9]:

$$\left[\frac{P_{\text{эфф}}^2 n^6}{\rho V^3 (n+1)^4} \right]_o = \left[\frac{P_{\text{эфф}}^2 n^6}{\rho V^3 (n+1)^4} \right]_s \left(\frac{I_{1o} I_{2o}}{I_{1s} I_{2s}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

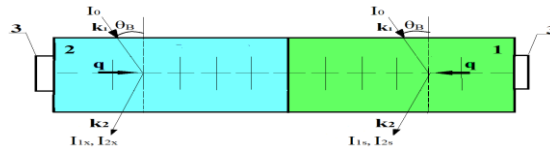


Рисунок 1. Схема определения фотоупругих констант методом Диксона-Козна.

Необходимая для расчета скорость акустических волн вдоль осей [100], [110] и [111] определялась с точностью около 0,2 % по Брэгговскому углу дифракции света на этих волнах [9]. Особенности метода и схема эксперимента детально описаны в [7].

Результаты и обсуждение. Результаты определения эффективных фотоупругих констант кристаллов силиката висмута из измерений интенсивностей дифрагированного света при различных направлениях распространения и поляризации света и звука приведены в таблице 1. Для расчета использовались следующие соотношения

$$\eta = \frac{P_{\text{эфф}}^2}{C_{\text{эфф}}} \quad (3)$$

где $C_{\text{эфф}}$ – эффективная упругая постоянная, определяемая сверткой:

$$C_{\text{эфф}} = c_{ijkl} \gamma_i \gamma_j \gamma_k \gamma_l + \Delta c_{ijkl} \gamma_i \gamma_j \gamma_k \gamma_l \quad (4)$$

где c_{ijkl} – компоненты тензора упругих констант, γ_i и γ_j – соответственно направляющие косинусы вектора поляризации и волнового вектора акустической волны.

Таблица 1

Эффективные фотоупругие константы кристаллов силиката висмута

Q	γ	K	β	α	$P_{\text{эфф}}^E$	$\Delta p_{\text{эфф}}$	$P_{\text{эфф}}^F$
[100]	[100]	[010]	[100]	[100]	$p_{11}=0.16$	0	0.16
	[001]	[001]	[100]	[001]	$p_{44}=0.04$	0	0.04
[110]	[110]	[001]	[110]	[110]	$1/4(2p_{11}+p_{21}+p_{12})+p_{44}=0.183$	0	0.183
	[110]	[001]	[110]	[110]	$1/4(2p_{11}-p_{21}-p_{12})=0.0175$	0	0.0175
	[001]	[001]	[110]	[001]	$p_{44}=0.04$	$\frac{r_{41} \cdot e_{14}}{4 \cdot \epsilon_0 \epsilon_{11}} = 0.0038$	0.0362
[111]	[111]	[100]	[111]	[111]	$1/3(p_{11}+p_{21}+p_{12}+4p_{44})=0.19$	$\frac{4 \cdot r_{41} \cdot e_{14}}{3 \cdot \epsilon_0 \epsilon_{11}} = 0.02$	0.17
	[110]	[110]	[111]	[110]	$1/6(2p_{11}-p_{21}-p_{12}+2p_{44})=0.025$	0	0.025

В таблице 1 через векторы $q, \gamma, k, \beta, \alpha$ обозначены направления, соответственно, волновых векторов звука и света и поляризации звука и падающего и дифрагированного света. В соотношении (4) Δc_{ijkl} – компоненты тензора пьезоэлектрической добавки к упругости кристалла, обусловленной влиянием пьезоэлектрического эффекта [10]:

$$P_{\text{эфф}} = p_{ijkl} \alpha_i \beta_j \gamma_k \gamma_l - \Delta p_{ijkl} \alpha_i \beta_j \gamma_k \gamma_l \quad (5)$$

Здесь $p_{\text{эфф}}$ – эффективная фотоупругая константа, которая также отличается от обычной за счет пьезоэффекта, α_i, β_j , соответственно, направляющие косинусы поляризации дифрагированного и падающего света

Таким образом, для света, дифрагированного на продольной акустической волне и поляризованного вдоль оси [100], пьезоэлектродополнительная добавка $\Delta p_{\text{эфф}}$ равна нулю. При этом при дифракции света на поперечных акустических волнах вдоль оси [110], получаем следующее соотношение для эффективной фотоупругой константы с учетом пьезоэлектродополнительной добавки $\Delta p_{\text{эфф}}$:

$$|P_{\text{эфф}}| = \left| p_{44} - \frac{r_{41} e_{14}}{4 \cdot \epsilon_0 \epsilon_{11}} \right|, \quad (6)$$

В то же время при дифракции света с поляризацией по [111] на продольной акустической волне вдоль оси [111] получаем:

$$|P_{\text{эфф}}| = \left| 1/3(p_{11} + p_{12} + p_{21} + 4p_{44}) - \frac{4 \cdot r_{41} e_{14}}{3 \cdot \epsilon_0 \epsilon_{11}} \right|, \quad (7)$$

так как пьезоэлектродополнительные добавки $\Delta p_{11}, \Delta p_{12}, \Delta p_{21}$ в этой геометрии равны нулю. В (6) и (7) $e_{\alpha\beta}, r_{\alpha\beta}$ и $\epsilon_{\alpha\beta}$ – компоненты, соответственно, пьезоэлектрического, электрооптического и диэлектрического тензоров, в матричной записи [11]. При вычислениях использовались литературные данные по плотности и показателям преломления из работы [7].

Для определения анизотропии коэффициента акустооптического качества в кристаллах, согласно формулам (1) и (3) необходимо в первую очередь найти компоненты вектора поляризации акустических волн, который в общем случае отклоняется от вектора волновой нормали. Для решения такой задачи можно использовать систему алгебраических уравнений Грина–Кристоффеля [5–7]:

$$[\Gamma_{ik} - \delta_{ik} \rho V^2] \gamma_k = 0, \quad (8)$$

где Γ_{ik} и δ_{ik} – соответственно, компоненты тензора Грина–Кристоффеля и тензора Кронекера, V – скорость акустической волны, γ_k – компоненты вектора поляризации.

Компоненты тензора Грина–Кристоффеля, представляют собой свертку тензора упругих констант, по направляющим косинусам волновой нормали κ :

$$\Gamma_{ik} = c_{ijkl} \kappa_j \kappa_l \quad (5)$$

В плоскости (110), при угле между направлением распространения акустической волны и осью [110], равным φ , направляющие косинусы равны $\kappa_1 = 1/\sqrt{2} \cdot \cos \varphi$, $\kappa_2 = 1/\sqrt{2} \cdot \cos \varphi$, $\kappa_3 = \sin \varphi$, и компоненты тензора Грина–Кристоффеля записываются в виде:

$$\Gamma_{11} = \Gamma_{22} = c_{11}(1/\sqrt{2} \cos \varphi)^2 + c_{44}(1/\sqrt{2} \cos \varphi + \sin \varphi)^2$$

$$\Gamma_{12} = \Gamma_{21} = (c_{12} + c_{44})(1/\sqrt{2} \cos \varphi)^2$$

$$\Gamma_{13} = \Gamma_{31} = \Gamma_{23} = \Gamma_{32} = (c_{12} + c_{44})1/\sqrt{2} \cos \varphi \sin \varphi$$

$$\Gamma_{33} = \Gamma_{21} = c_{11} \sin^2 \varphi + c_{44} \cos^2 \varphi$$

Подстановкой в уравнения (5) значений компонент тензора Грина–Кристоффеля Γ_{ik} из соотношений (6) была определена зависимость фазовой скорости продольных акустических волн от направления волнового вектора в плоскости (110) в кристаллах BSO. При расчете использовались следующие значения плотности, упругой и фотоупругой констант: $\rho = 9.15 \cdot 10^3$ кг/м³, $c_{11} = 13.01 \cdot 10^{10}$ Н/м², $c_{12} = 3.05 \cdot 10^{10}$ Н/м², $c_{44} = 2.43 \cdot 10^{10}$ Н/м², $p_{11} = 0.16$, $p_{12} = 0.13$, $p_{21} = 0.12$, $p_{44} = 0.04$. Дополнительные величины, необходимые для расчета, брались из [1,3,11].

На основе значений скорости продольных и поперечных волн и уравнений (6) и (8) были определены компоненты вектора поляризации и угол ориентации этого вектора относительно оси [100] в плоскости (001) из соотношения:

$$\psi = \arctg \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\gamma_2}{\gamma_1} = \arctg \frac{\sqrt{2}}{2} \left(\frac{\Gamma_{12}\Gamma_{13} - \Gamma_{23}(\Gamma_{11} - \rho V^2)}{\Gamma_{23}\Gamma_{13} - \Gamma_{12}(\Gamma_{33} - \rho V^2)} \right) \quad (7)$$

Результаты расчета $1/V^3$ для дифракции света на продольных акустических волнах показали, что максимальное значение $1/V^3$ составило $0.28 \cdot 10^{-10}$ с³/м³ при $\varphi = 35$ градусов для продольных волн. Полученные значения эффективных фотоупругих констант и величины $(1/V^3)$ использовались для расчета зависимости акустооптической добротности от направления волнового вектора акустической волны в плоскости (110) с помощью выражения (1). Результаты расчетов представлены на рисунках 2 и 3, на которых короткими линиями показаны результаты без учета пьезоэффекта, а сплошной линией — результаты с учетом пьезоэффекта.

Видно, что максимальное значение акустооптической добротности M_2 с учетом влияния пьезоэффекта при дифракции света на продольных акустических волн, распространяющихся в плоскости (110) наблюдается для направления [110], и равно $23.9 \cdot 10^{-15}$ с³/кг.

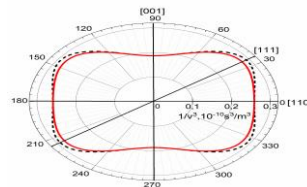


Рисунок 2. Зависимость куба медленности продольных волн в кристаллах BSO от направления волнового вектора квазипродольных акустических волн в плоскости (110).

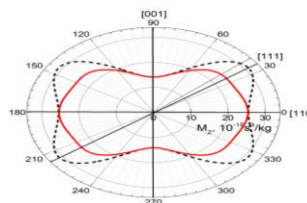


Рисунок 3 Зависимость коэффициента M_2 в кристаллах BSO от направления волнового вектора квазипродольных акустических волн в плоскости (110)

Заключение. Результаты исследования Брэгговской дифракции света на акустических волнах в кристаллах силиката висмута показывают необходимость учета влияния дополнительного вклада в акустооптическую эффективность в кристаллах, обладающих пьезоэффектом. Этот вклад вносит изменения в анизотропию их упругих и фотоупругих свойств и должен учитываться при разработке акустооптических устройств с применением таких кристаллов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Amanova M.A, Shepelevich V.V, Makarevich V.V, Navnyk V.N. Influence of Inverse Piezoelectric Effect, Photoelasticity, and Optical Activity on the Diffraction Efficiency of Transmitting Holograms in Photorefractive Crystal $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$. Journal of Applied Spectroscopy, 2020. Vol. 87, No.2, P.349–356.
2. Shen C., Zhang H., Zhang Y., Xu H., Y H., Wang, J., Zhang S. Orientation and Temperature Dependence of Piezoelectric Properties for Sillenite-Type $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ and $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ Single Crystals. Crystals, 2014. Vol. 4, No.2, P.141-151.
3. Akhmedzhanov F.R, Mirzaev S.Z, Saidvaliev U.A. Parameters of elastic anisotropy in bismuth silicate crystals. Ferroelectrics. 2020, Vol. 556, P.23–28.
4. Venturini E. L., Spencer E. G., Ballman A. A. Elasto-Optic Properties of $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$, $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$, and $\text{Sr}_x\text{Ba}_{1-x}\text{Nb}_2\text{O}_6$. Journal of Applied Physics, 1969. Vol.40, No.4, P.1622–1624.
5. Дьелесан Э.Д., Руайе Д. Упругие волны в твердых телах. Применение для обработки сигналов. - М.: Наука, 1982. – 342 с.
6. Dixon R. W., Cohen M. G. A new technique for measuring magnitudes of photoelastic tensors and its application to lithium niobate. Appl. Phys. Lett. 1966. No. 8. P. 205-207.
7. 7.Акустические кристаллы. Справочник, под ред. М.П.Шаскольской – М.: Наука, 1982, 352с.
8. Mytsyk B., Demyanyshyn N., Andrushchak A., Buryy O. Photoelastic Properties of Trigonal Crystals. Crystals. 2021. Vol. 11.P. 1095.
9. 9.Mys O., Kostyrko M., Smyk M., Krupych O., R. Vlokh, Anisotropy of acousto-optic figure of merit in optically isotropic media. Applied Optics, 2014, Vol.53, No.20, P.4616-4627.
10. 10.Buryy O., Hotra, Z., Andrushchak A. Determination of global maxima of electro-, piezo- and acousto-optic effects in langasite crystals. 2017 14th International Conference The Experience of Designing and Application of CAD Systems in Microelectronics (CADSM). P.74-78.
11. Belyi V.N., Kulak, G. V. Diffraction of light on ultrasound in gyrotropic cubic crystals in bragg conditions. Journal of Applied Spectroscopy, 1991, Vol.54, No.5, P.484–488.



Aziza ERGASHEVA,

O'zbekiston Milliy universiteti magistranti

O'zR FA Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti muhandisi

E-mail: azizaabdujabborqizi@gmail.com

Kamoliddin MEHMONOV,

O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti stajyor tadqiqotchisi

E-mail: mehmonov94@mail.ru

Turg'unali AHMADJANOV,

O'zbekiston Milliy universiteti fotonika kafedrası mudiri

E-mail: t.akhmadjanov@nuu.uz

Umedjon XALILOV,

O'zR FA Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti bosh ilmiy xodimi

Belgiya, Antverpen Universiteti, Plasmant tadqiqot guruhi

E-mail: umedjon.khalilov@uantwerpen.be

O'zR FA, Bioorganik kimyo instituti professori, k.f.d J. M. Ashurov taqrizi asosida

ENDOEDRAL KARBIN KATALITIK SINTEZIDA KISLOROD EFFEKTI

Annotatsiya

Yangi uglerod nanostrukturalaridan biri karbin so'ngi yillarda o'zining g'ayritabiiy fizik xususiyatlari tufayli zamonaviy nanotexnologiyada ko'plab tadqiqotlar mavzusiga aylana boshladi. Garchi karbin turli usullar yordamida samarali sintez qilinayotgan bo'lsada, endoedral karbinning uglerod gazlariga bog'liq katalitik sintezi mexanizmlari haligacha to'liq tushunilmadi. Ushbu modellashirishga asoslangan ishda, (5,5)@(10,10) ikki qavatli uglerod nanonaychasi ichida nikel Ni₅ katalizatori ishtirokida endoedral karbinning C va CO radikallarga bog'liq sintez jarayonlari tadqiq etildi. Xususan, natijalar Ni₅@(5,5)@(10,10) model tizim ichiga C atomlarini kiritish orqali uzun uglerod zanjirini hosil bo'lishini ko'rsatsada, CO radikali yordamida esa dastlabki bosqichlardagi karbin zanjirining ilk nukleatsiyasidan so'ng kislorod atomlari nikel klasterini oksidlashi (ya'ni, katalizatorning zaharlanishi) tufayli uglerod zanjiri o'sishdan to'xtashi mumkinligini ko'rsatdi. Olingan natijalar mavjud nazariy, modellashirish va eksperimental natijalar bilan solishtirilib tahlil qilindi. Ushbu tadqiqot ertangi kun nanotexnologiyasi uchun yangi uglerod strukturalari, xususan, karbinga asoslangan nanoqurilmalar sintezi bo'yicha foydali ma'lumotlar beradi.

Kalit so'zlar: endoedral karbin, uglerodli nanonaycha, nikel katalizatori, katalitik sintez, kislorod effekti, molekulyar dinamika.

КИСЛОРОДНЫЙ ЭФФЕКТ В КАТАЛИТИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ КАРБИНОВ

Аннотация

В последние годы карбин, являющийся одной из новых углеродных наноструктур, стал предметом многочисленных исследований в области современных нанотехнологий из-за его необычных физических свойств. Хотя карбин был успешно синтезирован различными методами, механизмы исходно-зависимого каталитического синтеза эндоэдрального карбина до сих пор полностью не изучены. В этой работе, основанной на моделировании, был исследован синтез эндоэдрального карбина в присутствии никелевого катализатора Ni₅ внутри двустенных углеродных нанотрубок (5,5)@(10,10) из радикалов C и CO. В частности, результаты показали образование длинной углеродной цепи за счет внедрения атомов C в модельную систему Ni₅@(5,5)@(10,10). Однако в случае радикала CO рост углеродной цепи прекращается за счет окисления кластера никеля атомами кислорода после зарождения карбиновой цепи. Полученные результаты сравнивались с имеющимися теоретическими, модельными и экспериментальными результатами. Это исследование дает полезную информацию о синтезе новых углеродных наноструктур, особенно наноустройств на основе карбина для нанотехнологий завтрашнего дня.

Ключевые слова: эндоэдральный карбин, углеродная нанотрубка, никелевый катализатор, каталитический синтез, кислородный эффект, молекулярная динамика.

THE EFFECT OF OXYGEN IN THE CATALYTIC SYNTHESIS OF ENDOHEDRAL CARBYNE

Abstract

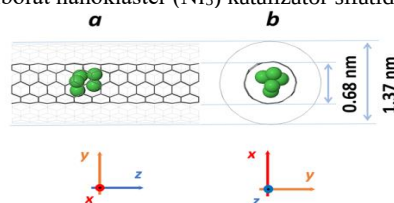
In recent years, carbyne, which is one of the new carbon nanostructures, has become the subject of much research in modern nanotechnology due to its unusual physical properties. Although carbyne has been successfully synthesized by various methods, the mechanisms of the feedstock-dependent catalytic synthesis of an endohedral carbyne are still not fully understood. In this simulation-based work, the synthesis of the endohedral carbyne in the presence of a Ni₅ nickel catalyst inside (5,5)@(10,10) double-walled carbon nanotubes from C and CO radicals was investigated. In particular, the results showed the formation of a long carbon chain by inserting C atoms into the Ni₅@(5,5)@(10,10) model system. However, in the case of CO radical, the carbon chain terminates growing due to the oxidation of the nickel cluster by oxygen atoms after the nucleation of a carbyne chain. The obtained results were compared with available theoretical, simulation and experimental outcomes. This study provides useful information on the synthesis of new carbon nanostructures, especially carbyne-based nanodevices for tomorrow's nanotechnology.

Keywords: endohedral carbyne, carbon nanotube, nickel catalyst, catalytic synthesis, oxygen effect, molecular dynamics.

Kirish. Uglerodga asoslangan nanomateriallar (karbin, grafen, uglerod nanonaychasi va h.k) zamonaviy nanotexnologiyaning asosiy obyektlaridan biri hisoblanadi [1]. Xususan, karbin (uglerodning sp^3 gibridlangan allotropik shakli [2] polin va kumulin ko'rinishda bo'lib, u mos ravishda almashinib keluvchi yakka va uch bog' ($\dots C-C \equiv C-C \equiv \dots$) yoki qo'shbog' ($\dots C=C=C \dots$) shaklida bog'langan C atomlaridan iborat zanjir hisoblanadi [3,4]. U so'ngi yillarda o'zining ajoyib fizik va kimyoviy xususiyatlari [5-8], jumladan, mustahkamligi (ya'ni, u grafen va uglerod nanonaychalariga qaraganda 2 barobar, olmosdan esa qariyb 3 barobar qattiqroq [9]), yuqori issiqlik o'tkazuvchanligi ($80 \text{ kW/m} \cdot \text{K}$ [10]) tufayli ko'plab tadqiqotlar mavzusiga aylanmoqda. Karbin, ayniqsa, mikroelektronika [11] hamda vodorod saqlash sohalarida (ya'ni, uning gravimetrik saqlash sig'imi $8 \text{ wt.}\%$ dan oshadi [12]) istiqbolli nanomaterial sifatida qaralmoqda.

Karbin grafitni lazer bilan changlatish [13,14], grafitni elektr yoyi bilan changlatish [15-17], elektrokimyoviy sintez [18], sirtida sintez [19,20] va grafendan uglerod atom zanjirlarini olish [21] kabi usullar yordamida sintez qilinishi mumkin. Ammo, karbin kimyoviy jihatdan o'ta reaktiv va beqaror [22-24] bo'lganligi uchun bu usullar ko'pincha uzun karbin zanjirini sintez qilish imkonini bermaydi. Ko'p qavatli uglerod nanonaychasi (KQUNN) ichki qismi uzun karbin sintezi uchun ideal muhit ekanligi aniqlangandan so'ng, uglerod zanjiri uzunligini oshirish bo'yicha tadqiqotlarda sezilarli o'sish kuzatildi [25-27]. Xususan, Zao va uning hamkasblari KQUNN da 100 ta [15], Shi va boshqalar esa ikki qavatli uglerod nanonaychasi (IQUNN)da rekord darajadagi uzun 6000 uglerod atomlaridan iborat uglerod zanjiri o'stirishganini ma'lum qilishdi [24]. Endoedral karbin sintezida uglerodli birikmalar va katalizatorning roli ham muhim [28,29]. Xususan, bu parametrlar uning o'sish mexanizmgiga va fizikaviy xususiyatlariga ta'sir qilishi mumkin [30]. Endoedral karbinning katalitik sintezi bo'yicha izchil tadqiqotlar olib borilayotgan bo'lsa-da [31-34], uglerodning kislorodli birikmalari (C_xO_y) yordamida karbinning katalitik sintezi mexanizmlari shuningdek, kislorodning karbin o'sishidagi xususiy roli bo'yicha savollar ochiqliciga turibdi. Shu sababli, biz bu ishda, endoedral karbinning IQUNNda nikel katalizatori hamda uglerod (C) atomi va uglerod oksidi (CO) radikallari ishtirokidagi sintez jarayonlarini molekulyar dinamika (MD) usuli orqali tadqiq etdik.

Modellashtirish usuli va tafsilotlari. Tadqiqotda jarayonlarni modellashtirish reaktiv molekulyar dinamika (MD) ga asoslangan LAMMPS dasturiy to'plam [35] orqali amalga oshirildi. Atomlarning o'zaro ta'sirini ifodalash uchun ReaxFF potentsialining [36] Zou va boshqalar [37] tomonidan ishlab chiqilgan parametrlaridan foydalanildi. Tanlangan $Ni_5@ (5,5)@ (10,10)$ tizimdagi IQUNNning (1-rasm) ichki va tashqi diametrlari mos ravishda 0.68 va 1.37 nm bo'lib, bu qiymatlar eksperimental tadqiqotlarda xabar qilingan IQUNN ning ichki va tashqi devor diametrlari (ya'ni, ichki nanonaycha diametri 0.63 nm dan 0.79 nm gacha va tashqi nanonaycha diametri 1.3 nm dan 1.6 nm gacha) bilan mos keladi [38]. Modellashtirish fazosining o'lchamlari $10.0 \times 10.0 \times 2.7 \text{ nm}^3$ sifatida tanlandi. Eksperimentlarda olinadigan juda uzun nanonaychaga taqlid qilish maqsadida, model nanonaycha uzunligi (z o'qi yo'nalishi) bo'yicha davriy chegara shartlari qo'llanilgan. IQUNN ichiga 5 ta Ni atomidan iborat nanoklaster (Ni_5) katalizator sifatida kiritildi.

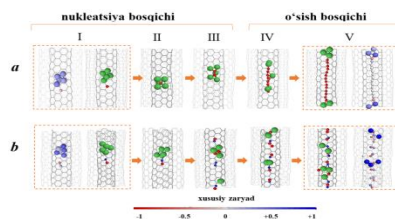


1-rasm. $Ni_5@ (5,5)@ (10,10)$ model tizimining (a) yondan va (b) tepadan ko'rinishi. Rasmda IQUNNdagi uglerod atomlari ko'rsatilmay, nanonaychaning tashqi va ichki devorlari mos ravishda ochroq va to'qroq rangli bog'lar sifatida, shuningdek, Ni atomlari yashil rangda tasvirlangan.

Dastlab, termodinamik tizim energiyasi keskin tushish va birlashgan gradient usullarini navbatma-navbat qo'llash orqali minimallashtirildi. Keyin, Berendsen termo/barostatida [39] NpT ansamblida 1 K/ps tezlik bilan 1700 K haroratgacha qizdirilib, NVT ansamblida Bussi termostati [40] orqali termodinamik muvozanatda ushlab turildi. So'ngra, tanlangan C va CO birikmalar IQUNN ichiga 250 ps interval bilan kiritilib, kiritilgan gazlarning tezliklari yo'nalishi tasodifiy va moduli 1700 K haroratdagi o'rta kvadratik tezligiga mos holda tanlandi. C va CO gazlari uchun zarba oqimi $0.687 \text{ nm}^{-2} \text{ ns}^{-1}$ (ya'ni, vaqt birligida birlik yuzaga uriluvchi atomlar soni) bo'lib, gaz bosimlari [41] mos ravishda 37.6 va 56.8 kPa ga teng ekanligi aniqlandi. Jarayonni modellashtirish davomida IQUNN ichidagi gaz muhitidagi molekullar bosimini muvozanatda saqlab turish maqsadida desorbsiyalangan O_2 molekullar har 10^6 MD qadamida (ya'ni, 0.25 ns da) termodinamik tizimdan chiqarib turildi [42]. MD modellashtirishlarda vaqt qadami 0.25 fs sifatida tanlanib, jarayonlar davomiyligi 4.5 ns tashkil etdi. Olingan natijalarni o'rtaqchalash maqsadida har bir holat 10 martadan takrorlandi.

Natijalar va ularning tahlili. 2-rasmda Ni katalizatori ishtirokidagi endoedral karbinning C (a) va CO (b) radikallari yordamida sintez jarayoni nukleatsiya (I, II, III) va o'sish (IV, V) bosqichlariga bo'lingan holda keltirilgan. C holati uchun natijalar shuni ko'rsatdiki, IQUNN ichiga kiritilgan C atomi, dastlab, nikel klasteri ustiga adsorbsiyalanadi ($E_{\text{ads}}=0.29 \text{ eV}$). C atomining elektromanfiyligi ($\chi_C=2.55$) Ni atomining elektromanfiyligi ($\chi_{Ni}=1.91$) dan katta ekanligi IQUNN ichki devori C atomlari xususiy zaryadining manfiy ($\delta=-1.49e$), endoedral Ni atomlari xususiy zaryadining esa musbat ($\delta=+1.63e$) bo'lishiga sabab bo'ladi. IQUNN ichiga kiritilgan C atomi musbat Ni atomlari ta'sirida induksiyalanib, manfiy xususiy zaryad ($\delta=-0.14e$) hosil qiladi (2a-rasm, I) va natijada elektrostatik kuchlar ta'siri tufayli nikel klasteriga bog'lanadi (2a-rasm, II). So'ngra, bu endoedral C atomi Ni klasteri sirtida diffuziyalanib (ya'ni, $E_{\text{diff}} \approx 0.4 \text{ eV}$ [43]) energiya to'sig'idan o'tib, IQUNN ichiga kiritilgan va Ni sirtiga adsorbsiyalangan boshqa C atomi bilan birikishi ($E_{\text{bog}}=0.1 \text{ eV}$ [30]) natijasida IQUNN ichida ilk karbinsimon struktura (ya'ni, uglerod dimeri) hosil bo'ladi (2a-rasm, III). Bu hodisaga uglerod zanjiri (karbin) ning nukleatsiya jarayoni deb ataladi. Nukleatsiya jarayonidan so'ng, o'sish bosqichi boshlanib, Ni atomlaridan iborat klaster shakllanayotgan zanjirning ikki uchiga taqsimlanadi hamda butun o'sish bosqichi davomida zanjirning ikki chetiga bog'langan holda turadi (2a-rasm, IV-V). Hisoblashlar Ni atomi karbin zanjirining o'rta qismidan chetki qismiga o'tganda termodinamik tizim energiyasi 1.3 eV ga kamayganligini, shuningdek, Ni atomlarining zanjirning ikki chetida turishi butun zanjir bo'ylab taqsimlanishiga qaraganda energetik jihatdan barqaror bo'lishini ko'rsatdi. Bu holatni zanjir chetlaridagi uglerod atomlarining valent elektronlari mavjudligi

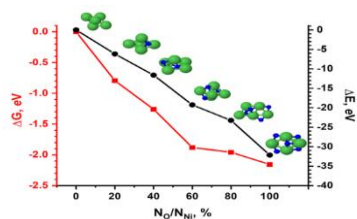
orqali tushuntirish mumkin. Xususan, karbinda C atomlari ikki tomonidan yakka va uchbog' yoki qo'shbog' shaklida bog'lanishi zanjirning o'rta qismidagi C atomlari bilan Ni atomi orasidagi kimyoviy bog' hosil bo'lishining oldini oladi. Natijada, Ni atomi karbin zanjiri bo'ylab nisbatan oson harakatlanib (ya'ni, $E_{dif} \approx 0.1$ eV energiya to'sig'idan o'tib) karbinning chetki C atomlari bilan birikadi yoki chetki C atomlariga birikkan Ni atomlariga bog'lanadi.



2-rasm. IQUNN ichidagi Ni katalizatori ishtirokidagi endohedral karbinning C (a) va CO radikal (b) yordamidagi sintez jarayoni bosqichlari. Bu yerda Ni, C va O atomlari mos ravishda yashil, qizil va ko'k ranglarda tasvirlangan. IQUNNdagi uglerod atomlari ko'rsatilgan. Shtrix chiziqli bilan ajratilgan qismda ayni strukturada xususiy zaryadlarning taqsimlanishi ham ko'rsatilgan.

Shuningdek, Ni atomlarining zanjir ikki chetida turishi uglerod zanjirining nanonaycha ichki devori bilan o'zaro ta'sirlashishi natijasida IQUNN ichki devorida nuqson hosil qilishini [17] oldini olib, katalizator sifatida uzun uglerod zanjirlari hosil bo'lishi uchun yangi uglerod atomlarining zanjirga tezroq qo'shilishiga yordam beradi [30]. Hisoblashlar shuni ko'rsatdiki, karbin zanjiri uzunligi bitta uglerod atomiga ortganda karbin zanjiri energiyasi -7.05 eV ga kamayib, ushbu qiymat kvant-mexanik hisoblash natijalariga (-5.77 eV dan -7.67 eV gacha) mos keladi [9,13,44].

IQUNN ichiga kiritilgan CO radikali C atomlariga o'xshab, dastlab, nikel klasteri sirtiga $E_A = 1.2$ eV energiya bilan adsorbsiyalanadi (2b-rasm, II) va bu adsorbsiya energiyasining qiymati experimentda olingan qiymat (ya'ni, $E_A = 1.1$ eV [45]) ga juda yaqin. Modellash natijalari shuni ko'rsatdiki, IQUNNga kiritilgan radikal katalizatorga kislorodli tomoni bilan bog'lanadi. Buning sababini atomlarning xususiy zaryadlari orqali tushuntirish mumkin. Xususan, C ning elektromanfiyligi ($\chi_C = 2.55$) Ni ning elektromanfiyligidan ($\chi_{Ni} = 1.91$) kattaligi IQUNN ning ichki devoridagi C atomlari xususiy zaryadining manfiy ($\delta = -2.03e$), katalizator sifatida kiritilgan Ni atomlarining xususiy zaryadining musbat ($\delta = +2.28e$) bo'lishiga sabab bo'ladi. Boshqa tomondan, O ning elektromanfiyligi ($\chi_O = 3.44$) C ning elektromanfiyligidan ($\chi_C = 2.55$) kattaligi CO radikalida C atomining xususiy zaryadi musbat ($\delta = +0.15e$), O atomini esa manfiy ($\delta = -0.40e$) bo'lishiga sabab bo'ladi (2b-rasm, I). Natijada, musbat Ni atomlari bilan manfiy O atomlari o'zaro elektrostatik kuchlari tufayli CO radikal katalizatorga o'zining kislorodli tomoni bilan bog'lanadi. So'ngra, katalizator sirtida diffuziyalangan (ya'ni, $E_{dif} = 0.2$ eV energiya to'sig'idan o'tib) CO radikalda C-O bog'lar Ni atomlari ta'sirida uziladi ($E_{dis} = 2.5$ eV). Xususan, nikel katalizatori C-O bog'larning katalizatorsiz dissotsiyanlash energiya to'sig'ini ($E_{dis} = 9.04$ eV) taxminan 3.6 marta kamaytiradi. CO ning parchalanishidan hosil bo'lgan C atomi o'zidan avvalgi dissotsiyanlangan C atomiga bog'lanib ($E_{bog'} \approx 0.1$ eV), uglerod dimerini hosil qiladi (2b-rasm, III). Bu jarayon CO holat uchun karbin o'sishining nukleatsiya bosqichini tashkil etadi. O'z navbatida, O atomlari o'zaro birikib ($E_{bog'} = 5.4$ eV) O₂ molekulasini sifatida nanoklaster sirtini tark etadi yoki Ni-Ni bog'ning uzilishi ($E_{dis} = 2.4$ eV) natijasida kuchli Ni-O bog'ni ($E_{bog'} = 3.9$ eV) hosil qiladi. Nukleatsiyadan keyingi o'sish bosqichida (2b-rasm, IV-V), Ni-Ni bog'larning bosqichma-bosqich uzilishi va Ni-O bog'larning hosil bo'lishi natijasida nanokatalizator jadal oksidlanib, hosil bo'layotgan Ni_xO_y nanoklasterining energiyasi muttasil kamayib boradi (3-rasm).



3-rasm. Nanokatalizator molyar Gibbs erkin energiyasining (qizil) va potensial energiyasining (qora) uning oksidlanganlik darajasiga bog'liqligi.

Xususan, klasterning oksidlanish darajasi 20, 40, 60, 80 va 100% bo'lganida klasterning oksidlanmagan (0%) holatiga nisbatan tizim potensial energiyasi o'zgarishi mos ravishda -6.2, -11.6, -19.3, -23.3 va -32.2 eV ga, molyar Gibbs erkin energiyasining o'zgarishi esa mos ravishda -0.8, -1.3, -1.9, -2.0 va -2.2 eV ga teng bo'ladi. Umuman olganda, katalizator to'la oksidlangandan keyingi tizim energiyasi va molyar Gibbs erkin energiyalari mos ravishda dastlabki holatdagi energiyalariga nisbatan 33 eV va 2.2 eV ga kamayadi (3-rasm). Energiyalarda bu o'zgarishlar mos ravishda shunga dalolat qiladiki, katalizator oksidlanishga moyil va u oksidlansa avvalgi holatiga nisbatan barqaror bo'ladi. Nanokatalizatorlarning oksidlanishi, o'z navbatida, ularning katalitik xususiyatini yo'qotishiga yoki katalizatorning zaharlanishiga olib kelishi ham mumkin. Aktiv markazlar nazariyasiga muvofiq [46], katalizator zaharlanishi jarayonida zahar (ya'ni, kislorod) katalizatoridagi aktiv markazlarga mustahkam adsorbsiyalanib, ularni qoplab qo'yadi. Zaharning katalizator bilan mustahkam kimyoviy bog'lar hosil qilishi tufayli reagentlar (CO) zaharni siqib chiqarib aktiv markazlarga o'tishi juda qiyinlashadi. Natijada, katalizator o'zining katalitik xususiyatini yo'qotadi va CO molekular parchalanmay gaz muhitida qolib ketishiga sabab bo'ladi. Bu esa, o'z navbatida, uglerodlar ta'minotining uzilishiga va karbinning o'sishdan to'xtashiga olib keladi.

Xulosa. Ushbu ishda endohedral karbinning IQUNNda nikel katalizatori hamda uglerod (C) atomi va uglerod oksidi (CO) radikallari ishtirokidagi sintez jarayonlarini MD usuli orqali tadqiq etildi. Olingan natijalar shuni ko'rsatdiki, Ni nanokatalizatori IQUNN ichiga uglerod atomlari (C) kiritilganda uzun karbin zanjiri hosil bo'lishiga yordam bersada, IQUNN ichiga CO radikal kiritilganda kislorod ta'sirida oksidlanib, o'zining katalitik xususiyatini yo'qotadi. Natijada, bu holda faqat karbin nukleatsiyasi

-
41. G. Bussi et al., Canonical Sampling Through Velocity Rescaling, The Journal of Chemical Physics 2007, 126, 014101.
 42. U. Khalilov et al., Microscopic Mechanisms of Vertical Graphene and Carbon Nanotube Cap Nucleation from Hydrocarbon Growth Precursors, Nanoscale 2014, 6, 9206.
 43. U. Khalilov et al., Mechanisms of Selective Nanocarbon Synthesis inside Carbon Nanotubes, Carbon 2021, 171, 72.
 44. Y.-H. Shin et al., Carbon Diffusion around the Edge Region of Nickel Nanoparticles, Appl. Phys. Lett. 2008, 92, 043103.
 45. A. Timoshevskii et al., Atomic Structure and Mechanical Properties of Carbyne, Phys. Rev. B 2015, 91, 245434.
 46. H. H. Madden et al., Interaction of Carbon Monoxide with (110) Nickel Surfaces, J. Chem. Phys. 1973, 58, 3401.
 47. A. Bahl, Essentials of Physical Chemistry New Delhi, 2019, S Chand Publishing edition 28,.