

**ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ
ҲУЗУРИДАГИ ИЛМий ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ
DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 РАҚАМЛИ ИЛМий КЕНГАШ**

ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ

УЛУКМУРАДОВ АБРОР НАФАСОВИЧ

**ГРАФЕН, ФУЛЛЕРЕНЛАР ВА КИЧИК ЭНЕРГИЯЛИ ВОДОРОД
АТОМЛАРИНИНГ ЎЗARO ТАЪСИРИ ЖАРАЁНЛАРИНИ
МОДЕЛЛАШТИРИШ**

01.04.04.– Физик электроника

**физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси
АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент – 2021

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD)
диссертацияси автореферати мундарижаси**

**Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD)
по физико-математическим наукам**

**Contents of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD)
on physical-mathematical sciences**

Улукмурадов Аброр Нафасович

Графен, фуллеренлар ва кичик энергияли водород атомларининг ўзаро таъсири жараёнларини моделлаштириш.....3

Улукмурадов Аброр Нафасович

Моделирование процессов взаимодействия низкоэнергетических атомов водорода, фуллеренов и графена19

Ulukmuradov Abror Nafasovich

Modeling the processes of interaction of low-energy hydrogen atoms, fullerenes and graphene35

Эълон қилинган ишлар рўйхати

Список опубликованных работ

List of published works.....39

**ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ
ҲУЗУРИДАГИ ИЛМий ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ
DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 РАҚАМЛИ ИЛМий КЕНГАШ**

ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ

УЛУКМУРАДОВ АБРОР НАФАСОВИЧ

**ГРАФЕН, ФУЛЛЕРЕНЛАР ВА КИЧИК ЭНЕРГИЯЛИ ВОДОРОД
АТОМЛАРИНИНГ ЎЗARO ТАЪСИРИ ЖАРАЁНЛАРИНИ
МОДЕЛЛАШТИРИШ**

01.04.04.– Физик электроника

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент – 2021

Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси
Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида
B2021.2.PhD/FM608 рақам билан рўйхатга олинган.

Диссертация Ўзбекистон Республикаси Фанлар Академияси Ион-плазма ва лазер
технологиялари институтида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб-
саҳифаси (www.iplt.uz) ва «ZiyoNet» Ахборот таълим порталида (www.ziynet.uz)
жойлаштирилган.

Илмий раҳбар:

Ядгаров Ишмумин Джаббарович

физика-математика фанлари доктори, катта илмий
ходим

Расмий оппонентлар:

Джурахалов Абдиравуф Асламович

физика-математика фанлари доктори, профессор

Ташатов Алланазар Каршиевич

физика-математика фанлари доктори, профессор

Етакчи ташкилот:

Тошкент давлат техника университети

Диссертация ҳимояси Ион-плазма ва лазер технологиялари институти ҳузуридаги илмий
даражалар берувчи DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 рақамли Илмий кенгашнинг 2021 йил «28»
декабрь соат 14³⁰ даги мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 100125, Тошкент шаҳри, Дўрмон
йўли кўчаси, 33-уй. Тел./факс: (+99871) 262-32-54, e-mail: info@iplt.uz, Ион-плазма ва лазер
технологиялари институти мажлислар зали).

Диссертация билан Ион-плазма ва лазер технологиялари институтининг Ахборот-ресурс
марказида танишиш мумкин (13 рақам билан рўйхатга олинган). Манзил: 100125, Тошкент
шаҳри, Дўрмон йўли кўчаси, 33-уй. Тел: (+99871) 262-31-69.

Диссертация автореферати 2021 йил «16» декабрь куни тарқатилди.
(2021 йил «16» декабрь даги 13 рақамли реестр баённомаси)



Х.Б. Ашуров

Илмий даражалар берувчи илмий
кенгаш раиси техника фанлари
доктори, профессор

Д.Т. Усманов

Илмий даражалар берувчи илмий
кенгаш илмий котиби, ф.-м.ф.д., катта
илмий ходим

Б.Е. Умирзаков

Илмий даражалар берувчи илмий
кенгаш қошидаги илмий семинар
раиси, ф.-м.ф.д., профессор

КИРИШ (фалсафа доктори (PhD) диссертацияси аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Ҳозирги вақтда углерод атомларидан ташкил топган наноструктураларни ўрганишга катта қизиқиш уйғонмоқда. Бу углеродли наноструктураларга бўлган илмий қизиқишнинг сабаби, улар асосида яратилаётган янги конструкцион замонавий электроникада анъанавий материаллар ўрнини босаётганлигидадир. Турли методлар ва турли ёндошувлар асосидаги сонли моделлаштириш, наноструктураларни тадқиқ қилишда тобора муҳим ўрин олмоқда, чунки улар аниқ белгилаб олинган структурали бирикмаларнинг хусусиятларини тўғридан – тўғри ўрганиш имконини беради.

Фуллеренларни тадқиқ қилишга бўлган эътибор фуллеренлар катнашуви билан содир бўладиган физик-химиявий ҳодисаларнинг турли-туманлиги, ва улар асосида яратиладиган янги материаллар туркумининг катта истиқболлари билан тушунтирилади. C_{60} фуллерен молекуласи бошқа фуллеренларга нисбатан энг катта симметрия ва энг катта барқарорликка эга. Фуллеренлар ичига бошқа атомларнинг кириб қолиши жараёнида эндофуллеренлар ҳосил бўлади. Эндофуллеренлар физика, химия, материалшунослик, биология фанлари ва медицина учун катта қизиқиш уйғотади ва бир неча ўн йилликлардан бери фаол тадқиқ қилиб келинмоқда. Фуллеренлар ўзларининг электрон тузилиши, молекулаларининг ўлчамлари ва физика-химиявий хусусиятлари туфайли хусусан C_{60} ва C_{70} , лар биологик фаол моддалар синтези учун асос сифатида қаралиши мумкин. Фуллеренлар ноёб биологик фаолликка эга бўлиб, саратонга қарши, нейропротекторли, вирусга қарши препаратларнинг прототип-бирикмалари сифатида ишлатилиши мумкин, бундан ташқари улар антиоксидантли и антибактериал фаолликка эга. Шу сабабли, фуллеренли қобиқнинг функционаллаштириш усуллари ишлаб чиқиш, олинган бирикма ва структураларнинг хусусиятларини ўрганиш органик, физик ва кимёвий биомедицинанинг долзарб масалалари ҳисобланади.

Сўнгги йилларда Ўзбекистон Республикасида водород, углерод ва углерод димери атомларини фуллерен C_{60} молекулаларидан сочилиши жараёнларини ўрганишга катта эътибор қаратилмоқда, шунингдек C_{60} фуллереннинг графен ёки унча катта бўлмаган ўлчамга эга чизикли углерод кластерлари билан оддий ковалент боғланишга эга бўлган стабил углеродли структуралар тадқиқ қилинди. Мамлакатимизда фаннинг ривожланиши учун катта аҳамиятга эга бўлган ушбу фундаментал тадқиқотларнинг йўналишлари Ўзбекистон Республикасининг 2017-2021 йиллардаги келгуси ривожланиши ҳаракатлар стратегиясида ўз ифодасини топган.

Ушбу диссертация иши Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 07 февралдаги "Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича ҳаракатлар Стратегияси тўғрисида"ги ПФ-4947-сонли Фармонида

белгиланган вазифаларга мос келади¹. Диссертация бўйича олиб борилган тадқиқотлар 2015-йил 15-декабрда қабул қилинган "2011-2015 йилларда Ўзбекистон Республикаси саноатини ривожлантиришнинг устувор йўналишлари тўғрисида" ги ПФ-1442 сонли Президент Фармони, 2017 йил 17-февралдаги "2017-2021-йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналишидаги ҳаракат стратегиясини амалга ошириш бўйича кейинги чора-тадбирлар тўғрисида" ги ва 2017-йил 17-февралдаги "Фанлар академияси фаолиятини янада такомиллаштириш, илмий-тадқиқот ишларини ташкил этиш, бошқариш ва молиялаштириш тўғрисида" ги П-2789-сонли қарорини, шунингдек, ушбу соҳада қабул қилинган бошқа ҳуқуқий ҳужжатларга киритилган вазифаларни бажаришда маълум даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги. Ушбу тадқиқотлар Ўзбекистон Республикаси фан ва технологияларни ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мос ҳолда амалга оширилган: II. «Физика, астрономия, энергетика ва машинасозлик. III. «Тикланувчан энергия манбаларини ривожлантириш ва улардан фойдаланиш».

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Турли чет мамлакатлардаги илмий марказларда ушбу мавзу бўйича қатор муҳим илмий тадқиқотлар, шу жумладан углеродли наноструктураларнинг механик ва адсорбцион хусусиятларини олиш бўйича математик моделлаштириш методлари билан тадқиқотлар амалга оширилди. Ушбу соҳада чет эллик олимлар В.Н. Шульга, Ю.А. Баимова (Россия), Martin Pykal (Чехия), H. W. Kroto, X. Zhou, Yue Zhang (Китай) лар томонидан яхши натижалар олган.

A.I. Melker, S.N. Romanov ва D.A. Kornilov каби муаллифлар фуллеренлар системасининг пайдо бўлиши, ўз-ўзидан ташкил топиши ва эволюциясини ҳам ўрганиш имконини берувчи молекуляр динамиканинг компьютер моделлаштирилиши процедурасини ишлаб чиқишди. Ушбу жараён тажриба билан узвий боғланган электрон даражасида конфигурация ўзгаришларини ўрганиш имконини берадики, бу ахборотларни атом даражасига кўчириш мумкин. Идеал сфероиднинг шаклланишини қуйидаги мисолларда келтириш мумкин. Бўлинмаган электронларнинг ўз-ўзидан ташкиллашуви ва уларнинг фазода фазовий эгриланиш радиусларининг камайиши ҳисобига узлуксиз ҳосил бўлиши икки нуқтаи назардан қараб чиқиш мумкин. Шунинг таъкидлаш лозимки, қараб чиқилган ёндошувни фақатгина фуллеренларга эмас, балки янада мураккаброқ бўлган нанотрубкалар каби системаларга ҳам қўллаш мумкин экан. Шунга ўхшаш тадқиқотлар ҳозир ҳам давом этмоқда.

М. Бестон, Л. Лиуанг ва Х. Ванга каби муаллифларнинг ишларида графеннинг ўралиши функционализацияси туфайли юзага келадиган кимёвий атом ёки гуруҳларнинг бурчак оғишларига таъсирларини тадқиқ қилиш

¹ 2017-2021 йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналиши бўйича ҳаракатлар стратегияси / Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017-йил 7-февралдаги ПФ-4947-сонли Фармони 1-илова, п. 3.2.

мақсадида молекуляр-механик моделлаштиришни амалга оширишди. Графеннинг эгилиш бурчаги легирланган аралашмалар зичлиги ва жойлашишларига боғлиқ эканлиги кўрсатиб берилди.

Ўзбек олимлари ф.-м.ф.д. А.С Балтенков., ф.-м.ф.д. А.А Джурахалов., ф.-м.ф.д. У.О Кутлиев., ф.-м.ф.д. И.Д Ядгаров., PhD Д.В. Алябьев лар назарий усуллар ва шунингдек, математик моделлаштириш усулларида атом ва кластерларнинг углеродли наноструктуралар билан ўзаро таъсири жараёнларини тадқиқ қилишди.

Тадқиқотнинг диссертация бажарилган илмий-тадқиқот муассасасининг илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги. Диссертация иши тадқиқотлари Ион плазма ва лазер технологиялари институтида № Ф2-ФА-Ф164 “Кристаллар сиртида фотонлар ва зарядланган заррачаларнинг углеродли наноструктуралар билан ўзаро таъсирлари жараёнларини назарий тадқиқ қилиш” мавзуси бўйича лойиҳа бажариш илмий-тадқиқот ишлари режаси асосида бажарилган.

Тадқиқотнинг мақсади. Фуллерен-графен структураларидан водород атомларининг сочилиши жараёни ва графен қатлами билан C_{60} фуллереннинг ўзаро таъсир жараёнлари динамикасини ўрганишдан иборат.

Ушбу мақсадга эришиш учун қуйидаги **тадқиқот вазифалари** белгилаб олинди:

C_{60} фуллеренларнинг графен қатлами сирти ва четлари билан ўзаро таъсирлашуви механизмлари аниқланди;

C_{60} фуллеренларнинг графен қатлами билан боғланиш энергияларининг C_{60} фуллеренларнинг графен қатлами сиртида локаллашувига боғлиқлиги аниқланди;

водород атомининг C_{60} фуллеренлар ичига киритилиши содир бўладиган яқкаланган C_{60} фуллеренларида водород атомларининг сочилиш энергиялари оралиқлари аниқланди;

C_{60} фуллеренлари ичида водород атомларининг C_{60} фуллерен сиртида хемосорбцияси сочилаётган водород атомларнинг жойлашуви механизми аниқланди;

C_{60} фуллерен-графен структураларида водород атомларнинг сочилиш жараёнлари аниқланди.

Тадқиқот объекти водород атомлари, C_{60} фуллерен ва C_{60} фуллерен - графен структураларнинг компьютер моделлари ҳисобланади.

Тадқиқот предмети атомларнинг координаталари, тезликлари, атомлараро ўзаро таъсир ва кластерларнинг C_{60} фуллеренлари билан боғланиш энергиялари ҳисобланади.

Тадқиқот усуллари. Диссертация ишида қуйидаги усуллардан фойдаланилди: энергияни минималлаштириш ва углеводород структураларни ҳисоблаш учун оптималлаштирилган Бреннер потенциалидан фойдаланиладиган молекуляр динамика усуллари.

Тадқиқотларнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

C_{60} фуллеренлар ининг графенда адсорбцияланиши жараёнида унинг геометрик жойлашуви таъсири аниқланди;
графен билан C_{60} фуллеренининг боғланиш энергияси (0,06-2.60 эВ) оралиғи аниқланди, ҳамда назарий ва экспериментал ишлар билан солиштирилди;

C_{60} фуллеренидан водород атомларининг сочилишида, фуллерен ичига водород атомининг киритилиш учун оптимал энергия қийматлари (8 эВ атрофида) ҳамда шундай киритилишда минимал энергия қиймати (тақрибан 3 эВ) аниқланди;

илк бор водород атомларининг C_{60} фуллерендаги хемосорбцияси фуллерен сиртида ҳам, унинг ички қисмида ҳам содир бўлади, қатор ҳолларда эса фуллерен ичида эркин водород атоми юзага келиши мумкин эканлиги аниқланди;

илк бор фуллерен-графен структурасидаги водород атомлари хемосорбциясига сочилаётган водород атомлари бурчак параметрларининг таъсири аниқланди.

Тадқиқотларнинг амалий натижалари қуйидагилардан иборат:

нанографен қатламлар, яккаланган фуллеренлар ва турли конфигурацияли нанографен - C_{60} фуллеренларнинг структураларининг геометрик моделлари ишлаб чиқилди;

олинган натижалар атомларнинг сочилиши ва материалларнинг корпускуляр модификациялари назарияларининг ривожланишига муҳим ҳисса қўшади.

Олинган натижалар шунингдек мос экспериментал катталиклар интерпретациялари жараёнларида фойдали бўлиши мумкин.

Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги кўплаб сондаги муаллифларнинг қиёсий ҳисоблашлари билан аниқлиги тасдиқланган углерод-углерод ва углерод-водород ўзаро таъсирлар учун кўпчилик томонидан тан олинган Бреннер потенциалидан фойдаланиш билан асосланади. Олинган натижалар йўл қўйилиши мумкин бўлган хатоликларни ҳисобга олган ҳолда олиб борилган ҳисоблашларга асосланган.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.

Олинган натижаларнинг илмий аҳамияти шундан иборатки, улар фуллерен молекуласининг графен қатлами билан ўзаро таъсири жараёнларининг характерли хусусиятларини ва адсорбция жараёнига фуллереннинг геометрик жойлашишининг таъсирини баҳолаш имконини беради.

Олинган натижалар якка фуллерендан водород атомларининг сочилиш жараёнларини таҳлил қилиш, яъни сочилган атомларнинг адсорбцияси ва инкапсуляция жараёнларида чегаравий энергия қийматларини баҳолаш имконини берди.

Атомлар ва фуллерен молекулаларнинг нанографен билан ўзаро таъсири жараёнларини математик моделлаштириш усуллари билан ўтказилган тадқиқотлар натижалари наноинженериядаги янги конструкцион

материалларни ва микро ва наноэлектрониканинг замонвий элементларини рағбатлантиришга ва ривожлантиришга хисса қўшиши мумкин.

Тадқиқот натижаларининг амалиётда қўлланилиши.

C_{60} фуллереннинг графен қатлами билан ўзаро таъсири ва водород атомининг фуллерен-графен структураларда сочилиши жараёнларини ўрганишда олинган натижалар асосида :

C_{60} фуллерендан сочилган водород атомларининг фуллерен ичига киритилишидаги оптимал энергия қийматларини аниқлаш ва фуллерен-графен структурасидан водород атомларининг сочилишида водород атомлари билан фуллереннинг ўзаро таъсири механизмларини аниқлаш № ОТ-Ф2-53 рақамли “ A^3B^5 ва A^2B^6 плёнкаларнинг юзаси ва юза ости соҳаларида ҳосил қилинган икки қатламли наноўлчамли тизимларнинг квант ўлчамли эффектлари ва электрон хоссалари” мавзусидаги фундаментал лойиҳада фойдаланилган. (Тошкент давлат техника университетининг 2021 йил 13-октябрдаги № 0119-14-2751-сонли маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш наноўлчамли тизимлар хусусиятини ўрганиш ҳамда физикавий фундаментал қонуниятларни ўзлаштириш имконини берган.

Графен сиртига C_{60} фуллереннинг адсорбцияси жараёнига C_{60} фуллерен молекуласининг геометрик жойлашувининг таъсирини ва C_{60} фуллереннинг графен билан ўзаро таъсирида боғланиш энергияси диапазонини аниқлаш № Ф2-Ф2-51 рақамли “Фуллеренлар ва уларнинг ҳосилалари асосида оптоэлектроника ва қуёш энергетикаси учун янги функционал наноматериаллар синтез қилишнинг фундаментал асослари” мавзусидаги фундаментал лойиҳада фойдаланилган. (Ўзбекистон Республикаси Фанлар Академиясининг 2021-йил 10-августдаги № 2/1255-2208 сонли маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш бир ва икки компонентли органик эритувчиларда C_{60} фуллерени молекулаларининг ўз-ўзидан ташкилланишида фуллерен структураларида атомларнинг жойлашишини аниқлаш имконини берган.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Диссертация иши натижалари 4 та Ҳалқаро ва Республикамизда ўтказилган анжуманларда баён қилинди.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилиниши. Диссертация мавзуси бўйича олинган натижалар 11 та илмий ишда чоп этилган, шу жумладан 5 та илмий мақолалар Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссияси тамонидан тавсия этилган журналларда, шуларнинг 1 таси чет эл журналида чоп этилган ва 2 та ЭҲМ учун дастурни рўйхатдан ўтказиш бўйича муаллифлик гувоҳномаси олинган.

Диссертация ҳажми ва тузилиши. Диссертация кириш, тўртта боб, хулоса ва фойдаланилган адабиётлар рўйхати ва 47 та расм, 7 та жадвални ўз ичига олган. Диссертация ҳажми 111 бетни ташкил этади.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Кириш қисмида диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати асосланади, унинг мақсади ва вазифалари шакллантирилган, объекти ва предмети аниқланган, тадқиқотнинг Ўзбекистон Республикасида фан ва технологияларни ривожлантиришнинг устувор йўналишларга мослиги кўрсатилган, тадқиқотнинг илмий янгилиги ва амалий, натижалари баён қилинган, уларнинг ишончлилиги асосланган, олинган натижаларнинг назарий ва амалий аҳамияти очиб берилган, ишланмаларни амалиётга жорий қилиш, ишнинг апробацияси натижалари, эълон қилинган ишлар ва диссертациянинг тузилиши тўғрисидаги маълумотлар келтирилган.

Диссертациянинг биринчи бобида углеродли наноструктуралар-графен, фуллерен, эндоэдраль фуллеренлар, соҳасининг замонавий ҳолати бўйича олиб борилган тадқиқот натижаларининг таҳлили, ҳозирги вақтда кенг ишлатилаётган фуллерен ва эндоэдрик бирикмалар синтези, углеродли наноструктураларнинг турли соҳалар (наноэлектроника, медицина, газларнинг адсорбцияси/сақланилиши, фармацевтика, квант ҳисоблаш қурилмалари)да қўлланилиши бўйича олиб борилган тадқиқот натижаларининг таҳлили келтирилган. Графен функционаллашувини моделлаштириш учун кенг турдаги усул ва моделлар қараб чиқилган. Графен ўзининг ажойиб хусусиятлари ва кўп сондаги амалий қўлланилиши имкониятлари туфайли катта қизиқиш уйғотиб келмоқда. Янги мураккаб наноқурилмаларни яратиш, мавжудларини оптималлаштириш унинг структураси ва динамик хусусиятларини ҳар томонлама тушунишни, шунингдек унинг ҳосилалари бўлган материаллар хусусиятларини ўрганишни талаб қилади. Мавжуд олинган назарий ва экспериментал натижаларни таҳлил қилиб мазкур илмий тадқиқотнинг вазифалари баён қилинган.

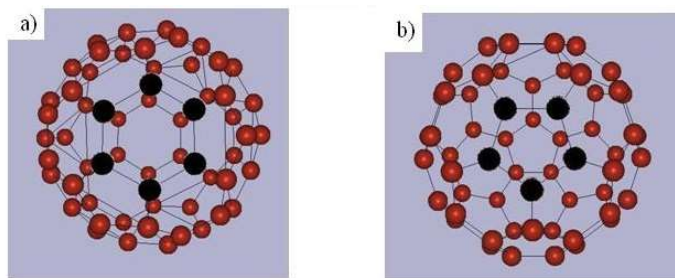
Диссертация ишининг иккинчи бобида фойдаланиладиган моделлаштириш усуллари, шунингдек тадқиқот объектларининг муҳим тавсифлари баён қилинган.

Молекуляр динамика методларидан (МДМ) фан ва техникада кенг диапазонда фойдаланилишига сабаб, улар ёрдамида оддий газ ва суюқликлардан тортиб токи мураккаб материалларда содир бўладиган жараёнларни молекуляр масштабда моделлаштириш мумкин. МД ни классик моделлаштиришда система атом асосий заррача ҳисобланадиган Ньютон механикаси қонуниятлари ёрдамида ёзилади.

Диссертация ишининг учинчи бобида C_{60} фуллеренларнинг нанографен четидаги адсорбциясини тадқиқ қилиш натижалари келтирилган. Фуллеренлар жуфт сондаги уч ўлчамли координаталарда жойлашган углерод атомларидан ташкил топган, ўз-ўзидан ёпиқ каварик кўпбурчаклар кўринишида ташкил топадиган углероднинг мустақил аллотропик шаклидир.

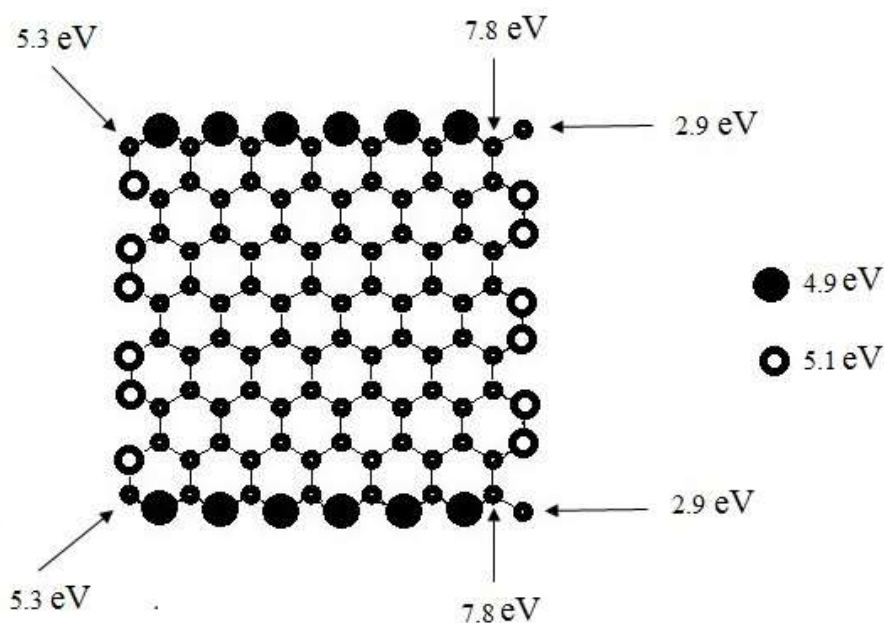
Нуқсонларсиз фуллеренлар геометрик мунтазам олтибурчак (гексагонлар, 1а-расмга қаранг) ва геометрик мунтазам бешбурчаклардан (пентагонлар, 1б-расмга қаранг) ташкил топади, таркибида нуқсонлар

бўлмаган графен эса фақатгина гексагон шаклига эга бўлади (2-расмга қаранг).



1-расм. C_{60} фуллереннинг атом структураси мисолида фуллереннинг атом структуралари а) гексагон ва б) пентагон, қора доирачалар билан ажратилган

Нуқсонларсиз графен икки ўлчовли гексогонал углерод кристалл панжараси бўлиб (2-расмга қаранг), фарқ қилувчи физик хусусиятларга эга бўлган ноёб объект ҳисобланади ва интеграл схемаларда тағлик сифатида фойдаланилиши мумкин.



2-расм. Тўғри бурчакли 112 атомли нанографен

C_{60} фуллеренларнинг графен сиртидаги адсорбциясининг қуйидаги баъзи ҳолатлари келтирилган:

I) битта фуллерен атомининг битта графен атоми билан ўзаро таъсири (C-АТР) воситасида,

II) фуллерен гексагонининг графен гексагони (C-RING) билан ўзаро таъсири воситасида,

III) фуллереннинг иккита қўшни атоми билан графеннинг (BRI) иккита қўшни атоми ўртасидаги ўзаро таъсир воситасида,

IV) фуллерен гексагонининг маркази графен (C-RING2) атоми устида жойлашган шароитдаги ўзаро таъсир воситасида,

V) фуллереннинг яқин иккита қўшни бўлмаган атомларининг графеннинг яқин икки қўшни бўлмаган атомлари ўзаро таъсири воситасида каби турли усулларда амалга оширилиши мумкин.

Нанографеннинг горизонтал чеккаси “zigzag” кўришишда, вертикал чеккаси эса “armchair” кўринишда бўлади. Когезия энергиялари 7.4 эВ дан фарқ қиладиган атомлар когезия энергиялари кўрсатилган ҳолда катта ўлчам ёки стрелка билан ажратилган.

1.Жадвалда биз томонимиздан 5 та ажратиб олинган адсорбция усуллариининг компьютер моделлаштирилиши натижаларини таҳлил қилиш асосида адсорбцияланган фуллеренларнинг геометрик тавсифлари келтирилган.

C_{60} эркин фуллеренининг радиуси 3.60 Å га тенг бўлганлиги сабабли, унинг сферик симметрияси максимал ва минимал радиусларининг тенглигига олиб келади, яъни уларнинг нисбати 1 га тенг. Адсорбция натижасида C_{60} фуллеренининг симметрияси бузилади ва бу симметриянинг бузилиши графен сиртида қандай адсорбция содир бўлаётганлигига боғлиқ бўлади.

1-жадвал

Графен сиртига адсорбцияланган C_{60} фуллеренининг геометрик тавсифлари

	адсорбция усуллари				
	I C-ATP	II C-RING	III BRI	IV C-RING2	V
ўртачалаштирилган радиус, Å	3.60	3.61	3.60	3.61	3.60
максимал радиус, Å	3.91	3.98	3.91	3.88	3.88
минимал радиус, Å	3.53	3.50	3.50	3.48	3.47
Максимал ва минимал радиуслар нисбати	1.108	1.137	1.117	1.115	1.118

Шунингдек, C_{60} фуллеренлари учун адабиётларда келтирилган экспериментал ва назарий йўл билан олинган натижалар билан солиштирилган боғланиш энергиялари ва адсорбция масофалари олинди (2-

жадвалга қаранг). Ишда тажриба йўли билан C_{60} фуллереннинг графен билан боғланиш энергияси 0.85 эВ га, тажрибада ўлчанадиган адсорбция масофасининг қиймати, яъни C_{60} фуллерен атомлари ва графен атомлари орасидаги энг кичик масофа 2.9 Å га тенглиги аниқланди. Ишда учта биринчи принцили методлар: PBE, PBE-D2 ва optB86b орқали I дан IV гача адсорбция усулида боғланиш энергиялари ва адсорбция масофалари аниқланди.

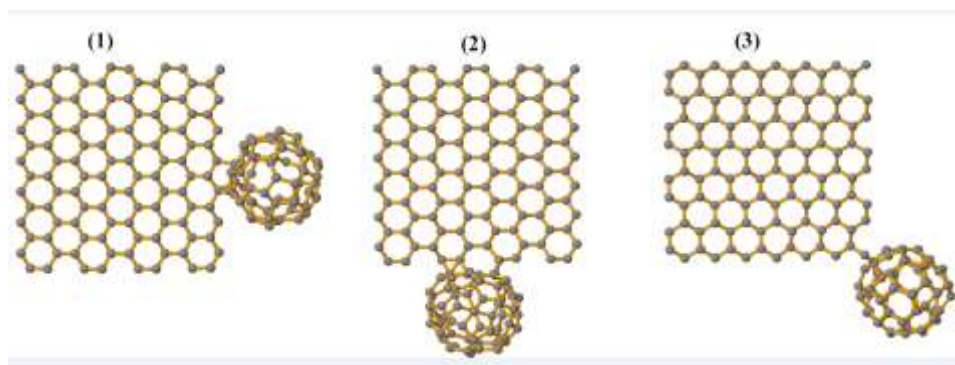
2-жадвал

Олинган натижаларнинг (қора ҳарфлар билан ажратилган) бирламчи принцили ҳисоблашлар ва тажриба натижалари билан таққосланиши

	адсорбция усули	Ҳисоблаш методи				Эксперимент
		Бреннер потенциали	Биринчи принцили			
			PBE	PBE-D2	ptB86b	
Боғланиш энергияси, эВ	I, C-ATP	1.08	0.15	0.91	1.28	0.85
	II, C-RING	0.77	0.13	0.83	1.17	
	III, BRI	1.07	0.13	0.84	1.20	
	IV, C-RING2	0.06	0.13	0.90	1.23	
	V	0.84	-	-	-	
Адсорбция масофаси, Å	I, C-ATP	2.62	3.50	2.82	2.81	2.9
	II, C-RING	2.69	3.79	3.32	3.35	
	III, BRI	2.69	3.57	3.10	3.14	
	IV, C-RING2	2.19	3.53	3.15	3.16	
	V	2.22	-	-	-	

2-жадвалдан кўриниб турибдики, олинган натижалар бирламчи принцили ҳисоблашлар ва тажриба натижалари билан яхши мос келади. Шунингдек таъкидлаш лозимки, биринчи адсорбция усули қолганларидан афзалроқ экан, чунки бу адсорбция усулида C_{60} фуллерени билан графеннинг ўзаро боғланиш энергияси энг катта қийматга эга бўлиб, адсорбцияланган фуллереннинг ўзи графен билан ушбу ўзаро таъсир натижасида деформацияланади.

Фуллереннинг графен четидаги адсорбциясини ўрганиш учун C_{60} фуллерен ва графенларнинг компьютер моделларидан фойдаланилди. Фуллереннинг нанографен четидаги 3 хил адсорбцияси кўриб чиқилди (3-расмга қаранг):



3-расм. Адсорбцияланган C₆₀ фуллеренининг ўзаро таъсири визуаль тасаввурлари. 1) нанографен zigzag четининг ўртасида, 2)) нанографен armchair четининг ўртасида ва 3) нанографеннинг четки «бурчак» атомида.

- 1) фуллерен нанографеннинг zigzag четининг ўртасида адсорбцияланган,
- 2) фуллерен нанографеннинг armchair четининг ўртасида адсорбцияланган,
- 3) фуллерен когезия энергияси 2.9 эВ бўлган нанографеннинг «бурчак» атоми олдида адсорбцияланган.

Адсорбциянинг бу барча учта вариантларида нанографен жойлашган текисликдаги фуллереннинг геометрик маркази олдиндан берилган деб ҳисобланади. Нуқсонсиз фуллерен ва нанографеннинг дастлабки ўзаро жойлашишлари берилгандан сўнг энергияни минималлаштириш методида аниқланган адсорбцияланган фуллерен ва графенларнинг ёрдамида боғланиш энергиялари ва бошқа натижалар 3-жадвалда келтирилган.

3-жадвал

Графен чеккаларида адсорбцияланган C₆₀ фуллеренининг тавсифлари

Графен четидаги адсорбция тартиб рақами	1	2	3
Боғланиш энергияси, эВ	2.0	2.6	0.4
Фуллереннинг ўртачалаштирилган радиуси, Å	3.60	3.61	3.60
Фуллереннинг максимал радиуси, Å	3.96	4.03	3.84
Фуллереннинг минимал радиуси, Å	3.52	3.24	3.52
Максимал ва минимал радиуслар нисбати	1.125	1.244	1.091

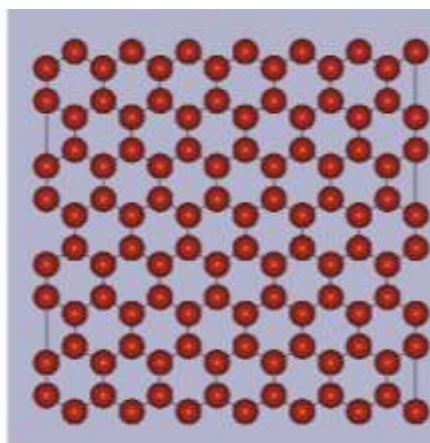
3.Жадвалдан фуллереннинг графеннинг armchair қиррасига энг яхши ва нанографеннинг “бурчак” атомларига энг ёмон адсорбцияланиши, графен бурчагида адсорбцияланиш жараёнидаги боғланиш энергиясининг фуллереннинг янада кучлироқ деформацияси кузатиладиган графен сиртига адсорбцияланиши жараёнидаги энг катта боғланиш энергиясидан деярли икки марта катта бўлиши кўриниб турибди.

Диссертациянинг тўртинчи бобида графен билан оддий ковалент боғланиш ҳосил қиладиган фуллерен ҳисобланувчи “C₆₀-графен”

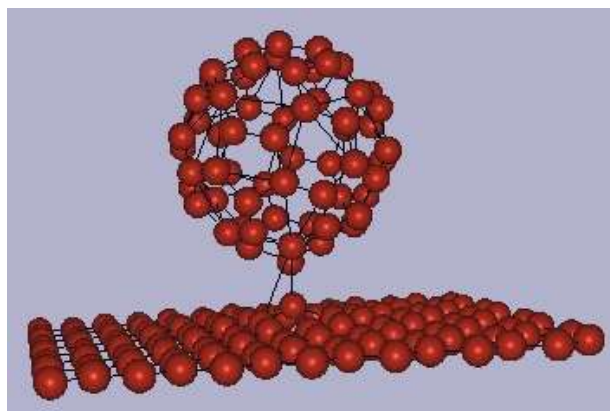
структурасига тушаётган водород атомининг тушиши кўриб чиқилган.

Фуллереннинг компьютер модели 4б-расмда келтирилган бўлиб, энди графен сифатида даврий шартлар қўйилган графеннинг 112 атомли тўғри бурчакли қисми қаралади (4б-расмга қаранг), ва шу сабабли “C₆₀- графен” нинг углеродли структураси 4б-расмда келтирилган.

Водород атомининг тушишини компьютер моделлаштирилишидаги барча бошқа шартлар, яъни REBO потенциали ва фуллеренларнинг графен билан ноковалент ўзаро таъсирларини қўшганда, олдинги 3 бобда келтирилган баёнга айнан ўхшаш. Фақатгина шуни таъкидлаш лозимки, келиб тушаётган водород атомининг кинетик энергияси 1 дан 10 эВ гача 1 эВ қадам билан ва 10 дан 100 эВ гача 10 эВ қадам билан танлаб олинди, шу жумладан графен “C₆₀-графен” углерод структурасининг таркибий қисми бўлган ҳолда ҳам, бу ҳолда фуллерен тушаётган водород атоми биринчи бўлиб учратади. Юқорида баён қилинган водород атомининг энергиялари интервалидан водород атомларининг фуллеренларга тушишини моделлаштиришда ҳам фойдаланилди. Компьютерда моделлаштиришнинг барча ҳолларида водород атоми углеродли структураларга тасодифан тушади, “C₆₀-графен” структураси ҳолида эса тушиш шундай танлаб олинадики, водороднинг фуллеренга ёки фуллерен билан “ҳимоя” қилинмаган графен сиртига тушиш эҳтимоллиги тенг кучли бўлсин.



а)



б)

(а) – 112 атомдан иборат графен (б) – “C₆₀-графен” структураси

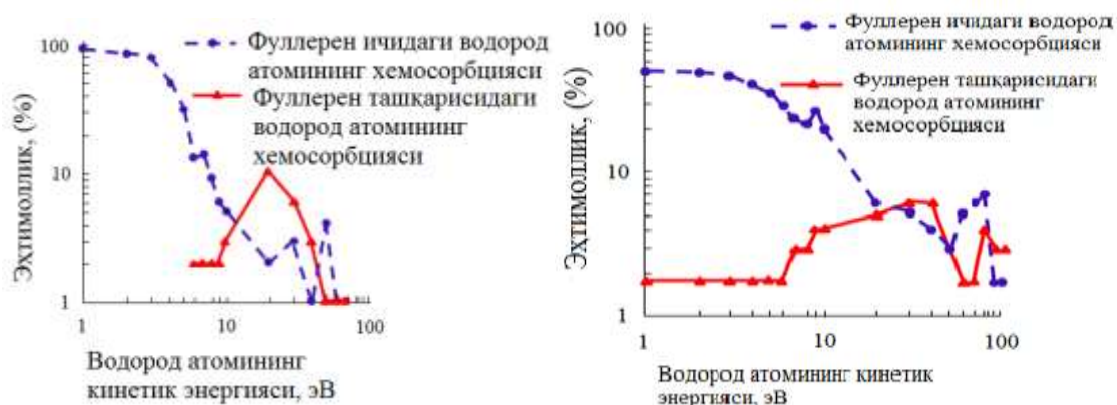
4-расм. Компьютер моделлаштиришнинг виртуал тасаввури.

100 эВ энергияли водород атомининг “C₆₀-графен” структурасига тушиши ҳам худди шунингдек нормалдан графен сиртига томон ҳисобланадиган 0° дан 45° интервалгача тушиш бурчаги ўзгаришида моделлаштирилди.

Компьютер моделлаштирилишининг асосий натижалари расмларда график кўринишида кўрсатилган. 5а-расмда водород атомининг эркин фуллерендаги хемосорбцияси эҳтимоллигининг водород атоми кинетик энергиясига боғлиқлиги келтирилган. Хемосорбция водород атомларининг

бир қисмини фуллереннинг ташқи қисмида фуллерен билан ковалент боғланишига олиб келади, айниқса 10 эВ энергияларда бу ҳолнинг эҳтимоллиги катта, қолган қисми эса ички сиртда бундай боғланиш ҳосил қилади ва унинг эҳтимоллиги 20 эВ энергияларда каттароқ.

5б-расмда юқоридагига ўхшаш ҳоллар учун эҳтимолликларнинг боғланишлари келтирилган бўлиб, энди бунда фуллерен “C₆₀-графен” структурасининг бир қисми ҳисобланади; боғланишларнинг умумий характери илгаригидай қолади, лекин хемосорбция ушбу структура таркибида графен бўлганлиги сабабли яхшироқ амалга ошади. Фуллерен “C₆₀-графен” структураси таркибида жойлашган.

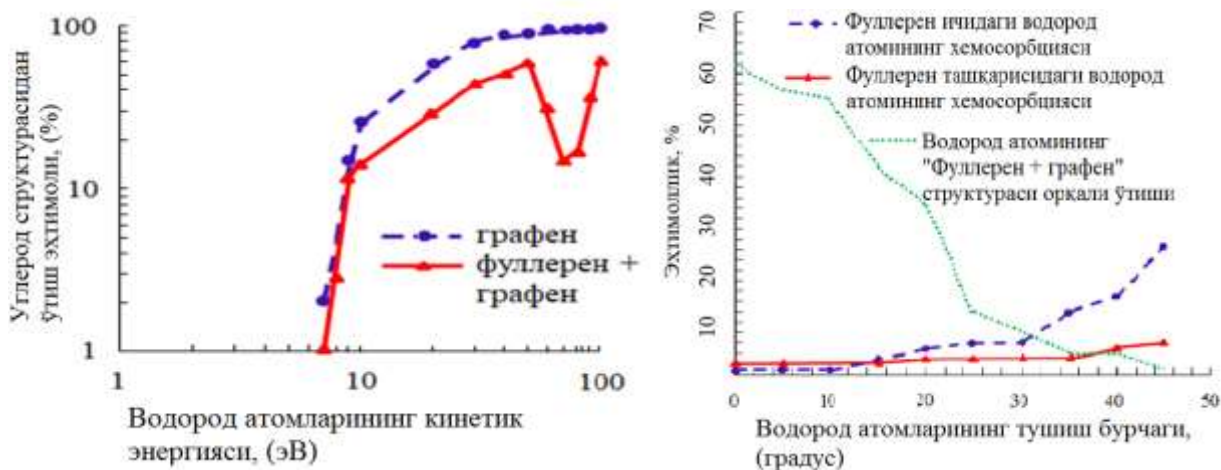


5-расм. а)- водород атоми хемосорбцияси эҳтимоллигининг унинг кинетик энергиясига боғлиқлиги эркин фуллерен учун, б)-водород атоми хемосорбцияси эҳтимоллигининг унинг кинетик энергиясига боғлиқлиги “C₆₀ фуллерен -графен” структураси учун

Бомбардимон қилувчи водород атомларининг энергиялари 20 эВ дан 40 эВ оралиқда бўлганда водород атомининг фуллерен ичига хемосорбцияси фуллереннинг ташқи томонида хемосорбцияланишига қараганда афзалроқ бўлиб, бунда афзаллик эркин ҳолдаги фуллеренда “C₆₀-графен” структурани ташкил қилувчи фуллерендагидан юқорироқ. “C₆₀-графен” структура водород атомини 10 эВ гача бўлган тушиш энергияларида эркин фуллеренларга қараганда ёмонроқ қайтаради, лекин 200 эВ гача бўлган катта энергияларда яхши қайтаради. Худди бошқа атомлар сингари, водород атомлари учун тахминан 8 эВ га тенг бўлган оптимал энергия мавжуд бўлиб, бунда H@C₆₀ эндофуллереннинг ҳосил бўлиш эҳтимоллиги энг юқори бўлар экан, водород атомини фуллеренга киритиш учун зарур бўлган энг кичик энергия тахминан 3 эВ га тенг бўлар экан.

ба-расмда водород атомининг графен ва “C₆₀-графен” структураси орқали ўтиши эҳтимоллигининг водород атоми кинетик энергиясига боғлиқлик графиклари келтирилган, худди кутилганидек водород атомларининг “C₆₀-графен” структураси орқали ўтиши ёмонроқ экан. Водород атомлари тушиш бурчагининг содир бўлаётган жараёнларга

таъсири кўрсатилган. Одатда структуралар модификацияси учун одатда перпендикуляр тушиш қараб чиқилиши туфайли бу сезиларли ўзгаришлар тушаётган заррачаларнинг катта энергияларда кузатилади деб ҳисоблаб, водород атомининг 100 эВ энергияларида уларнинг тушиш бурчакларини 0° дан 45° гача 5° қадам билан ўзгартириб, моделлаштириш билан чегараланамиз.



6-расм. а)- водород атоми ўтиши эҳтимоллигининг унинг кинетик энергиясига боғлиқлиги, б)- водород атомининг тушиш энергияси 100 эВ бўлган ҳолда водород атоми хемосорбция эҳтимоллигининг унинг тушиш бурчагига боғлиқлиги

Моделлаштириш бўйича олинган натижалар 6б-расмда келтирилган бўлиб, бу ерда “C₆₀-графен” структураси таркибига кирувчи фуллеренларнинг ички ва ташқи томонларида водород атоми хемосорбциясининг тушиш бурчагига ва водород атомининг “C₆₀-графен” структурасидан ўтиш эҳтимоллигининг тушиш бурчагига боғлиқликлари графиклари келтирилган. Бу расмдан кўринадики, водород атомининг янада қияроқ тушишида унинг “C₆₀-графен” структурасидан ўтиши эҳтимоллиги камаяди, лекин фуллереннинг ички томонида ҳам, унинг ташқи томонида ҳам водород атомининг хемосорбцияси эҳтимоллиги ортади.

ХУЛОСА

1. C_{60} фуллерен молекуласининг графен билан энг юқори боғланиш энергияси, ўзаро таъсирлашиши натижасида энг кам деформацияга учраши ва энергия жихатдан энг яхши адсорбция механизми аниқланди.

2. C_{60} фуллереннинг нанографен кирраларига адсорбция жараёнида, энг яхши адсорбция, “armchair” киррасида эканлиги ва энг ёмон адсорбция нанографеннинг бурчагидаги атомига эканлиги аниқланди.

3. Фуллереннинг графен билан 0,06 эВ дан 2,60 эВ гача бўлган интервалда боғланиш энергиясининг қийматлари топилди. Уларнинг баъзилари назарий ва эксперименталь натижалар билан таққосланди.

4. $H @ C_{60}$ эндофуллерен ҳосил бўлиш эҳтимоли максимал бўлган водород атомларининг энергияси тахминан 8 эВ ва водород атомини фуллеренга киритиш учун зарур бўлган энг паст энергия 3 эВ га тенглиги аниқланди.

5. $H @ C_{60}$ эндофуллерен ҳосил бўлиш жараёнида, водород атомининг фуллерен билан боғланган ҳолатларига нисбатан фуллерен билан кимёвий жихатдан боғланмаган ҳолатлари (водород атомининг фуллерен ичида муаллақ қолиши) анча кам эканлиги кўрсатилган.

6. Водород атомлари паст энергияларда (2 эВ гача) фуллеренга туширилганда фуллереннинг гидрогенланиши ҳосил бўлади. Туширилаётган водород атомларининг энергияси 10 эВ дан юқори бўлса фуллерендаги углерод атомларидан бири учиб чиқади ва фуллеренда ваканция ҳосил қилади. Фуллеренларнинг сифатини сақлаб қолиш учун водород атомларининг энергиясини 10 эВ дан кам олиш кераклиги аниқланди.

7. “ C_{60} фуллерен-графен” структурасини энергиялари 50 эВ дан юқори бўлган водород атомлари билан бомбардимон қилинганда структуранинг сезиларли даражада бузилиши аниқланди.

8. “ C_{60} фуллерен-графен” структурасини энергиялари 20 эВ дан 40 эВ гача оралиғидаги водород атомлари билан бомбардимон қилинганда фуллерен ичидаги водород атомларининг хемосорбцияси фуллерен ташқарисидаги водород атомларининг хемосорбциясидан устун бўлиши ва эркин фуллерен учун бу устунлик “ C_{60} фуллерен-графен” ни ташкил этувчи фуллерендагидан катталиги аниқланди.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ
УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ ИНСТИТУТЕ ИОННО-ПЛАЗМЕННЫХ И
ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

ИНСТИТУТ ИОННО-ПЛАЗМЕННЫХ И ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

УЛУКМУРАДОВ АБРОР НАФАСОВИЧ

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ АТОМОВ ВОДОРОДА, ФУЛЛЕРЕНОВ И
ГРАФЕНА**

01.04.04.– Физическая электроника

**АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ (PhD)
ПО ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИМ НАУКАМ**

Ташкент – 2021

Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № В2021.2.PhD/FM608.

Диссертация выполнена в Институте ионно-плазменных и лазерных технологий.

Автореферат диссертации на трёх языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещён на веб-странице Научного совета по адресу www.iplt.uz и Информационно-образовательном портале «ZiyoNet» по адресу www.ziyo.net.

Научный руководитель:

Ядгаров Ишмумин Джаббарович
доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник

Официальные оппоненты:

Джурахалов Абдиравуф Асламович
доктор физико-математических наук, профессор

Ташатов Алланазар Каршиевич
доктор физико-математических наук, профессор

Ведущая организация:

Ташкентский государственный технический университет

Защита диссертации состоится «28» декабря 2021 г. в 14³⁰ часов на заседании Научного совета DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 при Институте ионно-плазменных и лазерных технологий по адресу: 100125, г.Ташкент, ул.Дурмон йули, 33. Тел./Факс: (+99871) 262-32-54, e-mail: info@iplt.uz).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Института ионно-плазменных и лазерных технологий (зарегистрирована за № ____), по адресу: 100125, г.Ташкент, ул.Дурмон йули, 33. Тел.: (+99871) 262-31-69.

Автореферат диссертации разослан «16» декабря 2021 года.
(реестр протокола рассылки 13 от «16» декабря 2021 года).



Х.Б. Ашуров

Председатель научного совета по присуждению учёных степеней, доктор технических наук, профессор

Д.Т. Усманов

Учёный секретарь научного совета по присуждению учёных степеней, д.ф.-м.н., старший научный сотрудник

Б.Е. Умирзаков

Председатель научного семинара при научном совете по присуждению учёных степеней, д.ф.-м.н., профессор

ВВЕДЕНИЕ (Аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации. В настоящее время, интерес к изучению углеродных наноструктур, состоящих из атомов углерода, уделяется все большее внимание. Причина научного интереса к этим углеродным наноструктурам объясняется тем, что конструкционные материалы, созданные на их основе, идут на смену традиционным материалам современной микроэлектроники. Численное моделирование различными методами и подходами играет все более важную роль в исследованиях наноструктур, потому что это позволяет прямое изучение свойств четко определенных структурных соединений.

Внимание к исследованиям фуллеренов обусловлено разнообразием уникальных физико-химических явлений, происходящих при участии фуллеренов, и большими перспективами применения нового класса материалов, создаваемых на их основе. Молекула фуллерена C_{60} обладает наиболее высокой среди других фуллеренов симметрией и наибольшей стабильностью. При проникновении внутрь фуллеренов чужеродных атомов образуется эндофуллерен. Эндофуллерены представляют значительный интерес для физики, химии, материаловедения, биологических наук, медицины и активно изучаются уже в течение нескольких десятилетий. Благодаря своему электронному строению, размеру молекул и физико-химическим свойствам фуллерены, в частности фуллерены C_{60} и C_{70} , могут рассматриваться в качестве основы для синтеза биологически активных веществ. Фуллерены могут обладать уникальной биологической активностью и найти применение в качестве соединений-прототипов противораковых, нейропротекторных, противовирусных препаратов, обладать антиоксидантной и антибактериальной активностью. В связи с этим, разработка методов функционализации фуллеренового кока, изучение структуры и свойств полученных соединений являются актуальными задачами в области органической, физической и биомедицинской химии.

В Республике Узбекистан в последнее время усилилось внимание к изучению процессов рассеяния атомов водорода, углерода, димеров углерода на молекулах фуллерена C_{60} , а также исследовалась стабильность углеродных структур, представляющих собой фуллерен C_{60} соединенный с графеном простой ковалентной связью или посредством линейных углеродных кластеров небольших размеров. Направления этих фундаментальных исследований, имеющих большое значение для развития науки нашей страны, отражены в Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан на 2017-2021 годы¹.

Данная диссертационная работа в определенной степени соответствует задачам, предусмотренных в Указе Президента Республики Узбекистан № УП-4947 «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики

Узбекистан» от 07-февраля 2017 года.¹ Данное диссертационное исследование в определенной степени служит выполнению задач, предусмотренных в Постановлении Президента Республики Узбекистан ПП–1442 «О приоритетных направлениях развития индустрии Республики Узбекистан на 2011-2015 гг.» от 15 декабря 2015 года, № УП-4947 «О мерах по дальнейшей реализации Стратегии действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан в 2017-2021 годах» от 7 февраля 2017 года и №ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля 2017 года, а также в других нормативно-правовых документах, принятых в Республике за последние годы данной сфере.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики.

Работа была выполнена в соответствии с приоритетными направлениями развития науки и технологий Республики Узбекистан: II. «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение». III. «Развитие и использование возобновляемых источников энергии».

Степень изученности проблемы. Ряд важнейших научных исследований по данной тематике проведен в различных зарубежных научных центрах, в том числе были проведены исследования методами математического моделирования по получению адсорбционных и механических свойств углеродных наноструктур. Наиболее значительные результаты в указанной области были достигнуты зарубежными учеными, В.Н. Шульгой, Ю.А. Баимовой (Россия), Martin Pykal (Чехия), H. W. Kroto, X. Zhou, Yue Zhang (Китай),

В работах A.I. Melker, S.N. Romanov and D.A. Kornilov авторы разработали процедуру компьютерного моделирования молекулярной динамики, которая позволяет изучать зарождение, самоорганизацию и эволюцию структуры фуллеренов. Процедура дает возможность изучить изменения конфигурации на электронном уровне и переносить полученную информацию на атомарный уровень это тесно связано с экспериментом. Образование идеального сфероида может быть рассматривается с двух точек зрения: самоорганизация неподеленных электронов и непрерывных преобразование пространства за счет уменьшения пространства радиус кривизны. Следует отметить, что рассмотренный подход может быть применяется не только к фуллеренам, но и к более сложным системам, таким как нанотрубки. Подобные исследования сейчас продолжаются.

В работах авторов М. Бестон, Л. Лиуанг и Х. Ванга было выполнено молекулярно-механическое моделирование, чтобы исследовать влияние химических атомов или групп на угловое отклонение, вызванного

¹ Стратегия действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан в 2017-2021 годах // приложение № 1 к Указу Президента Республики Узбекистан от 7 февраля 2017 года № УП-4947, п. 3.2.

функционализацией свертывания графена. Было показано, что угол сгиба графена сильно зависит от ориентации и плотности легирующих примесей.

Ученые Узбекистана д.ф.-м.н. Балтенков, А.С., д.ф.-м.н. Джурахалов А.А., д.ф.-м.н. Кутлиев У.О., д.ф.-м.н. Ядгаров, PhD Алябьев Д.В. исследовали процессы взаимодействия атомов и кластеров с углеродными наноструктурами как теоретическими методами, так и методами математического моделирования.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертационная работа. Диссертационное исследование выполнено в рамках плана научно-исследовательских работ следующих проекта при Институте ионно-плазменных и лазерных технологий по теме: № Ф2-ФА-Ф164 «Теоретическое исследование процессов взаимодействия фотонов и заряженных частиц с углеродными наноструктурами на поверхности кристаллов»

Целью исследования является изучение динамических процессов взаимодействия фуллерена C_{60} с графеновым листом, процессов рассеяния атомов (на примере атомов водорода) на фуллерен - графеновых структурах.

Для достижения этой цели были сформулированы следующие **задачи исследования:**

выявление механизмов взаимодействия фуллерена C_{60} с графеновым листом, как с его поверхностью, так и с его краями;

выявление зависимостей энергии связи фуллерена C_{60} с графеновым листом от локализации фуллерена C_{60} на поверхности графена;

установление диапазона энергий, рассеиваемых на уединенном фуллерене C_{60} атомов (водорода), в котором происходит внедрение атома водорода вовнутрь фуллерена C_{60} ;

выявление механизмов локализации рассеиваемого атома (водорода) внутри фуллерена C_{60} (хемсорбция атома водорода на поверхности фуллерена C_{60});

выявление механизмов взаимодействия атомов (водорода), при их рассеянии на структуре фуллерен C_{60} -графен.

Объектом исследования являются компьютерные модели атомов водорода, фуллерена C_{60} , структура C_{60} -графен.

Предметом исследования являются координаты, скорости атомов, энергии межатомного взаимодействия и энергии связывания кластеров и фуллерен C_{60} .

Методы исследования. В диссертационной работе применены следующие методы: метод минимизации энергии и метод молекулярной динамики с использованием потенциала Бреннера, оптимизированного для расчета углеводородных структур.

Научная новизна исследования заключается в следующем: установлено влияние геометрического расположения фуллерена C_{60} на процесс адсорбирования его на графене;

определен и сопоставлен с теоретическими и экспериментальными работами диапазон энергий связи фуллерена C_{60} с графеном – 0,06-2.60 эВ.

определены оптимальные значения энергии внедрения рассеиваемого атома (водорода) вовнутрь фуллерена C_{60} – около 8 эВ, минимальных значений энергии, при котором возможно такое внедрение – приблизительно 3 эВ;

получено, что хемосорбция атомов водорода фуллереном C_{60} происходит как на внешней поверхности фуллерена C_{60} (гидрирование фуллерена), так и на внутренней, в ряде случаев, возможно возникновение свободного атома водорода внутри фуллерена;

установлено влияние угловых параметров рассеиваемых атомов (водорода) на хемосорбцию этих атомов структурой фуллерен C_{60} -графен.

Практические результаты исследования заключаются в следующем:

разработаны геометрические модели листов (нано)графена, уединенных фуллеренов, структур (нано)графен-фуллерен C_{60} различных конфигураций;

полученные результаты вносят важный вклад в развитие теории рассеяния атомов, теории корпускулярной модификации материалов.

полученные результаты могут быть полезными также при интерпретации соответствующих экспериментальных данных.

Достоверность результатов исследований обосновывается применением общепринятых потенциала Бреннера для углерод-углеродных и углерод-водородных взаимодействий, точность которых подтверждена сравнительными расчетами многих авторов. Полученные результаты базируются на тщательно проведенных расчетах и корректном учете возможных погрешностей.

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Научная значимость результатов заключается в том, что они позволили получить характерные особенности процессов взаимодействия молекулы фуллерена с листом (нано)графена, оценить влияние геометрического расположения фуллерена C_{60} на процесс адсорбирования его на графене.

Полученные результаты позволили проанализировать процессы рассеяния атомов водорода на уединенном фуллерене – а именно оценить пороговые значения энергий при которых проходят процессы адсорбции и инкапсуляции рассеиваемых атомов.

Результаты исследований методами математического моделирования процессов взаимодействия атомов и молекул фуллерена с (нано)графеном могут стимулировать и способствовать развитию нанотехнологии новых конструкционных материалов и современных элементов микро- и нанoeлектроники.

Внедрение результатов исследования. На основе результатов изучения процессов взаимодействия фуллерена C_{60} с графеновым листом и процессов рассеяния атомов водорода на фуллерен - графеновых структурах:

- результаты определения оптимального значения энергии внедрения рассеиваемого атомов водорода вовнутрь фуллерена и выявления механизмов взаимодействия атомов водорода, при их рассеянии на структуре фуллерен, фуллерен-графен были использованы в работе Проекта №ОТ-Ф2-53: «Квантово-размерные эффекты и электронные свойства двухслойных наноразмерных структур, созданных на поверхности и приповерхностное области пленок A_3B_5 » (руководитель Проекта доктор физ. -мат. наук, профессор Б.Э. Умирзаков), (Справка № 0119-14-2751, Ташкентского государственного технического университета от 13 октября 2021 года). Использование научных результатов позволило изучить свойства наноразмерных систем и освоить фундаментальные законы физики;

-результаты влияния геометрического расположения фуллерена C_{60} на процесс адсорбции на графене были использованы в работе Проекта № ОТ-Ф2-51 «Фундаментальные основы синтеза новых функциональных наноматериалов для оптоэлектроники и солнечной энергетики на основе фуллеренов и их производных» института ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз (руководитель Проекта доктор физ.мат.наук, А.М. Каххоров), (Справка № 2/1255-2208 Академия Наук Республики Узбекистан от 10 августа 2021 года). Использование научных результатов позволило определить расположение атомов в структурах фуллеренов при самоорганизации молекул фуллерена C_{60} в одно- и двухкомпонентных органических растворителях.

Апробация результатов исследования. Результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 4 международных и республиканских конференциях.

Публикация результатов исследования. Результаты, полученные по теме диссертации, изложены в 11 научных трудах, в том числе в 5 статьях, опубликованных в журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистана для публикации основных научных результатов диссертационных работ и получено 2 свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы включая 47 рисунка и 7 таблиц. Текст диссертации изложен на 111 страницах.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении раскрывается актуальность темы исследования, формулируются цели и задачи исследования, описываются объект и предмет исследования, приводятся краткий обзор по востребованности выбранных объектов исследования, показано соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики, приводятся научная

новизна и практические результаты исследования, раскрываются научная и практическая значимость, внедрение в практику полученных результатов. Описана структура диссертации и приведена информация о количестве опубликованных работ по теме диссертационного исследования.

В первой главе диссертации приведен обзор современного состояния области углеродных наноструктур – графена, фуллеренов, эндоэдральных фуллеренов: способы синтеза фуллеренов и синтеза эндоэдрических соединений, применяемых в настоящее время, приведены примеры практического применения углеродных наноструктур в различных областях (нанoeлектроника, медицина, фотоэлектрика, адсорбция/хранение газов, фармацевтика, квантовые вычислительные устройства). Рассмотрены обширные методы и модели для моделирования функционализации графена. Графен вызвал большой интерес благодаря своим замечательным свойствам и многочисленным потенциальным приложениям. Для создания и оптимизации сложных новых наноустройств потребуется всестороннее понимание его структурных и динамических свойств, а также свойств его производных. На основе анализа имеющихся теоретических и экспериментальных данных сформулирована постановка задачи исследования.

Во второй главе диссертации описаны использованные методы моделирования, а также представлены важные характеристики объектов исследования.

Методы молекулярной динамики (МД) используются в широком диапазоне приложений как в науке, так и в технике, по причине того, что их можно использовать для моделирования процессов в молекулярном масштабе (наномасштаб), начиная с от простых газов и жидкостей до сложных материалов. В классическом моделировании МД, система описывается уравнениями движения Ньютона, где атом является основной частица.

В третьей главе диссертации приведены результаты исследования адсорбции фуллерена C_{60} на краях нанографена. Фуллерены представляют собой самостоятельную аллотропную форму углерода в виде изолированных молекул, самоорганизованных в виде выпуклых замкнутых многогранников, составленных из четного числа трехкоординированных атомов углерода.

Бездефектные фуллерены состоят из геометрически правильных шестиугольников (гексагоны, см. рис. 1а) и геометрически правильных пятиугольников (пентагоны, см. рис. 1б), тогда как бездефектный графен только из гексагонов (см. рис. 2).

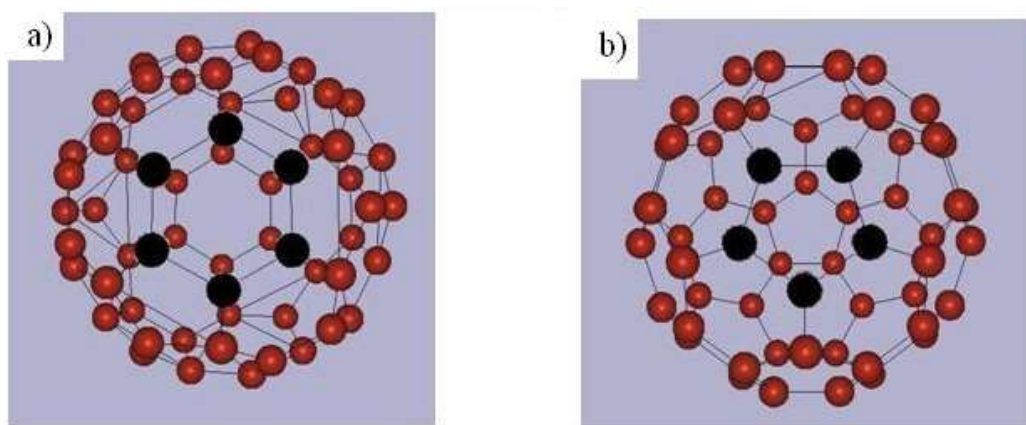


Рис. 1. Атомные структуры фуллерена а) гексагон и б) пентагон, выделенные черными кружками, на примере атомной структуры фуллерена C₆₀

Бездефектный графен, являющийся двумерной гексагональной углеродной кристаллической решёткой (см. рис. 2), является уникальным объектом с отличительными физическими свойствами и может быть выбран как подложка в интегральных схемах.

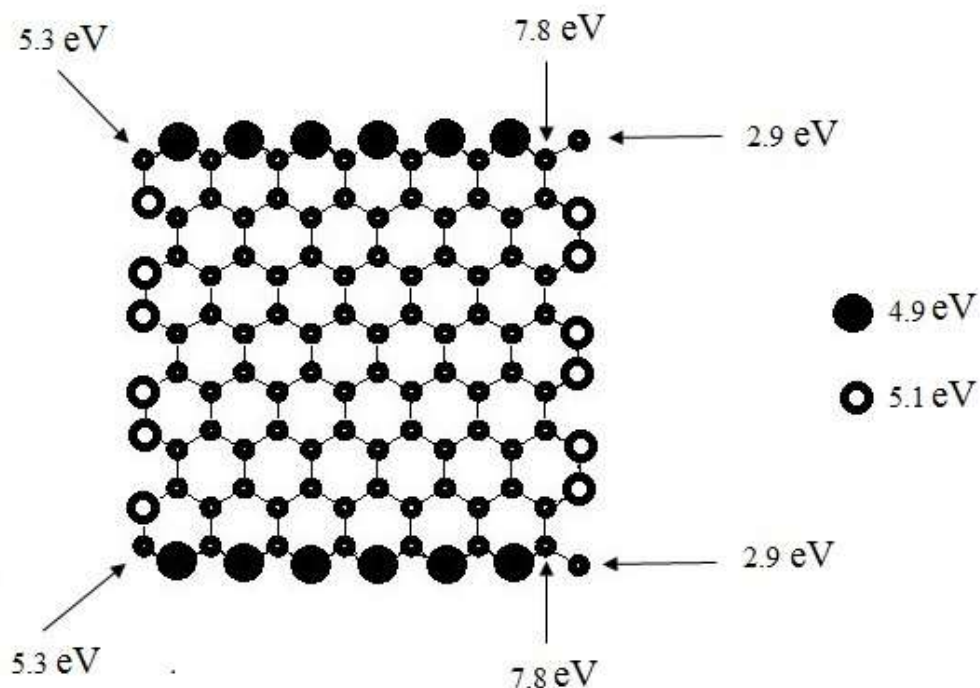


Рис. 2. Прямоугольный 112-атомный нанографен

Было получено, что адсорбция фуллерена C₆₀ на поверхности графена может осуществляться разными способами, здесь перечислены некоторые из них:

- I) посредством взаимодействия одного атома фуллерена и одного атома графена (C-АТР),

II) посредством взаимодействия гексагонов фуллерена и графена (C-RING),

III) посредством взаимодействия двух соседних атомов фуллерена и двух соседних атомов графена (BRI),

IV) посредством взаимодействия, при котором центр гексагона фуллерена располагается над атомом графена (C-RING2),

V) посредством взаимодействия двух ближайших несоседних атомов фуллерена и двух ближайших несоседних атомов графена.

Горизонтальные края нанографена - zigzag края, вертикальные - armchair края. Атомы, энергия когезии которых отличается от 7.4 эВ, выделены большими размерами или стрелками с указанием их энергий когезии.

В табл.1 приводятся геометрические характеристики адсорбированного фуллерена, полученные нами путем анализа результатов компьютерного моделирования 5 выбранных способов адсорбции.

Так как радиус свободного фуллерена C_{60} равен 3.60 Å, а его сферическая симметрия приводит к тому, что значения его максимального и минимального радиусов равны друг другу и их отношение равно 1, то в результате адсорбции нарушается сферическая симметрия фуллерена C_{60} и это нарушение симметрии зависит от способа адсорбции на поверхности графена.

Таблица 1

Геометрические характеристики фуллерена C_{60} , адсорбированного на поверхность графена

	способы адсорбции				
	I C-ATP	II C-RING	III BRI	IV C-RING2	V
радиус усредненный, Å	3.60	3.61	3.60	3.61	3.60
радиус максимальный, Å	3.91	3.98	3.91	3.88	3.88
радиус минимальный, Å	3.53	3.50	3.50	3.48	3.47
отношение максимального радиуса к минимальному	1.108	1.137	1.117	1.115	1.118

Были также получены энергии связывания и расстояния адсорбции для адсорбированных фуллеренов C_{60} , которые сравнивались с литературными экспериментальными и теоретическими результатами (см. табл. 2). В работе экспериментально получено, что энергия связывания фуллерена C_{60} с графеном равна 0.85 эВ, а наименьшее расстояние между атомами фуллерена C_{60} и атомами графена, которое можно считать измеряемым экспериментальным значением расстояния адсорбции, равно 2.9 Å. В работе тремя первопринципными методами: PBE, PBE-D2 и optB86b были получены энергии связывания и расстояния адсорбции для способов адсорбции с I по IV.

Как видно из табл. 2, полученные результаты в основном хорошо согласуются с экспериментальными данными и результатами, полученными первопринципными методами. Следует также отметить, что из всех способов адсорбции наиболее лучший I способ адсорбции, так как при этом способе адсорбции фуллерен C_{60} имеет наибольшую энергию связывания с графеном, а сам адсорбированный фуллерен меньше деформируется в результате своего взаимодействия с графеном.

Таблица 2

Сравнение полученных результатов (выделено жирным шрифтом) с результатами первопринципных расчетов и экспериментальными данными

	способ адсорбции	метод расчета				Эксперимент
		потенциал Бреннера	первопринципные			
			PBE	PBE-D2	ptB86b	
Энергия связывания, эВ	I, C-ATP	1.08	0.15	0.91	1.28	0.85
	II, C-RING	0.77	0.13	0.83	1.17	
	III, BRI	1.07	0.13	0.84	1.20	
	IV, C-RING2	0.06	0.13	0.90	1.23	
	V	0.84	-	-	-	
Расстояние адсорбции, Å	I, C-ATP	2.62	3.50	2.82	2.81	2.9
	II, C-RING	2.69	3.79	3.32	3.35	
	III, BRI	2.69	3.57	3.10	3.14	
	IV, C-RING2	2.19	3.53	3.15	3.16	
	V	2.22	-	-	-	

Для изучения адсорбции фуллерена на краях графена использовались компьютерные модели фуллерена C_{60} и нанографена. Было рассмотрено три варианта адсорбции фуллерена на края нанографена (см. рис. 3):

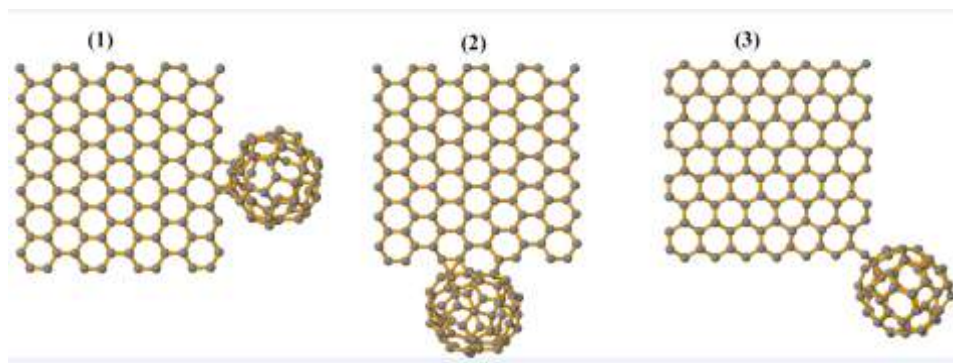


Рис. 3. Визуальные представления взаимодействия адсорбированного фуллерена C_{60} . 1) на середине zigzag края нанографена, 2) на середине armchair края и 3) на крайнем «угловом» атоме нанографена.

- 1) фуллерен адсорбирован на середине zigzag края нанографена,
- 2) фуллерен адсорбирован на середине armchair края нанографена
- 3) фуллерен адсорбирован около «углового» атома нанографена, у которого была энергия когезии 2.9 эВ.

Во всех этих трех вариантах адсорбции изначально задавалось, что геометрический центр фуллерена находится в плоскости, в которой расположен нанографен. После задания соответствующего первоначального взаимного расположения бездефектных фуллерена и нанографена методом минимизации энергии были найдены энергии связывания адсорбированного фуллерена с нанографеном и другие результаты, представленные в таблице 3

Таблица 3

Характеристики фуллерена C_{60} , адсорбированного на краях графена

Номер варианта адсорбции на край графена	1	2	3
Энергия связывания, эВ	2.0	2.6	0.4
Радиус фуллерена усредненный, Å	3.60	3.61	3.60
Радиус фулл ерена максимальный, Å	3.96	4.03	3.84
Радиус фуллерена минимальный, Å	3.52	3.24	3.52
Отношение максимального радиуса к минимальному радиусу	1.125	1.244	1.091

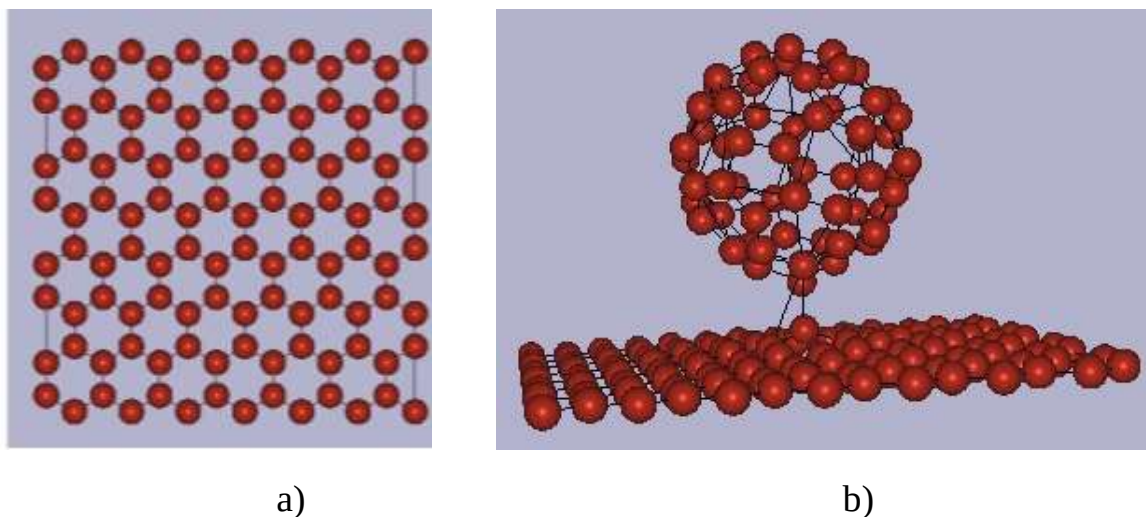
Из таблицы 3 следует, что лучше всего фуллерен адсорбируется на armchair крае нанографена, хуже всего на «угловом» атоме нанографена, энергия связывания при адсорбции на край нанографена может быть почти в два раза больше, чем наибольшая энергия связывания при адсорбции на поверхность графена, при этом наблюдается более сильное деформирование

формы фуллерена.

В четвертой главе рассмотрено падение атомов водорода на структуру «C₆₀-графен», которая представляет собой фуллерен, связанный простой ковалентной связью с графеном.

Компьютерная модель фуллерена представлена на рисунке 4б, но теперь в качестве графена будет выступать 112-атомный прямоугольный участок графена с наложением периодических условий (см. рис. 4), и, поэтому, углеродная структура «C₆₀-графен» будет выглядеть такой, как показано на рис. 4б).

Все остальные условия компьютерного моделирования падения атомов водорода, включая потенциал REBO и нековалентное взаимодействие фуллерена с графеном, аналогичны тем, что описаны в предыдущей главе 3. Отметим лишь то, что кинетическая энергия падающих атомов водорода выбиралась при значениях от 1 до 10 эВ с шагом 1 эВ и от 10 до 100 эВ с шагом 10 эВ при перпендикулярном падении на графен, в том числе и при случае, когда графен был составной частью углеродной структуры «C₆₀-графен», причем в этом случае фуллерен мог первым встретить падающий атом водорода. Описанный выше интервал энергий атомов углерода использовался и при моделировании падения атомов водорода на фуллерен. Во всех случаях компьютерного моделирования атом водорода случайным образом падал на углеродные структуры, а в случае структуры «C₆₀-графен» падение задавалось таким образом, чтобы вероятности попасть на фуллерен или на поверхность графена, не «защищённую» фуллереном, были равны.



(а) – графен, состоящий из 112 атомов, (б) – структура «C₆₀-графен»

Рис. 4. Визуальные представления компьютерных моделей

При энергии падения атома водорода 100 эВ на структуру «C₆₀-графен» так же моделировалось изменение угла падения, отсчитываемого от нормали к поверхности графена, от 0° до 45°.

Основные результаты компьютерного моделирования показаны на рисунках в виде графиков. На рисунке 5а показана зависимость вероятности

хемосорбции атома водорода на свободном фуллерене от кинетической энергии атома водорода. Хемосорбция приводит к тому, что часть атомов водорода ковалентно связывается с фуллереном на наружной его поверхности, это более вероятно при энергиях до 10 эВ, а другая часть – на внутренней поверхности, это более вероятно при энергиях около 20 эВ.

На рис. 5б показаны аналогичные предыдущему случаю зависимости вероятностей, но теперь фуллерен - это часть структуры «С₆₀-графен»; общий характер зависимостей остался прежним, но хемосорбция лучше осуществляется благодаря наличию графена в этой структуре. Фуллерен находится в составе структуры «С₆₀-графен»

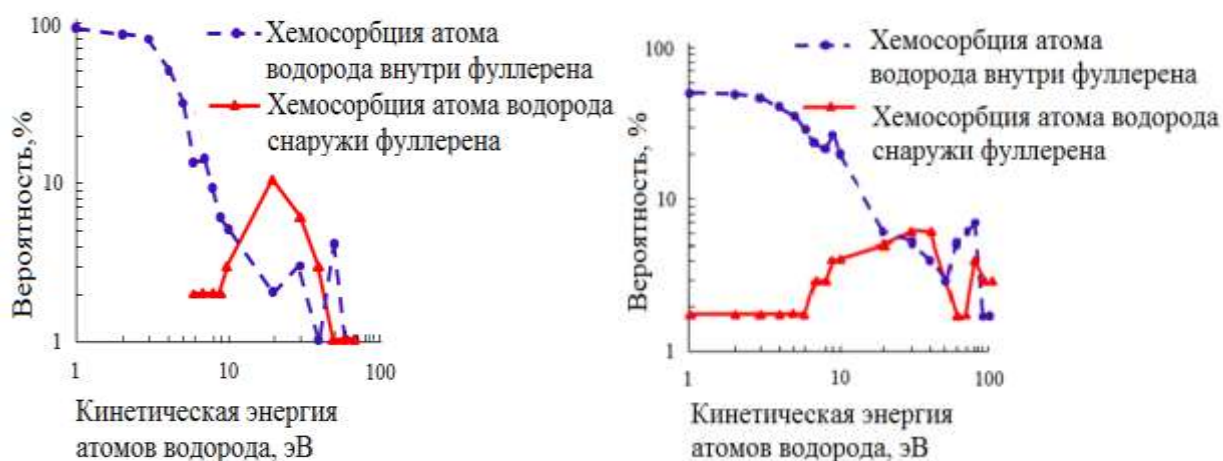


Рис. 5. а)- зависимости вероятности хемосорбции атома водорода от его кинетической энергии. б)-зависимости вероятности хемосорбции атома водорода от его кинетической энергии, но теперь фуллерен - это часть структуры «С₆₀-графен»

При энергиях бомбардирующих атомов водорода от 20 до 40 эВ хемосорбция атомов водорода внутри фуллерена преобладает над хемосорбцией снаружи фуллерена, причем для случая свободного фуллерена это преобладание большее, чем для фуллерена, составляющего структуру «С₆₀-графен». Структура «С₆₀-графен» отражает атомы водорода при энергиях падения до 10 эВ хуже, чем свободный фуллерен, но лучше - при больших энергиях до 200 эВ. Как и в случае других атомов, для атомов водорода существуют оптимальная энергия, при которой наблюдается максимальная вероятность образования эндофуллерена Н@С₆₀, эта энергия приблизительно равна 8 эВ. Наименьшая энергия, необходимая для внедрения в фуллерен атома водорода равняется приблизительно 3 эВ.

На рис.6а показаны графики зависимостей вероятности прохождения атома водорода сквозь графен и структуру «С₆₀-графен» от кинетической энергии атома водорода, как и ожидалось через структуру «С₆₀-графен» атом водорода хуже проходит. На рис. 6б показаны вопросы о влиянии угла падения атомов водорода на происходящие процессы. Учитывая, что для модификации структур обычно рассматривают перпендикулярное к поверхности падение и то, что существенные изменения возможны при

достаточно больших энергиях падающих частиц, ограничиваемся лишь моделированием падения атомов водорода с энергией 100 эВ при углах падения от 0° до 45° с шагом 5° .

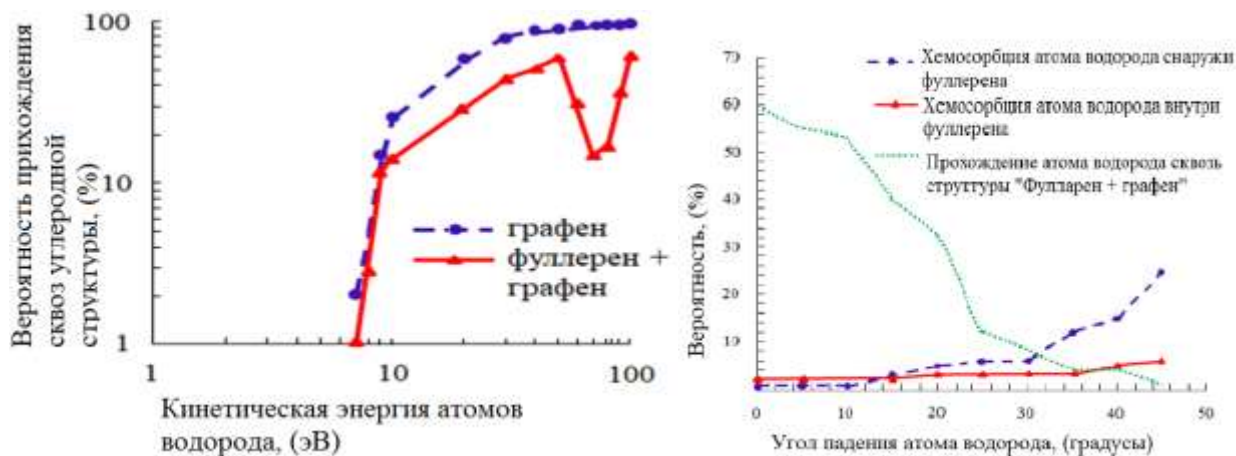


Рис. 6. а)-зависимости вероятности прохождения атома водорода от его кинетической энергии. б)- зависимости вероятности хемосорбции атома водорода от угла падения при кинетической энергии 100 эВ

Полученные в результате моделирования результаты приведены на рис. 6б, где показаны графики зависимости от угла падения вероятностей хемосорбции атома водорода с наружной и внутренней стороны фуллерена, находящегося в составе структуры «C₆₀-графен», и вероятность прохождения атома водорода сквозь углеродную структуру «C₆₀-графен» от угла падения. Как видно из этого рисунка, при более косом падении атомов водорода уменьшается вероятность прохождения атома водорода сквозь структуру «C₆₀-графен», но увеличивается вероятность хемосорбции атомов водорода, как на наружной стороне фуллерена, так и на внутренней.

Компьютерным моделированием с использованием методов молекулярной динамики в рамках потенциала Бреннера определялись вероятности образования эндофуллерена H@C₆₀ с энергиями атомов водорода $E_k=4, 6, 8$ и 10 эВ при нормальном падении на гексагон и пентагон фуллерена. Помимо образования эндофуллерена H@C₆₀ наблюдается гидрирование фуллерена. В данной ситуации гидрирование фуллерена - это часть случаев хемосорбции атомов водорода, а именно, хемосорбция на внешней стороне фуллерена. Другая же часть случаев хемосорбции, а именно хемосорбция на внутренней стороне фуллерена, соответствует образованию эндофуллерена H@C₆₀. Так, как согласно результатам проведенных компьютерных расчетов атомы водорода внутри фуллерена редко остаются химически несвязанными с атомами фуллерена при своем проникновении внутрь фуллерена, то можно приближенно считать, что все случаи хемосорбции атома водорода с фуллереном равны сумме случаев гидрирования и образования эндофуллеренов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Выявлен энергетически лучший механизм адсорбции, при котором фуллерен C_{60} имеет наибольшую энергию связи с графеном, с возможно меньшей деформацией фуллерена, как результат его взаимодействия с графеном;

2. Определено, что лучше всего фуллерен адсорбируется на armchair крае нанографена, хуже всего на «угловом» атоме нанографена, энергия связи при адсорбции на край нанографена может быть почти в два раза больше, чем наибольшая энергия связи при адсорбции на поверхность графена, при этом наблюдается большее деформирование фуллерена;

3. Найдены значения энергии связи фуллерена с графеном, часть из которых были сопоставлены с литературными теоретическими и экспериментальными результатами, имеющими значительный диапазон от 0.06 до 2.60 эВ;

4. Выявлены энергия атомов водорода, при которой вероятность образования эндофуллерена $H@C_{60}$ максимальна, это энергия приблизительно равна 8 эВ, и наименьшая энергия, необходимая для внедрения в фуллерен атома водорода – около 3 эВ;

5. Показано, что вероятность образования эндофуллерена $H@C_{60}$, в котором атом водорода был бы свободным (химически не связанным с фуллереном), намного меньше вероятности образования такого эндофуллерена $H@C_{60}$, в котором атом водорода несвободный (химически связан с фуллереном);

6. Выявлено, что при малых энергиях падения (до 2 эВ) атома водорода на фуллерен, основным результатом будет гидрирование фуллеренов, начиная с энергии 10 эВ атомы водорода хоть и редко, но могут выбить один из атомов углерода в фуллерене, тем самым образовав вакансию в фуллерене. Для сохранения качества фуллеренов надо брать энергии атомов водорода менее 10 эВ.

7. Определено, что существенное разрушение структуры « C_{60} -графен» при бомбардировке атомами водорода наблюдается при энергиях более 50 эВ.

8. При энергиях бомбардирующих атомов водорода от 20 до 40 эВ, хемосорбция атомов водорода внутри фуллерена преобладает над хемосорбцией снаружи фуллерена, причем для случая свободного фуллерена это преобладание большее, чем для фуллерена, составляющего структуру « C_{60} -графен».

**SCIENTIFIC COUNCIL ON AWARDING OF SCIENTIFIC DEGREES
DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 INSTITUTE OF ION-PLASMA AND LASER
TECHNOLOGIES**

INSTITUTE OF ION-PLASMA AND LASER TECHNOLOGIES

ULUKMURADOV ABROR NAFASOVICH

**MODELING OF INTERACTION PROCESSES OF LOW-ENERGY
HYDROGEN ATOMS, FULLERENE AND GRAPHENE**

01.04.04 –Physical electronics

**ABSTRACT OF DISSERTATION OF THE DOCTOR OF
PHILOSOPHY (PhD) ON PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES**

Tashkent – 2021

The theme of the dissertation of doctor of philosophy (PhD) on physical and mathematical sciences was registered at the Supreme Attestation Commission of the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number № B2021.2.PhD/FM608.

Dissertation has been prepared at the Institute of ion-plasma and laser technologies named after U.A.Arifov of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan.

The abstract of the dissertation in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) has been posted on the website of the Scientific Council (www.iplt.uz) and on Information-educational portal «ZiyoNet» (<http://www.ziyo.net>).

Scientific supervisor:

Yadgarov Ishmumin Djabbarovich
Doctor of Physical and Mathematical Sciences

Official opponents:

Dzhurakhlov Abdirauf Aslanovich
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor

Tashatov Allanazar Karshievich
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor

Leading organization:

Tashkent state technical university

The defense will take place on «18» December 2021 at 14³⁰ at the meeting of the Scientific Council number DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 at Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies (Address: 100125, Uzbekistan, Tashkent, 33 Durmon yuli street. Phone/fax: (+99871) 262-32-54, e-mail: info@iplt.uz).

The PhD dissertation is can be looked through in the Information-Resource Centre of the Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies (is registered №13) (Address: 100125, 33,Durmon yuli str., Tashkent, Uzbekistan. Phone: (+99871) 262-31-69).

The abstract of the dissertation is sent out on «16» December 2021.

(Mailing report № 13 on «16» December 2021).



Kh.B.Ashurov

Chairman of scientific council on award of scientific degrees, doctor of technical science, professor

D.T. Usmanov

Scientific secretary of scientific council on award of scientific degrees, doctor physical and mathematical science, senior researcher

B.E.Umirzakov

Chairman of scientific seminar under scientific council on award of scientific degrees doctor of physical and mathematical science, professor

INTRODUCTION (abstract of PhD thesis)

The importance and necessity of the topic of dissertation. At present, more and more attention is paid to the study of carbon nanostructures consisting of carbon atoms. The reason for the scientific interest in these carbon nanostructures is explained by the fact that structural materials created on their basis are replacing traditional materials of modern microelectronics. Numerical simulation by various methods and approaches is playing an increasingly important role in the study of nanostructures, because it allows the direct study of the properties of well-defined structural compounds. Attention to the study of fullerenes is due to the variety of unique physicochemical phenomena occurring with the participation of fullerenes, and the great prospects for the use of a new class of materials created on their basis.

The purpose of the study. To study of the dynamic processes of interaction of fullerene C_{60} with a graphene sheet, the processes of scattering of atoms (for example, hydrogen atoms) on fullerene - graphene structures.

Scientific novelty of the research is:

the influence of the geometric arrangement of C_{60} fullerene on the process of its adsorption on graphene has been established;

the range of binding energies of C_{60} fullerene with graphene is determined and compared with theoretical and experimental works - 0.06-2.60 eV;

the optimal values of the energy of implantation of the scattered atom (hydrogen) into the interior of the C_{60} fullerene are determined - about 8 eV, the minimum energy values at which such an implantation is possible is about 3 eV;

it was found that the chemisorption of hydrogen atoms by fullerene C_{60} occurs both on the outer surface of fullerene C_{60} (fullerene hydrogenation) and on the inner surface; in some cases, a free hydrogen atom may appear inside the fullerene;

the influence of the angular parameters of scattered atoms (hydrogen) on the chemisorption of these atoms by the structure of fullerene C_{60} - graphene has been established.

Scientific and practical importance of the research results.

The scientific significance of the results lies in the fact that they made it possible to obtain characteristic features of the processes of interaction of a fullerene molecule with a sheet of (nano) graphene, to evaluate the influence of the geometric arrangement of fullerene C_{60} on the process of its adsorption on graphene and the dependence of the binding energy of fullerene-graphene on the site of fullerene localization on graphene.

The results obtained made it possible to analyze the processes of scattering of hydrogen atoms on solitary fullerene - namely, to estimate the threshold energies at which the processes of adsorption and encapsulation of the scattered atoms take place.

The results of studies by methods of mathematical modeling of the processes of interaction of atoms and molecules of fullerene with (nano) graphene can

stimulate and contribute to the development of nanoengineering of new structural materials and modern elements of micro- and nanoelectronics.

Structure and volume of dissertation.

The dissertation consists of an introduction, four chapters, a conclusion and a bibliography including 47 figures and 7 tables. The text of the thesis is presented on 111 pages.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (Часть I, Part I)

1. A. Ulukmuradov, I. Yadgarov, V. Stelmakh, F. Umarov Computer Simulation of Adsorption of Fullerene on Graphene // Journal of Nano- and Electronic Physics , Vol. 13 No 2, 02025(5pp) (2021) №3. **Scopus: IF = 1.0**
2. A. N. Ulukmuradov, I.D. Yadgarov, V.G. Stelmakh. Adsorption of C₆₀ fullerene on defect-free graphene. //Узбекский Физический журнал, №4, 2018, 305-308 бет, Ташкент. [01.00.00, №5]
3. Н.Ю.Тураев, В.Г.Стельмах, И.Д.Ядгаров, А.Н.Улукмурадов. Адсорбция фуллерена C₆₀ на краях нанографена. //ДАН РУз, №3., 2018, Ташкент. [01.00.00, №7]
4. В.Г.Стельмах, И.Д.Ядгаров, А.Н.Улукмурадов, У.Б.Улжаев. Невалентное взаимодействие низших фуллеренов с графеном. Узбекского Физического журнала, № 5, 2019, 280-282 бет, Ташкент. [01.00.00, №5]
5. Ядгаров И.Д., Улукмурадов А.Н., Алябьев Д.В., Стельмах В.Г. Взаимодействие атомов водорода с углеродной структурой «C₆₀ - GRAPHENE» //Сборник материалов международной научно-рецензируемой онлайн конференции ЎЗМУ 28 мая 2020 года. «Тенденции развития современной физики полупроводников: проблемы, достижения и перспективы» 136-140 бет.

II бўлим (Часть II, Part II)

1. М.Ш.Курбанов, И.Д.Ядгаров, В.Г.Стельмах, А.Н.Улукмурадов, У.Б.Улжаев. Процессы адсорбции фуллерена C₆₀ графеном и его краем. VI Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии- ЛАПЛАЗ-2020» Сборник научных трудов Част 1 11-14 февраль 2020г г. Москва
2. А.Н. Улукмурадов, В.Г. Стельмах, И.Д. Ядгаров. Энергия связи фуллерена C₆₀ с графеном. Седьмая международная конференция по физической электронике. Сборник тезисов докладов IPES-7 18-19 мая, 2018 г. 49-бет Ташкент,
3. А.Н.Улукмурадов, И.Д.Ядгаров, В.Г.Стельмах Нековалентное взаимодействие фуллерена с графеном. Сборник тезисов докладов Республиканская конференция по физической электронике и фотонике. 23 октября, 2019., 31-32 бет., Ташкент.
4. А.Н. Улукмурадов, И.Д. Ядгаров, Д.В. Алябьев моделирование процессов взаимодействия атомов водорода с гранями уединенного фуллерена. // VII Международная конференция «Лазерные, Плазменные исследования и технологии» ЛАПЛАЗ-2021. Сборник научных трудов, часть 1. Москва. 23-26 марта 2021

5. Стельмах В.Г, Ядгаров И.Д, Тураев Н.Ю, Улукмурадов А.Н. 60-атомли нуқсонсиз фуллеренда атомларнинг фазовий жойлашувини ва шу фуллерендаги ўзгаришларни куриш учун дастур. //Электрон ҳисоблаш машиналари учун яратилган дастурнинг расмий рўйхатдан ўтказилганлиги тўғрисидаги гувоҳнома DGU 20180146 27.02.2018 йил.

6. Стельмах В.Г, Ядгаров И.Д, Улукмурадов А.Н. 60 атомли деформацияланган фуллерен атомларининг фазовий жойлашувини таҳлил қилиш учун дастур. //Электрон ҳисоблаш машиналари учун яратилган дастурнинг расмий рўйхатдан ўтказилганлиги тўғрисидаги гувоҳнома DGU 06320 18.03.2019 йил.

Автореферат “Til va adabiyot ta’limi” журналі тахририятида тахрирдан
ўтказилди (16.12. 2021 йил).

Босмага рухсат этилди: 16.12. 2021 йил
Бичими 60x84 1/16, “Times New Roman”
гарнитурaда рақамли босма усулида босилди.
Шартли босма табоғи 2,4. Адади: 100. Буюртма: №100
Тел (99) 832 99 79; (97) 815 44 54
Гувоҳнома reestr № 10-3279
“IMPRESS MEDIA” МЧЖ босмаҳонасида чоп этилган.
100031, Тошкент ш. Яккасарой тумани, Кушбеги кўчаси, 6- уй.