

**УРГАНЧ ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ ҲУЗУРИДАГИ ИЛМий  
ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ PhD.03/30.09.2020.FM.55.04 РАҚАМЛИ  
ИЛМий КЕНГАШ**

---

**ФАРҒОНА ПОЛИТЕХНИКА ИНСТИТУТИ**

**ИБРОХИМОВ НОДИРБЕК ИКРОМЖОНОВИЧ**

**ПАСТ ЭНЕРГИЯЛИ КУМУШ, КУМУШ-КОБАЛЪТ  
КЛАСТЕРЛАРИНИНГ МИС ВА КУМУШ СИРТИ БИЛАН ЎЗARO  
ТАЪСИРИ ЖАРАЁНИНИ МОДЕЛЛАШТИРИШ**

**01.04.04 – Физик электроника**

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

**Фарғона – 2022**

**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**

**Иброхимов Нодирбек Икромжонович**

Паст энергияли кумуш, кумуш-кобальт кластерларининг мис ва кумуш сирти билан ўзаро таъсири жараёнини моделлаштириш.....3

**Иброхимов Нодирбек Икромжонович**

Моделирование процессов взаимодействия низкоэнергетических кластеров серебра, серебра-кобальта с поверхностями меди и серебра .....23

**Ibrokhimov Nodirbek Ikromjonovich**

Modeling of interaction processes of low-energy silver, silver-cobalt clusters with copper and silver surfaces.....42

**Эълон қилинган ишлар рўйхати**

Список опубликованных работ

List of published works.....45

**УРГАНЧ ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ ҲУЗУРИДАГИ ИЛМий  
ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ PhD.03/30.09.2020.FM.55.04 РАҚАМЛИ  
ИЛМий КЕНГАШ**

---

**ФАРҒОНА ПОЛИТЕХНИКА ИНСТИТУТИ**

**ИБРОХИМОВ НОДИРБЕК ИКРОМЖОНОВИЧ**

**ПАСТ ЭНЕРГИЯЛИ КУМУШ, КУМУШ-КОБАЛЪТ  
КЛАСТЕРЛАРИНИНГ МИС ВА КУМУШ СИРТИ БИЛАН ЎЗАРО  
ТАЪСИРИ ЖАРАЁНИНИ МОДЕЛЛАШТИРИШ**

**01.04.04. – Физик электроника**

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

**Фарғона – 2022**

**Фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида B2021.4.PhD/FM445 рақам билан рўйхатга олинган.**

Докторлик диссертацияси Фарғона политехника институтида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз(резюме)) Илмий кенгашнинг веб-саҳифасида ([www.fizelektronika.urdu.uz](http://www.fizelektronika.urdu.uz)) ва «Ziynet» Ахборот таълим порталида ([www.ziynet.uz](http://www.ziynet.uz)) жойлаштирилган.

**Илмий раҳбар:** **Ядгаров Ишмунин Джаббарович**  
физика-математика фанлари доктори, катта илмий ходим

**Расмий оппонентлар:** **Ташатов Алланазар Қаршиевич**  
физика-математика фанлари доктори, профессор

**Курбанов Музаффар Кадамбаевич**  
физика-математика фанлари номзоди

**Етакчи ташкилот:** **Тошкент давлат техника университети**

Диссертация ҳимояси Урганч давлат университети ҳузуридаги PhD.03/30.09.2020.FM.55.04 рақамли Илмий кенгашнинг 2022 йил «\_\_\_» \_\_\_\_\_ соат \_\_\_ даги мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 220100, Урганч ш., Ҳ.Олимжон кўчаси, 14-уй. Тел: (99862) 224-66-11; факс: (99862) 224-67-00; e-mail: [fizelektronika.urdu@umail.uz](mailto:fizelektronika.urdu@umail.uz)).

Диссертация билан Урганч давлат университетининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (\_\_\_ рақам билан рўйхатга олинган). (Манзил: 220100, Урганч ш., Ҳ.Олимжон кўчаси, 14-уй. Тел: (99862) 224-66-11; факс: (99862) 224-67-00.)

Диссертация автореферати 2022 йил «\_\_\_» \_\_\_\_\_ куни тарқатилди.  
(2022 йил «\_\_\_» \_\_\_\_\_ даги \_\_\_ рақамли реестр баённомаси).

**У.О. Кутлиев**

Илмий даража берувчи илмий кенгаш раиси физика-математика фанлари доктори

**А.Р. Матназаров**

Илмий даража берувчи илмий кенгаш котиби, физика-математика фанлари номзоди, доцент

**К.А. Исмаилов**

Илмий даража берувчи илмий кенгаш қошидаги илмий семинар раиси, физика-математика фанлари доктори, профессор

## **КИРИШ (фалсафа доктори (PhD) диссертацияси аннотацияси)**

**Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати.** Бугунги кунда дунёда турли ўлчамдаги металл кластерларни яратиш ва кластерлар билан металл кристаллларнинг ўзаро таъсири жараёнларини тадқиқ қилиш масалаларига алоҳида эътибор қаратилмоқда. Ушбу тадқиқотлар илм-фан ва муҳандисликнинг турли соҳалари учун қизиқиш уйғотади. Бу борада, жумладан математик моделлаштириш усуллари экспериментал усуллар билан олинган натижаларни сезиларли даражада тўлдиради ва наноўлчамдаги металл наноструктураларни тадқиқ қилишда тобора муҳим ўрин тутмоқда.

Жаҳонда сўнги йилларда кристаллар сирти металл кластерлар билан бомбардимон қилинганда кристаллар сиртида кратерлар ҳосил бўлиши ва кластерларнинг деформация жараёнларини аниқлаш бўйича илмий тадқиқотлар олиб борилмоқда. Ушбу йўналишда, жумладан турли ўлчамдаги металл кластерларнинг кристалл ичига киритилиши ва кристалл сиртида юпқа плёнкалар ҳосил бўлиши жараёнларини моделлаштириш бўйича тадқиқотлар устувор ҳисобланмоқда. Шу билан бирга кристаллларни кластерлар билан бомбардимон қилиш орқали баъзи металл наноструктураларни олиш ҳам фундаментал, ҳам амалий нуқтаи назардан долзарб вазифалардан ҳисобланмоқда.

Ўзбекистон Республикасида фундаментал ва амалий тадқиқотларнинг истиқболли йўналишларини ривожлантиришга эътибор кучаймоқда, хусусан, янги наноматериаллар яратиш, уларнинг фундаментал физик хусусиятларини тадқиқ этиш ва олинган натижаларни амалиётда қўллашга катта эътибор берилмоқда. Ўзбекистон Республикасини 2017-2021 йилларда янада ривожлантириш стратегиясида «илмий-тадқиқот ва инновацион фаолиятларни рағбатлантириш, илмий-инновацион ютуқларни амалиётга тадбиқ этишнинг самарали механизмларини ишлаб чиқиш»<sup>1</sup> вазифалари белгилаб берилган. Ушбу вазифаларни амалга оширишда, хусусан, металл кластерларининг монокристаллар сирти билан ўзаро таъсири жараёнлари ва кам атомли кластерларни чўктириш орқали эса кристаллар юзасида наноплёнкалар ҳосил бўлиш механизмларини аниқлаш муҳим ҳисобланади.

Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2022 йил 28 январдаги ПФ-60-сон «2022-2026 йилларга мўлжалланган Янги Ўзбекистоннинг тараққиёт стратегияси тўғрисида»ги Фармони, 2020 йил 10 июлдаги ПҚ-4779-сон «Иқтисодиётнинг энергия самарадорлигини ошириш ва мавжуд ресурсларни жалб этиш орқали иқтисодиёт тармоқларининг ёқилғи-энергетика маҳсулотларига қарамлигини камайтиришга доир қўшимча чора-тадбирлар тўғрисида»ги Қарорлари ҳамда мазкур фаолиятга тегишли бошқа меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга ушбу диссертация тадқиқоти муайян даражада хизмат қилади.

1. 2017-2021-йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналиши бўйича Ҳаракатлар стратегияси // Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017-йил 7-февралдаги ПФ-4947-сон Фармонида 1-илова, 3.2-б.

**Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги.** Диссертация иши бўйича тадқиқотлар республика фан ва технологиялар ривожланишининг II «Физика, астрономия, энергетика ва машинасозлик» номли устувор йўналишига мувофиқ амалга оширилган.

**Муаммони ўрганганлик даражаси.** Бу соҳада турли хорижий илмий марказларда бир қатор муҳим илмий тадқиқотлар, жумладан, металл кластерлари ва уларнинг кристаллар билан ўзаро таъсирини ўрганиш учун математик моделлаштириш усулларидан фойдаланган ҳолда тадқиқотлар олиб борилган. Бу борадаги энг муҳим натижаларга олишга катта хисса қўшган хорижий олимлар, жумладан В.Н. Шульга, Л.В. Редель, Ю.Я. Гафнер, Francesca Valetto, Mehmet Karabacak, P.L. Williams, Y. Mishin ва бошқалар.

Атомлар ва кластерларнинг монокристаллар сирти билан ўзаро таъсирлашиш жараёнини моделлаштиришга Ўзбекистоннинг таниқли олимларининг илмий ишлари бағишланган. Булардан: А.А. Джурахалов, А.М. Расулов, У.О. Кутлиев ва И.Д. Ядгаровлар. Олиб борилган илмий тадқиқотлар натижасида металл кристаллар сиртида атомлар ва кластерларнинг сочилиш ва чангланиш механизмларини аниқлашда салмоқли натижаларга эришилди.

Шу билан бирга, кластерлар ҳосил қилиниши ва металл кластерларнинг кристаллар сирти билан ўзаро таъсири натижасида плёнкаларнинг ҳосил бўлиши жараёни етарли даражада ўрганилмаган.

**Диссертация тадқиқотининг диссертация бажарилган олий таълим ёки илмий-тадқиқот муассасасининг илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги.** Диссертация тадқиқоти Ион-плазма ва лазер технологиялари институтининг илмий тадқиқот ишлари режасига мувофиқ № ОТ-Ф2-46 “Углеродли нанотрубкалар ва фуллеренлар билан атом зарралари, электронлар ва фотонларнинг ўзаро таъсири жараёнини назарий тадқиқ этиш” (2017-2020) лойиҳаси доирасида бажарилган.

**Тадқиқотнинг мақсади** металл кристаллар сиртига кластерларнинг чўкишида наноструктуралар ҳосил бўлиши ва кам атомли металл кластерларнинг барқарор конфигурацияларини энергияни минималлаштириш усули асосида ўрганишдан иборат.

**Тадқиқотнинг вазифалари:**

мис, кумуш, кобальт кластерларининг барқарор тузилмалари ва конфигурацияларини ҳосил қилиш;

аралаш  $Cu_mCo_n$  кластерларининг барқарор тузилмалари ва конфигурацияларини яратиш;

мис ва кумуш кристаллари мисолида металл кристаллари юзасида баъзи кам атомли кластерлар (кумуш, кумуш-кобальт кластерлар) чўкиши пайтида металл кристаллари юзасидаги ўзгаришларни таҳлил қилиш;

$Ag_mCo_n$  мисолида кумуш кристалл юзасига катта ҳажмли кластерларни чўктириш жараёнида юпқа қатламли тузилмалар ҳосил бўлишини ўрганиш (битта кластердаги умумий атомлар сони 3000 тагача).

**Тадқиқотнинг объектлари** сифатида мис, кумуш, кобальт металл кластерларининг ҳамда мис ва кумуш кристалларининг компьютер моделлари олинган.

**Тадқиқотнинг предмети**ни атомларнинг координаталари, тезлиги, атомлараро ўзаро таъсир энергиялари ва металл кластерларининг боғланиш энергиялари ташкил этади.

**Тадқиқотнинг усуллари.** Тадқиқот жараёнида энергияни минималлаштириш усули, ЕАМ ва МЕАМ потенциалларидан фойдаланган ҳолда молекуляр динамика (МД) усулларида фойдаланилган.

**Тадқиқотнинг илмий янгилиги** қуйидагилардан иборат:

кам атомли кластерлар ( $Ag_n$ ,  $Cu_n$ ,  $Co_n$ ) нинг барқарор тузилмалари ва конфигурациялари, шунингдек улардаги ҳар бир атом учун боғланиш энергиялари, боғланиш энергиясининг атомлар сонига боғлиқлиги аниқланган;

мис, кумуш, кобальт кластер ( $Cu_n$ ,  $Ag_n$  ва  $Co_n$ ,  $n=3-60$ ) лари ва аралаш ( $Cu_nCo_1$   $n=2-9$  ва  $Cu_nCo_2$   $n=2-8$ ) кластерлар атомлари орасидаги боғ узунликлари аниқланди;

мис кристаллари юзасига майда кумуш кластерларнинг чўкишида, кластернинг баъзи атомлари сирт қатламлари орасига кириши, кичик кластерлар сезиларли даражада деформацияланиши ва кластер энергиясининг ортиши билан унинг кристалл ичига кириб бориш чуқурлиги ортиши аниқланди;

мис кристаллари юзасига кичик кластерларни чўктириш жараёнида кластер атомлари кристалл ичига кириб бориши, кириб бориш чуқурлиги энергияга ҳамда уларнинг ҳажмига боғлиқлиги аниқланди.

**Тадқиқотнинг амалий натижалари** қуйидагилардан иборат:

металл кластерлари ва кристалларининг геометрик моделлари ишлаб чиқилган;

мис монокристалли сиртига тушаётган кумуш кластерлари энергиясининг ортиб бориши билан уларнинг кристалл ичига чуқурроқ кириб бориши аниқланган;

паст энергияли метал кластерлар кристалл сиртига туширилганда уларнинг сезиларли деформацияга ўчраши аниқланган.

**Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги** металлларда ўзаро таъсирлар учун умумий қабул қилинган ЕАМ ва МЕАМ потенциалларидан фойдаланиш билан асосланади, уларнинг аниқлиги кўплаб муаллифлар томонидан қиёсий ҳисоблар билан тасдиқланган. Олинган натижалар синчковлик билан амалга оширилган ҳисоб-китобларга ва мумкин бўлган хатоларни тўғри кўриб чиқиш билан изоҳланади.

**Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.** Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти турли ўлчамдаги кластерларнинг металл сирти билан ўзаро таъсири жараёнларининг характерли хусусиятларини очиқ бериш билан изоҳланади.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти кластерларнинг металл монокристаллар билан ўзаро таъсири жараёнларини математик

моделлаштиришда олинган натижалар наноинженериядаги янги конструкцион материалларни ва микро ва наноэлектрониканинг замонавий элементларини рағбатлантиришга ва ривожлантиришга хисса қўшиши билан изоҳланади.

**Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши.** Паст энергияли кумуш, кумуш-кобальт кластерларининг мис ва кумуш сиртлари билан ўзаро таъсир жараёнларини моделлаштириш бўйича олинган илмий натижалар асосида:

кумуш кластерларининг мис кристали сиртига чўкиши жараёнида, кластер атомларининг кристал ичига кириши, кластер ўлчамлари ва энергиясига боғлиқлигини ва мис кристали сиртига кумуш кластерлари чўктирилганда кластерлар ўлчамларининг ўзгариши яъни деформацияга учрашини аниқлаш №ОТ-Атех-2018-503 рақамли “Si, Ni сирти қатламлари ва уларнинг оксидлари электрон тузилишлари, эмиссия ва оптик хусусиятларини ион бомардимони билан ўзгартириш” лойиҳасида фойдаланилган (Маълумотнома № 01/9-14-1108, Тошкент давлат техника университети 2022-йил 11-апрель). Илмий натижадан фойдаланиш наноўлчамли тизимлар хоссаларини баҳолаш ва физикавий фундаментал қонуниятларни ўзлаштириш имконини берган;

мис, кумуш ва кобальт атомларидан ташкил топган кам атомли кластерларнинг аниқланган барқарор тузилмалари ва конфигурациялари №ОТ-Ф2-51 рақамли “Фуллеренлар ва уларнинг ҳосилалари асосида оптоэлектроника ва қуёш энергетикаси учун янги функционал наноматериаллар синтез қилишнинг фундаментал асослари” лойиҳасида фойдаланилган (Маълумотнома № 2/1255-670, Ўзбекистон Республикаси Фанлар Академияси 2022-йил 25-март). Илмий натижадан фойдаланиш силлик тагликлар сиртида наноўлчамли углеродли гетероструктураларнинг шаклланишидаги молекулалараро таъсирларни баҳолаш ва кластерларнинг сиртларда жойлашишини аниқлаш имконини берган.

**Тадқиқот натижаларининг апробацияси.** Диссертация иши натижалари 5 та халқаро ва 1 та республика конференцияларида маъруза қилинган ва муҳокамадан ўтган.

**Тадқиқот натижаларининг эълон қилинганлиги.** Диссертация мавзуси бўйича олинган илмий натижалар 9 та илмий ишларда баён қилинган бўлиб, улардан 4 таси илмий мақола, шу жумладан 2 та чет эл ва 2 та мақола Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссияси томонидан докторлик диссертациясининг асосий илмий натижаларини чоп этиш учун тавсия этилган илмий журналларда чоп этилган ва 3 та ЭҲМ учун дастурга гувоҳнома олинган.

**Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми.** Диссертация кириш, тўрт боб, хулоса ва фойдаланилган адабиётлар рўйхатидан, жумладан 57 та расм ва 5 та жадвалдан иборат. Диссертация ҳажми 112 бетни ташкил этади.

## ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

**Кириш** қисмида диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати асосланган, тадқиқотнинг мақсад ва вазибалари шакллантирилган, объекти ва предмети аниқланган, тадқиқотнинг Ўзбекистон Республикасида фан технологияларни ривожлантиришнинг устувор йўналишларига 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 тўғрисида маълумотлар келтирилган.

**Диссертациянинг биринчи бобида** металл кристаллари юзаси билан кластерларнинг ўзаро таъсир доиралари ҳолати, кластер иони қаттиқ сиртга урилганда, кластер ва таглик атомлари ўртасида юқори зичликдаги атом тўқнашуви содир бўлиши ҳақида умумий маълумот берилган. Ушбу кўп тўқнашув механизми мономерик ионлардан фарқ қиладиган ҳодисаларни келтириб чиқаради. Ag мономерлари ва бир неча минглаб атомларгача бўлган ўлчамдаги Ag кластерининг Si(001) сирти билан таъсирлашуви МД усули билан моделлаштирилган. Кириб бориш, деформациянинг шаклланиши ва сочилиш жараёнлари кўриб чиқилган ва кластер ионларининг чизиқли бўлмаган тўқнашув жараёнлари ҳам муҳокама қилинган.

Кластерлар бир ҳил бўлиши мумкин, яъни фақат битта турдаги атомлар ёки молекулалардан иборат ёки гетероген бўлиши мумкин. Улар нейтрал ёки зарядланган бўлиши мумкин. Уларни ҳар хил турдаги кучлар ушлаб туриши мумкин: карама-қарши зарядланган ионлар орасидаги кучли тортишиш (NaCl кластерларида бўлгани каби), ван дер Ваальс тортишиш (He ва Ar кластерларида бўлгани каби), ковалент кимёвий боғланишлар (Si кластерларида бўлгани каби) ёки металл боғланиш (Na и Cu кластерларида бўлгани каби).

**Диссертациянинг иккинчи бобида** фойдаланилган моделлаштириш усуллари тавсифланган, шунингдек, ўрганилаётган объектларнинг муҳим хусусиятлари келтирилган.

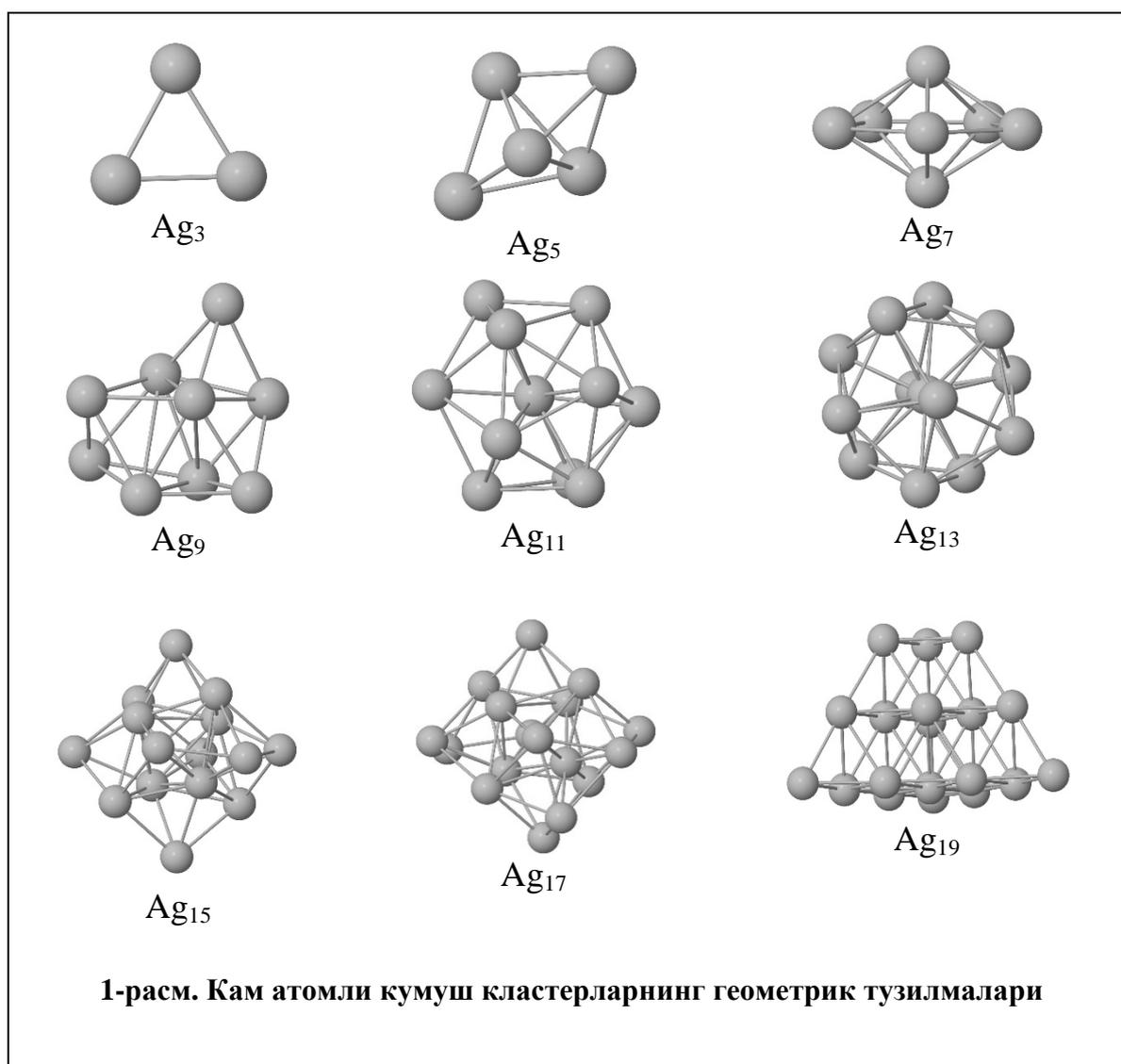
Молекуляр динамика (МД) усуллари фанда ҳам, муҳандисликда ҳам кенг кўламда қўлланилади, чунки улардан оддий газлар ва суюқликлардан тортиб мураккаб материалларгача бўлган молекуляр даражадаги (нано ўлчамдаги) жараёнларни моделлаштириш учун фойдаланиш мумкин. Классик МД симуляциясида тизим Ньютоннинг ҳаракат тенгламалари билан тавсифланади, бу ерда атом асосий заррача ҳисобланади.

**Диссертациянинг учинчи бобида** кам атомли кумуш, мис, кобальт ва аралаш типли мис-кобальт металл кластерларини моделлаштириш натижалари ҳамда бу кластерлардаги атомларнинг геометрик жойлашуви ва конфигурациялари келтирилган. Модел экспериментлар асосан LAMMPS дастурий пакетидан фойдаланган ҳолда амалга оширилди.

Кичик кумуш кластерлар ( $Ag_n$ ,  $n = 3-60$ ) ЕАМ потенциалидан фойдаланган ҳолда МД усуллари асосида моделлаштирилган. Биринчи

навбатда, геометрик тузилмалар аниқланди, ушбу кластерларнинг мувозанат конфигурациялари 0 К ҳароратда қурилди. Бу жараён энергияларни минималлаштириш усули асосида амалга оширилди, сўнгра кластерлар 300 К ҳароратга қадар қиздирилди.

1-расмда кам атомли кумуш кластерларининг геометрик тузилмалари кўрсатилган. Бу расмлардаги шарчалар кумуш атомларини, баъзи ҳолларда кластерларнинг тузилишини яхшироқ идрок етиш учун турли хил кулранг рангларда тасвирлайди, шарлар орасидаги кулранг чизиқлар атомлар орасидаги ўзаро таъсирни кўрсатади.  $Ag_3$  кластери тенг томонли учбурчак шаклига эга.  $Ag_5$  кластери бешта атомдан иборат бўлиб, кластернинг 3 та атоми бир текисликда жойлашган оддий учбурчакни ҳосил қилади, қолган иккита атом эса бу учбурчак марказидан юқорида ва пастда симметрик тарзда жойлашган.  $Ag_7$  кластери етти атомдан иборат бўлиб, кластернинг 5 та атоми бир текисликда оддий бешбурчак ҳосил қилади, қолган иккита атом эса ушбу бешбурчак марказининг тепасида ва остида симметрик тарзда жойлашган.  $Ag_9$  дан  $Ag_{19}$  гача бўлган кластерларда улардаги атомлар сони ортиши билан сферик шаклга эга бўлади.



Кластер атомлари орасидаги боғланиш масофалари яъни, боғ узунликлари  $Jmol$  дастури орқали аниқланди. Бунга кўра,  $Ag_3$  кластерида  $Ag-Ag$  боғланиш масофалари  $2,77\text{\AA}$ .  $Ag_5$  кластерида  $2,75\text{\AA}$  ва  $2,78\text{\AA}$ .  $Ag_7$  кластерида бу масофалар  $2,72\text{\AA}$ ,  $2,75\text{\AA}$  ва  $2,82\text{\AA}$ .  $Ag_9$  кластерида  $2,48\text{\AA} \div 3,11\text{\AA}$ .  $Ag_{11}$  кластерида бу масофалар  $2,69\text{\AA} \div 2,85\text{\AA}$  ни ташкил қилади.  $Ag_{13}$  кластерида  $2,67\text{\AA}$  ва  $2,81\text{\AA}$ .  $Ag_{15}$  кластерида  $2,67\text{\AA} \div 2,88\text{\AA}$ .  $Ag_{17}$  кластерида  $2,65\text{\AA} \div 2,89\text{\AA}$ .  $Ag_{19}$  кластерида  $2,75\text{\AA} \div 2,79\text{\AA}$ .

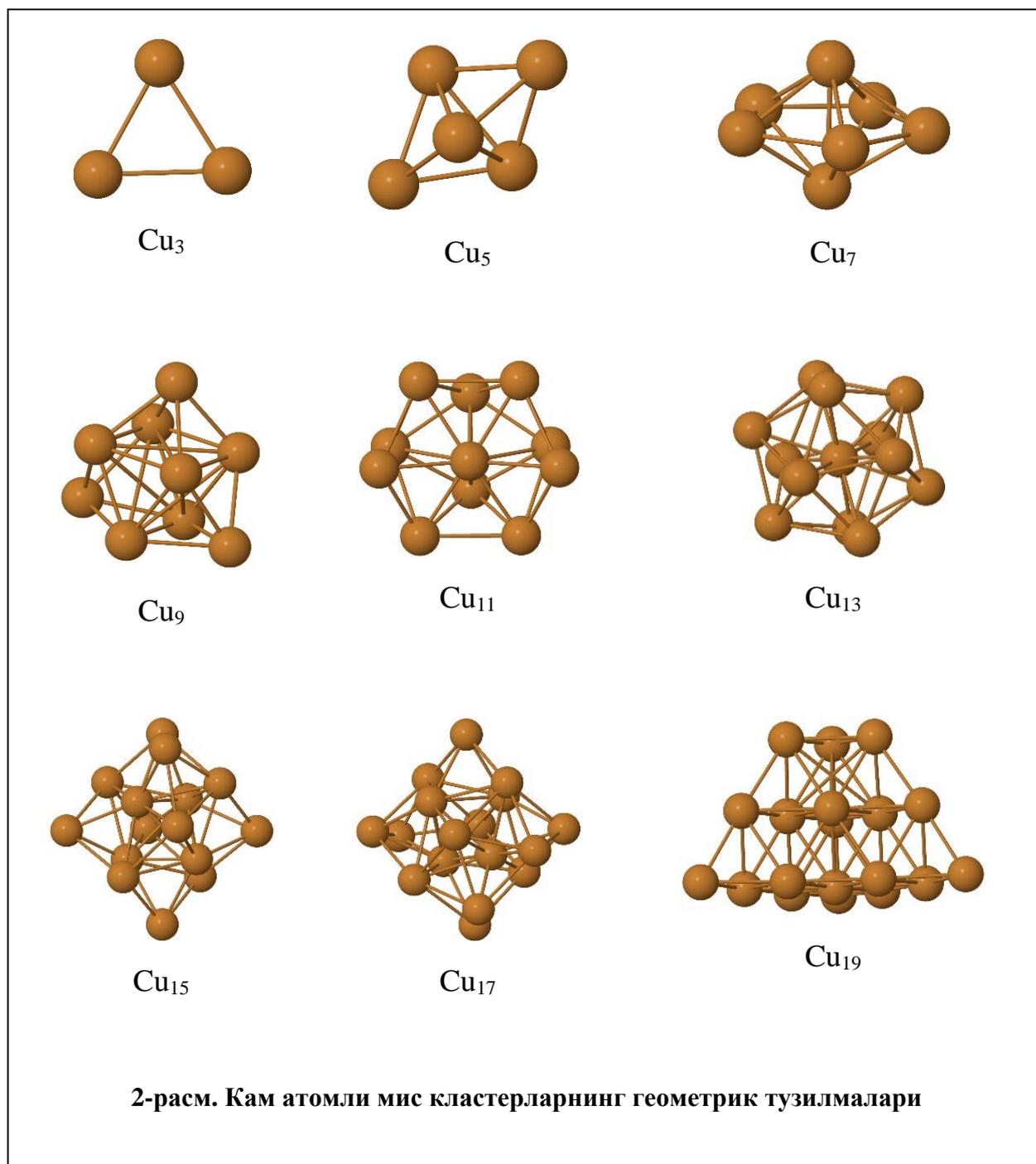
25 дан ортиқ атомли кумуш кластерларнинг тузилиши идеал шарсимон шаклга яқинроқдир.  $Ag_{25}$  кластерида  $Ag-Ag$  боғланиш масофалари  $2,51\text{\AA} \div 2,94\text{\AA}$  ни ташкил қилади.  $Ag_{30}$  кластерида  $2,45\text{\AA} \div 3\text{\AA}$ .  $Ag_{35}$  кластерида бу масофалар  $2,54\text{\AA} \div 3\text{\AA}$  ни ташкил қилади.  $Ag_{40}$  кластерида  $2,61\text{\AA} \div 2,88\text{\AA}$ .  $Ag_{45}$  кластерида  $2,65\text{\AA} \div 2,89\text{\AA}$ .  $Ag_{50}$  кластерида  $2,63\text{\AA} \div 2,9\text{\AA}$ .  $Ag_{55}$  кластерида  $2,64\text{\AA} \div 2,84\text{\AA}$ .  $Ag_{60}$  кластерида  $2,7\text{\AA} \div 2,85\text{\AA}$ .

Кам атомли металл мис кластерлари ( $Cu_n$ ,  $n = 3-60$ ) ЕАМ потенциалидан фойдаланган ҳолда МД усулларига асосланган  $Jmol$  дастури ёрдамида моделлаштирилган.

2-расмда кам атомли мис кластерларининг геометрик тузилмалари кўрсатилган. Бу расмлардаги шарчалар мис атомларини ифодалайди, шарлар орасидаги жигарранг чизиқлар атомлар орасидаги ўзаро таъсирни кўрсатади.  $Cu_3$  кластери тенг томонли учбурчак шаклига эга.  $Cu_5$  кластери бешта атомдан иборат бўлиб, кластернинг 3 та атоми бир текисликда жойлашган оддий учбурчакни ҳосил қилади, қолган иккита атом эса бу учбурчак марказидан юқорида ва пастда симметрик тарзда жойлашган.  $Cu_7$  кластери етти атомдан иборат бўлиб, кластернинг 5 та атоми бир текисликда оддий бешбурчак ҳосил қилади, қолган иккита атом эса ушбу бешбурчак марказининг тепасида ва остида симметрик тарзда жойлашган.  $Cu_9$  дан  $Cu_{19}$  гача бўлган кластерларда улардаги атомлар сони ортиши билан сферик шаклга эга бўлади.

$Cu_3$  кластерида  $Cu-Cu$  боғланиш масофалари  $2,6\text{\AA}$  га тенг.  $Cu_5$  кластерида  $2,6\text{\AA}$ .  $Cu_7$  кластерида бу масофалар  $2,62\text{\AA}$  ва  $2,59\text{\AA}$ .  $Cu_9$  кластерида  $2\text{\AA} \div 3,04\text{\AA}$ .  $Cu_{11}$  кластерида бу масофалар  $2,53\text{\AA} \div 2,67\text{\AA}$  ни ташкил қилади.  $Cu_{13}$  кластерида  $2,51\text{\AA}$  ва  $2,64\text{\AA}$ .  $Cu_{15}$  кластерида  $2,52\text{\AA} \div 2,67\text{\AA}$ .  $Cu_{17}$  кластерида  $2,47\text{\AA} \div 2,69\text{\AA}$ .  $Cu_{19}$  кластерида  $2,33\text{\AA} \div 2,64\text{\AA}$ .

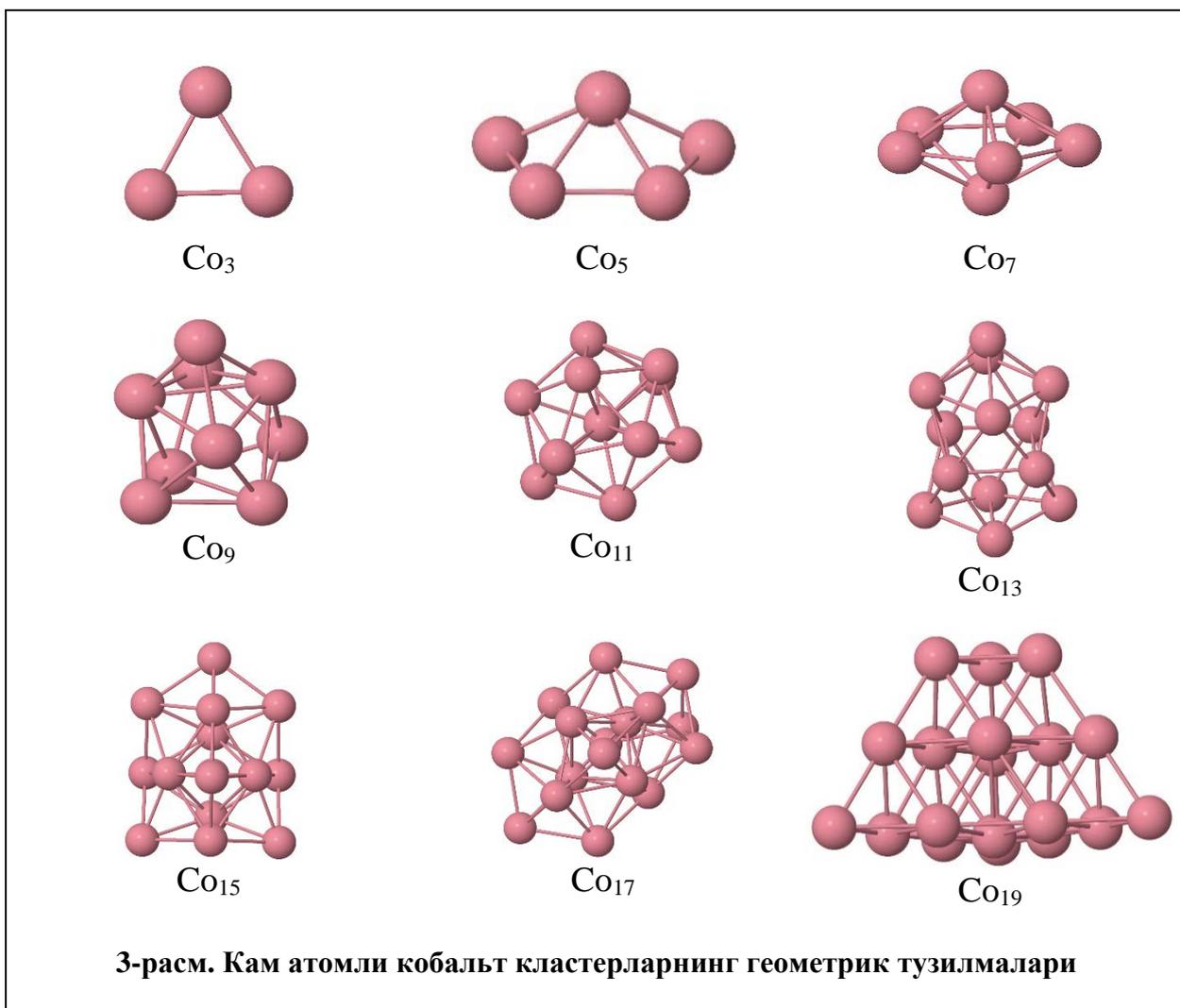
25 дан ортиқ атомли мис кластерларининг тузилиши идеал шарсимон шаклга яқинроқдир.  $Cu_{25}$  кластерида  $Cu-Cu$  боғланиш масофалари  $2,01\text{\AA} \div 3,12\text{\AA}$  ни ташкил қилади.  $Cu_{30}$  кластерида  $2,35\text{\AA} \div 2,92\text{\AA}$ .  $Cu_{35}$  кластерида бу масофалар  $2,34\text{\AA} \div 2,83\text{\AA}$  ни ташкил қилади.  $Cu_{40}$  кластерида  $2,3\text{\AA} \div 3,02\text{\AA}$ .  $Cu_{45}$  кластерида  $2,34\text{\AA} \div 2,98\text{\AA}$ .  $Cu_{50}$  кластерида  $2,37\text{\AA} \div 3,01\text{\AA}$ .  $Cu_{55}$  кластерида  $2,47\text{\AA} \div 2,67\text{\AA}$ .  $Cu_{60}$  кластерида  $2,18\text{\AA} \div 2,69\text{\AA}$ .



Кам атомли металл кобальт кластерлари ( $Co_n$ ,  $n = 3-60$ ) ЕАМ потенциалидан фойдаланган ҳолда МД усулларига асосланган Jmol дастури ёрдамида моделлаштирилган.

3-расмда кам атомли кобальт кластерларининг геометрик тузилмалари кўрсатилган. Бу расмлардаги шарчалар кобальт атомларини ифодалайди, шарларни бирлаштирувчи чизиклар эса атомларнинг ўзаро таъсирни кўрсатади.  $Co_3$  кластери тенг томонли учбурчак шаклига эга  $Co_5$  кластери бешта атомдан иборат бўлиб, тўртта атоми бир текисликда оддий трапеция шаклини ҳосил қилади, қолган бир атом эса бу трапециянинг юқори марказида

жойлашган.  $Co_7$  кластери етти атомдан иборат бўлиб, кластернинг 5 та атоми бир текисликда оддий бешбурчак ҳосил қилади, қолган иккита атом эса бу бешбурчак марказидан юқорида ва пастда симметрик тарзда жойлашади.  $Co_9$  дан  $Co_{19}$  гача бўлган кластерлар атомлар сони ортиб бориши билан шарсимон бўлиб қолади. 25 дан ортиқ атомли кобальт кластерларининг тузилиши идеал шарсимон шаклга яқинроқдир.

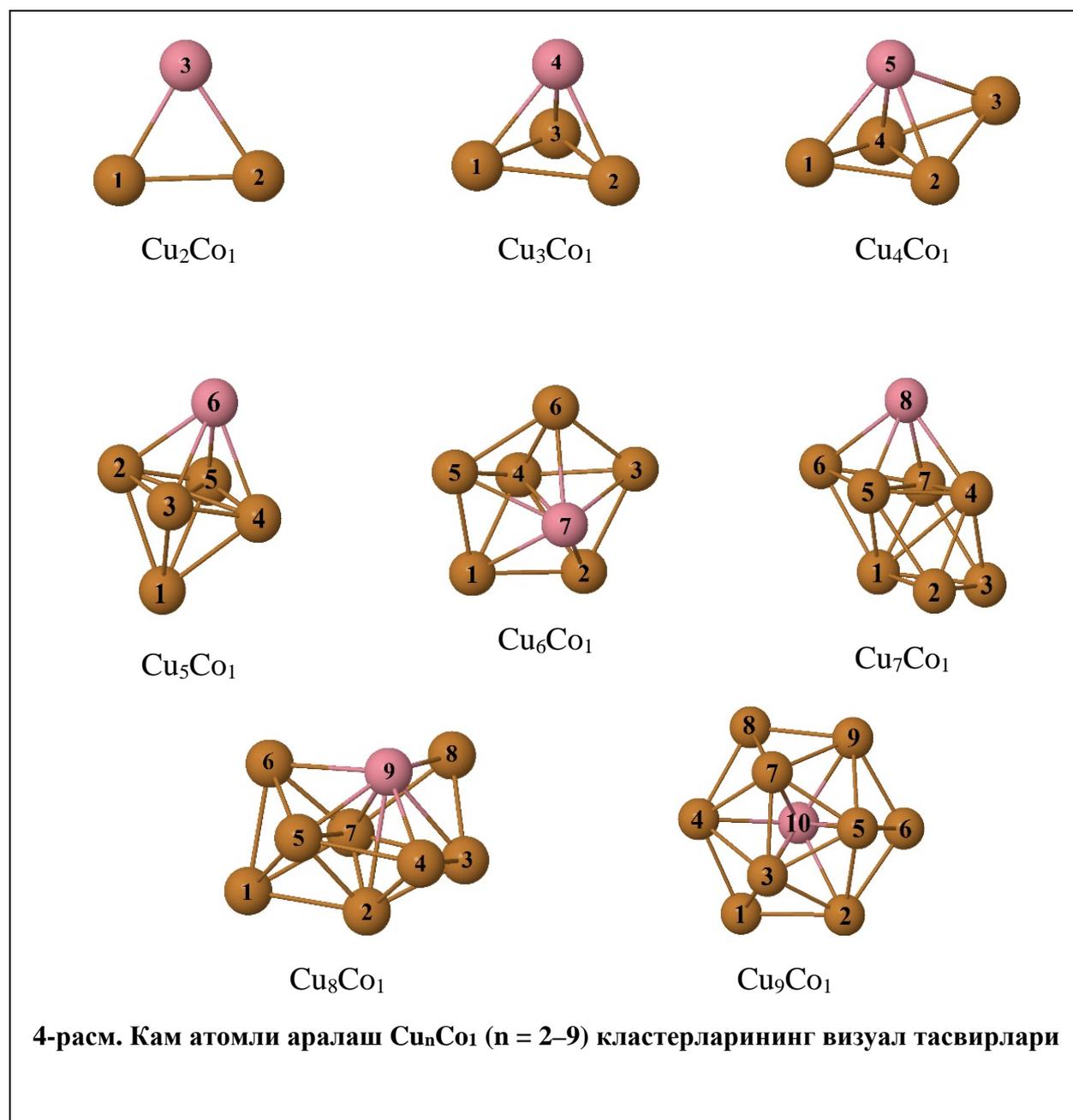


$Co_3$  кластеридаги  $Co-Co$  боғланиш масофалари  $2,48\text{\AA}$ .  $Co_5$  кластерида  $2,45\text{\AA}$ ,  $2,47\text{\AA}$ ,  $2,49\text{\AA}$  ва  $2,52\text{\AA}$ .  $Co_7$  кластеридаги бу масофалар  $2,4\text{\AA}$ ,  $2,48\text{\AA}$  ва  $2,83\text{\AA}$ .  $Co_9$  кластерида  $2,33\text{\AA} \div 2,75\text{\AA}$ .  $Co_{11}$  кластерида бу масофалар  $2,21\text{\AA} \div 2,73\text{\AA}$  ни ташкил қилади.  $Co_{13}$  кластерида  $2,36\text{\AA}$  ва  $2,77\text{\AA}$ .  $Co_{15}$  кластерида  $2,22\text{\AA} \div 2,7\text{\AA}$ .  $Co_{17}$  кластерида  $2,32\text{\AA} \div 2,7\text{\AA}$ .  $Co_{19}$  кластерида  $2,32\text{\AA} \div 2,77\text{\AA}$ .

25 дан ортиқ атомли кумуш кластерларнинг тузилиши идеал шарсимон шаклга яқинроқдир.  $Co_{25}$  кластерида  $Co-Co$  боғланиш масофалари  $2,24\text{\AA} \div 2,66\text{\AA}$  ни ташкил қилади.  $Co_{30}$  кластерида  $2,25\text{\AA} \div 2,72\text{\AA}$ .  $Co_{35}$  кластерида бу масофалар  $2,24\text{\AA} \div 2,66\text{\AA}$  ни ташкил қилади.  $Co_{40}$  кластерида  $2,26\text{\AA} \div 2,67\text{\AA}$ .  $Co_{45}$  кластерида  $2,28\text{\AA} \div 2,73\text{\AA}$ .  $Co_{50}$  кластерида  $2,3\text{\AA} \div 2,73\text{\AA}$ .  $Co_{55}$  кластерида  $2,28\text{\AA} \div 2,73\text{\AA}$ .  $Co_{60}$  кластерида  $2,31\text{\AA} \div 2,75\text{\AA}$ .

Юқоридаги ҳисоблашлар натижасига кўра кумуш, мис ва кобальт кластерлари атомлари орасидаги боғ узунликлари уларнинг ўлчамига ва конфигурацияларига боғлиқ эканлиги аниқланди. Кластерлардаги боғ узунликларининг турлича бўлиши кластерларнинг энергетик хусусиятлари ўзгаришига олиб келади.

4-расмда баъзи кам атомли аралаш  $\text{Cu}_n\text{Co}_1$  ( $n = 2-9$ ) кластерларининг визуал тасвирлари кўрсатилган.



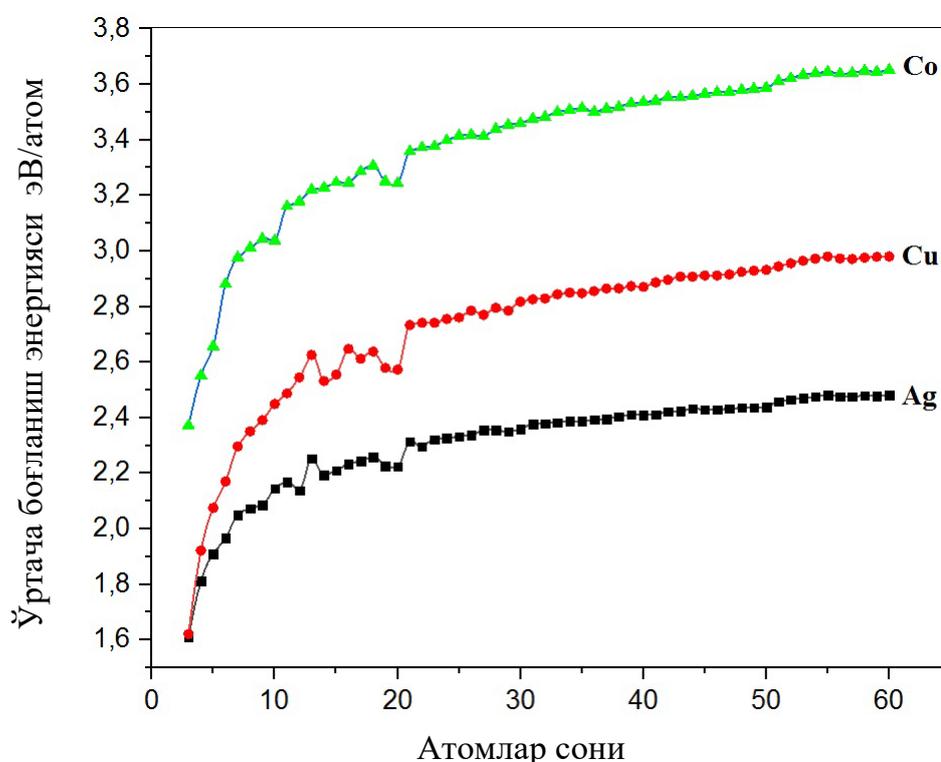
Ўлчамлари турлича бўлган аралаш типдаги кластерларнинг атомлари орасидаги боғ узунликлари 1-жадвалда келтирилган.

**Кам атомли аралаш типдаги кластерлар  $Cu_nCo_1$  ( $n=2-9$ ) нинг боғ узунликлари**

№	Кластерлар	Боғ узунлиги $r$ , $\text{Å}$
1	$Cu_2Co_1$	$r_{12}=2,65, r_{13}=r_{23}=2,53$
2	$Cu_3Co_1$	$r_{12}=r_{13}=r_{23}=2,65, r_{14}=r_{24}=r_{34}=2,51$
3	$Cu_4Co_1$	$r_{24}=2,7, r_{25}=r_{45}=2,53, r_{12}=r_{14}=r_{15}=r_{23}=r_{34}=r_{35}=2,57$
4	$Cu_5Co_1$	$r_{24}=r_{35}=3,15, r_{12}=r_{13}=r_{14}=r_{15}=2,62, r_{26}=r_{36}=r_{46}=r_{56}=2,52$
5	$Cu_6Co_1$	$r_{47}=2,67, r_{17}=r_{27}=r_{37}=r_{57}=r_{67}=2,59,$ $r_{12}=r_{15}=r_{23}=r_{36}=r_{56}=2,56, r_{14}=r_{24}=r_{34}=r_{45}=r_{46}=2,53$
6	$Cu_7Co_1$	$r_{57}=3, r_{14}=2,96, r_{23}=2,73, r_{16}=2,71, r_{25}=r_{37}=2,7$ $r_{68}=2,64, r_{48}=2,61, r_{12}=r_{13}=r_{24}=r_{34}=2,5, r_{56}=r_{67}=2,48$ $r_{58}=r_{78}=2,45, r_{15}=r_{17}=2,44, r_{45}=r_{47}=2,43$
7	$Cu_8Co_1$	$r_{29}=3,24, r_{57}=3,11, r_{24}=r_{78}=2,47, r_{17}=r_{27}=2,45$ $r_{16}=r_{23}=2,44, r_{25}=r_{38}=r_{39}=2,43, r_{12}=r_{79}=2,42$ $r_{15}=r_{89}=2,41, r_{67}=r_{37}=2,4, r_{56}=2,39, r_{45}=r_{49}=r_{69}=2,38$ $r_{34}=2,36$
8	$Cu_9Co_1$	$r_{310}=r_{510}=r_{710}=2,72, r_{12}=r_{14}=r_{26}=r_{48}=r_{69}=r_{89}=2,62$ $r_{210}=r_{410}=r_{910}=2,58, r_{110}=r_{610}=r_{810}=2,55$ $r_{23}=r_{25}=r_{34}=r_{47}=r_{59}=r_{79}=2,53, r_{13}=r_{56}=r_{78}=2,51$ $r_{35}=r_{37}=r_{57}=2,45$

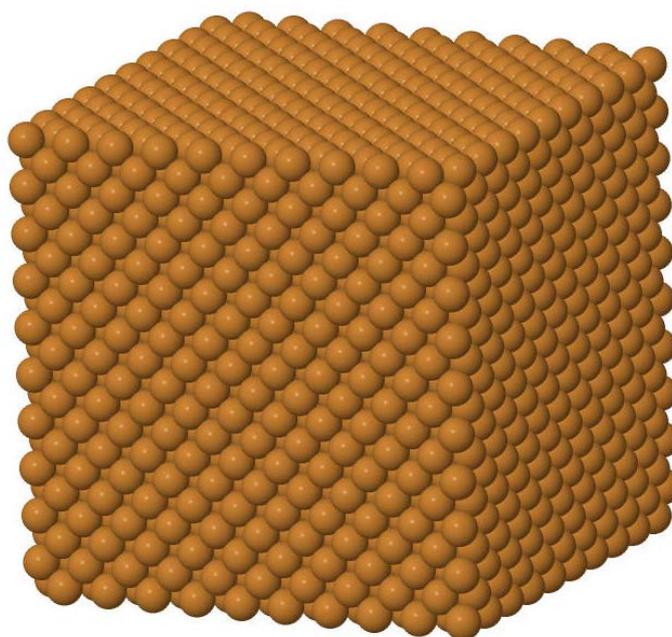
5-расмда кластерларнинг катталигига (улардаги атомлар сонига) қараб ўртача боғланиш энергиясининг (кластернинг атомига) атомлар сонига боғлиқлиги графиклари берилган. Графиклар шуни кўрсатадики, кластерлар

қанча катта бўлса, улардаги атомларнинг ўртача боғланиш энергиясининг қиймати шунча катта бўлади. Ушбу жараёнда кластерларнинг ўсишида ўртача боғланиш энергияси қийматиغا сирт атомлари "ҳиссаси" нинг пасайиши билан кузатилган.

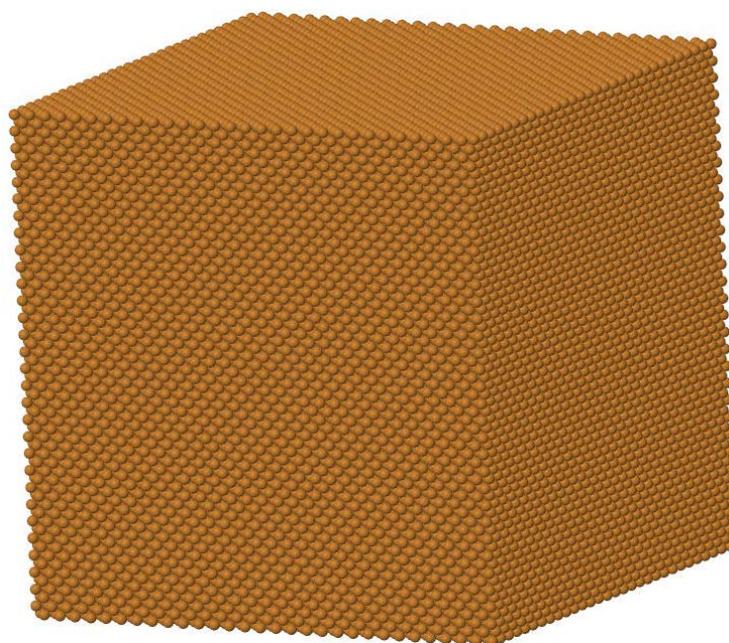


5-расм. Кластер ўртача боғланиш энергиясининг кластердаги атомлар сонига боғлиқлиги

LAMMPS дастурий пакетидаги EAM потенциалидан фойдаланиб, МД усуллари асосида  $T = 0$  К ҳароратда 4000 ва 108000 атомдан иборат бўлган мис монокристалларининг моделлари яратилди. Ҳар бир симуляцияда, дастлабки конфигурация яратилгандан сўнг, ҳар 10000 қадамда минималлаштирилди. Симуляция босқичлари изотермик изобарик (NPT) шароитларда бажарилди ва даврий чегара шартлари тўртбурчак симуляция блокининг барча йўналишларига қўлланилди. Биз молекуляр динамикани симуляция қилиш жараёнини 0,0001 пс вақт қадами билан бажардик. Симуляция жараёни 150 пс давом этди ва босим Берендсен баростати ёрдамида 1 барда ушлаб турилди. Берендсен термостати ёрдамида эриш ҳарорати ва эритувчи ҳарорати мустақил равишда ўрнатилганда, ҳарорат 1 пс учун 300 К да сақланади. Ушбу моделлар 6 ва 7-расмларда кўрсатилган.



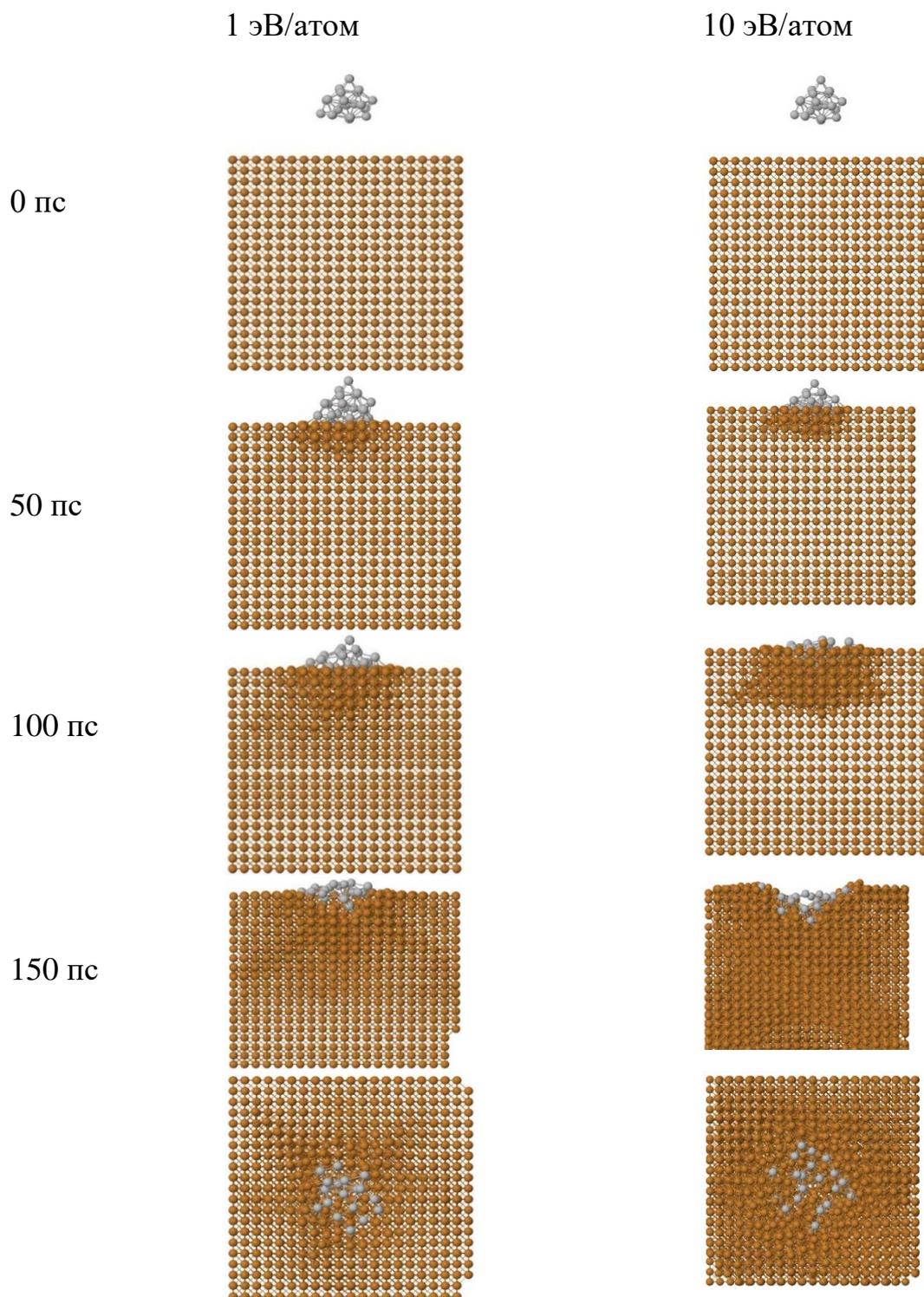
6-расм. 4000 атомдан иборат Cu (100) кристалл модели



7-расм. 108000 атомдан иборат Cu (100) кристалл модели

**Тўртинчи бобда** кумуш кристалл юзасида кам энергияли кластерларнинг чўкиши жараёнида юпқа қатламларнинг шаклланиши кўриб чиқилди. МД усулига асосланган компьютер симуляцияси ёрдамида мис кристаллининг юзасига кичик кумуш кластерлари чўктирилди. Ушбу ишда кластер ва сирт атомлари ўртасидаги ўзаро таъсир жараёнларини ҳисоблаш учун ЕАМ потенциали ишлатилган. Моделлаштиришнинг биринчи босқичида  $Ag_n$  ( $n = 3-20$ ) металл кластерларининг мувозанат конфигурацияси топилди. Моделлаштиришнинг иккинчи босқичида Cu(001) кристаллининг моделлари қурилган. Симуляциянинг учинчи босқичида турли хил энергияга эга кумуш кластерлар (1 эВ/атом ва 10 эВ/атом) мис кристаллининг юзасига вертикал равишда чўктирилди. 8-расмдан кўриниб турибдики, чўкиш натижасида

кластер атомларининг бир қисми сиртга ботади ва кичик кластерлар сезиларли даражада деформацияланади. Кластер энергияси ортиб бориши билан сиртга ботиш чуқурлиги ортади.



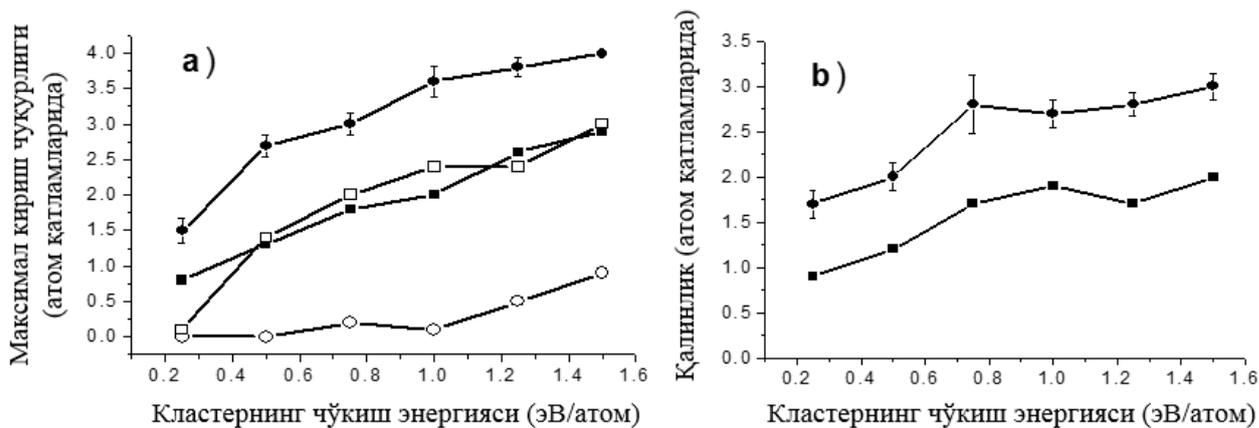
**8-расм. 1 эВ/атом ва 10 эВ/атом энергиясига эга бўлган  $Ag_{20}$  кластерининг мис кристалл ичигага чўкиши (чўкиш чуқурлиги 4,9 Å ва 8,8 Å).**

МД усулига асосланган компьютер симуляцияларидан фойдаланиб,  $Ag_nCo_m$  кластерлари (бу ерда  $n = m$ ,  $n = 100, 250, 500, 750, 1000, 1250$  ва  $1500$ )  $Ag(100)$  юзасига 0,5 эВ/атом энергияда ётқизилганда юпқа плёнка ҳосил бўлиш жараёнлари тадқиқ этилди.  $Ag_nCo_m$  кластерлари ( $m=n$ ,  $m = 200, 500,$

1000, 1500, 2000, 2500 ва 3000) кетма-кет тасодифий танлаш орқали чўктирилди. Хар бир жараён учун 150 пс вақт сарфланди. Таглик  $148,2 \times 148,2 \times 98,8 \text{ \AA}$  ўлчамга эга ва 124416 атомдан иборат. Ҳисоблаш хона ҳароратида, икки ўлчамдаги даврий чегара ҳолатини ва электрон-фонон бирикмасини ҳисобга олган ҳолда амалга оширилди.

Кўриб чиқиладиган энергия оралиғида секинлашувнинг биринчи характеристикаси - бу кластерларнинг тагликга кириб бориши ва у билан боғлиқ шикастланиш. Со атомларининг юмшоқ қўниши натижасида юзага келадиган сирт шикастланиши аллақачон экспериментал равишда ўрганилган. МД ва сирт туннел микроскоплари орқали аниқроқ кўрсатилган

9- расмда кластернинг кристалл ичига максимал кириши(а) ва кристалл сиртида кластерларнинг қалинлигининг (б) тушиш энергиясига боғлиқлиги кўрсатилган. 9а-расмда қора квадратчалар кичик кумуш кластери натижаларини, катта кумуш кластерлари учун қора доиралар, кичик кобальт кластерлари учун оқ доиралар ва оқ квадратлар катта кобальт кластерлари натижаларини ифодалайди. 9б-расмдаги қора доиралар кичик кластер натижаларини, квадратлар эса катта кластер натижаларини англатади. Графикадаги битта боғланиш чизиғида стандарт хатоликлар кўрсатилган.

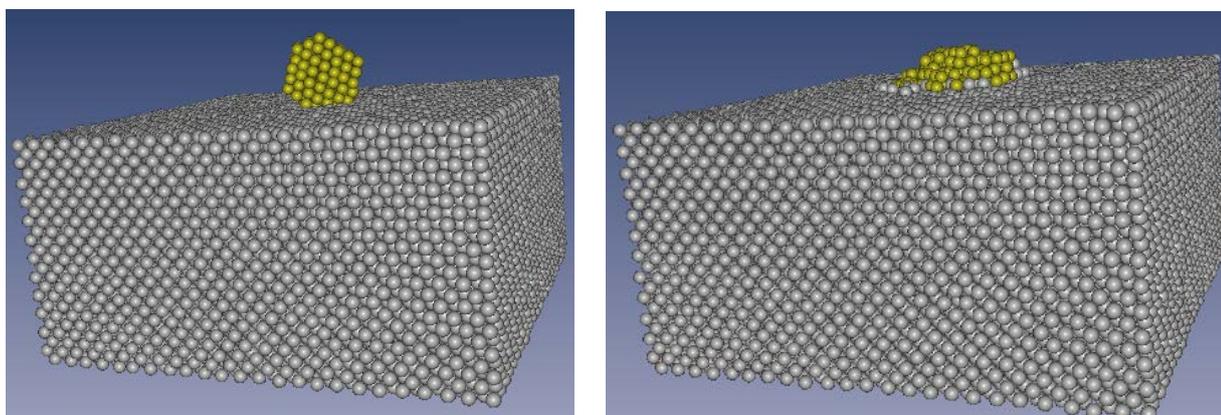


**9-расм. Кластернинг кристалл ичига максимал кириши(а) ва кристалл сиртида кластерларнинг қалинлигининг (б) тушиш энергиясига боғлиқлиги.**

Кўриб чиқилган паст энергияларда (хар бир атом учун 1,5 эВ дан кўп бўлмаган) кластернинг сиртга қисман кириши кузатилди. Со атомлари битта кластер сифатида гурухланади ва Ag кластери атомлари билан ўралади. Кластер кристаллга киришида нишондаги Ag атомларини силжитади. Кластернинг кинетик энергиясининг ошиши билан таглик(нишон) сирти остига бир хилда, чизикли ўсиш билан атомлар киритилди. Ушбу киритилиш кластернинг энергияси 0,25 эВ/атом бўлганда 3% ни ва 1,5 эВ/атом бўлганда 30% ни ташкил этди. Ҳажми сақлаш қоидасига кўра, энг кичик кластер ҳолатида, сирт устида силжиган сирт атомлари сони ушбу сирт остидаги кластер атомлари сонига тўлиқ тенгдир. Катта кластер учун у бироз кичикроқ, чунки сирт остидаги Со атомлари ҳажми сиртдаги Ag атомлари ҳажмидан кичикроқдир.

9-расмда тушаётган кластерларнинг максимал кириб бориш чуқурлиги (9а-расм) ва сирт устидаги сирт атомлари томонидан ҳосил бўлган қатламнинг баландлиги (9б-расм) тушиш энергиясининг функциялари сифатида тасвирланган. Ҳар бир элементдан ташкил топган кластерларнинг кристалл ичига кириши ҳар хил бўлади. Кластернинг ҳар бир энергиясида ўнга бир-бирига боғлиқ бўлмаган чўкиш жараёнлари натижалари умумлаштирилди ва ўртача стандарт хатоликлар кўрсатилди. Кичик кластер ўртача ҳисобланган максимал энергияда ҳам иккинчи қатламгача ҳам кирмайди. Катта кластер тизимли равишда кичик кластерга қараганда чуқурроқ киради. Бундан ташқари, тизимли равишда, дастлаб кумуш атомлари билан ўралган кобальт (икки типли кластер) кумушга қараганда сиртнинг камроқ қатламига киради ва кумуш қобиғи билан ўралганлигича қолади. Энергияси 0,5 эВ/атом дан паст бўлган кичик кластер бундан мустасно, Co ва Ag ҳар доим камида битта сирт қатлами чуқурлигида бўлади. Бу шуни кўрсатадики, айниқса реал тажрибаларда тагликни шикастлантирмасликни иложи йўқ. Таъсирлашув натижасида Ag атомлари кластерни тарк этиб, бирикган атомларни ҳосил қилади. Бирикган атомлар кластернинг чеккасида ёки кластердан унча катта бўлмаган масофада бир-биридан ажралган ҳолда жойлашган бўлади.

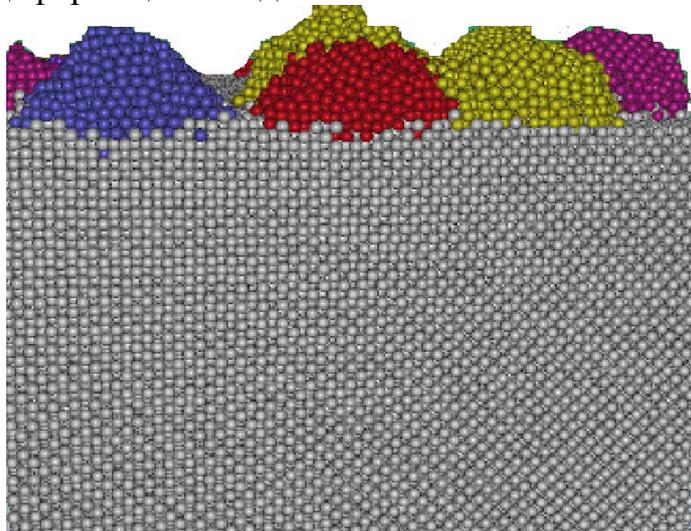
Ҳар бир кластер кристалл юзасига нормал тушиш вақтида маълум бир бошланғич кинетик энергия билан урилади, сиртга таъсир қилиш нуқталари ва уларнинг сиртга нисбатан йўналиши тасодифий равишда танланади. Ҳар бир жараён хона ҳароратида 150 пс давомида бажарилди. Кўриб чиқилган 150 пс вақтида оралиғида термализация қилинган конфигурацияни ўзгариши эҳтимоли жуда юқори бўлади. Чўкиш жараёнини бир нечта муҳим хусусиятлар билан тавсифлаш мумкин. Буни 10-расм ёрдамида тасвирлаш мумкин, бу расмда  $Co_{10}Ag_{191}$  кластерининг чўкишдан олдинги ва 150 пс вақт ўзгаришидан кейин кластер-таглик тизими ифодаланган. Кластернинг тушиш энергияси 0,5 эВ/атом. Яқуний тизимни кластернинг тагликга саёз кириши билан тавсифлаймиз.



**10-расм. Кумуш монокристалли сиртга 0,5 эВ/атом кинетик энергия билан тушаётган  $Co_{10}Ag_{191}$  кластерининг бошланғич ва охири ҳолатдаги модел кўринишлари.**

10-расмда кластернинг тагликка тизимли жойлашиши билан бирга бироз деформацияга учраши келтирилган. Бу вақтда кластернинг юқори қисми

Ўзининг дастлабки атом тартибини сақлаб қолиши мумкин. Расмдан шуни кўришимиз мумкинки, тагликда бироз шикастланишлар ҳосил бўлади ва Ag кластер қобиғи монокристалл юзаси бўйлаб бироз ёйилишга интилади. Со ядроси чўкишда бироз таъсирлашувга учраган бўлса-да, аввалроқ ўз шаклини йўқотишни бошлаган Ag панжараси таъсир натижасида янада деформацияланади.



**11-расм. Паст энергияли кластерларни чўктириш орқали юпқа плёнкаларни ҳосил қилиш**

11-расмда 0,5 эВ/атом энергияга эга бўлган 65 та 200, 500, 1000, 1500, 2000, 2500 ва 3000 атомли  $Ag_nCo_m$  кластерларининг чўктирилиши натижасида ҳосил бўлган юпқа плёнка модели келтирилган. Расмдан баъзи кластерлар юпқа плёнка ҳосил бўлиши натижасида кучли деформацияга учраганлигини кўришимиз мумкин. Эркин кластерлардаги панжара бузилади ва бу бузилиш зарба таъсирида кучаяди.

Кластернинг дастлабки хотира морфологияси ҳам ядрога, ҳам қобикқа нисбатан каттароқ кластер таъсиридан кейин қисман сақланиб қолади. Ушбу 150 пс вақти оралиғида кўриб чиқилган симуляция жараёни катта кластер учун ҳам қисман тўғри келади. Шунинг учун, атом даражасида, чўкиш жараёнидан кейин кластер-таглик тизими мураккаб тузилишни намоён этади ва дастлабки геометрик хусусиятларнинг қисман сақлаб қолади. Бу катализ, магнит ва оптик хусусиятлар билан боғлиқ ўзгаришларга олиб келиши мумкин ва ҳозирда кластернинг сирт билан ўзаро таъсирини кузатиш имкониятларини яхшироқ ўрганиш учун тадқиқотлар олиб борилмоқда.

## ХУЛОСАЛАР

1. Компьютерда моделлаштириш орқали  $T=0$  К ҳароратда кумуш (атомлар сони 2000 ва 4000) ва мис (атомлар сони 4000 ва 108000) монокристалларининг моделлари қурилди;
2. Кам атомли кластерларнинг барқарор тузилмалари ва конфигурациялари ўрнатилди, ҳамда улардаги ҳар бир атом учун боғланиш энергиялари,  $T=0$  К да кумуш, мис ва кобальт кластерларидаги боғланиш энергиясининг атомлар сонига боғлиқлиги аниқланди;
3.  $Co_{10}Ag_{191}$  ва  $Co_{285}Ag_{301}$  аралаш кластерларининг барқарор тузилмалари, конфигурациялари ва улардаги ҳар бир атом учун боғланиш энергиялари аниқланди;

4. Мис, кумуш, кобальт кластерлари ва аралаш  $Cu_nCo_1$  ( $n=2-9$ ) ва  $Cu_nCo_2$  ( $n=2-8$ ) кластерлари атомлари орасидаги боғ узунликлари аниқланди;
5. Баъзи кам атомли мис, кумуш, кобальт ва  $Cu_nCo_1$  ( $n=2-9$ ) ва  $Cu_nCo_2$  ( $n=2-8$ ) аралаш кластерларининг визуал тасвирлари олинди;
6. Мис кристаллари юзасида кичик кумуш кластерларни ётқизиш бўйича модель экспериментлар компьютер симуляция усулларидадан фойдаланган ҳолда ўтказилди, чўктириш натижасида кластер атомларининг бир қисми нишонга ботирилди ва кичик кластерлар сезиларли даражада деформацияланди. Кластер энергияси ортиб бориши билан унинг кристалл ичига кириб бориш чуқурлиги ортиши кузатилди;
7. Кумуш кристалл юзасида  $Co_{10}Ag_{191}$  ва  $Co_{285}Ag_{301}$  кластерларининг чўкиши симуляцияси амалга оширилди, симуляция натижалари шуни кўрсатадики, кластерларнинг нишонга кириб бориши уларнинг энергиясига ҳам, ҳажмига ҳам боғлиқ, кластерларнинг кристаллга кириб бориши юпқа плёнкали тузилмаларнинг шаклланишига олиб келади.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ PhD.03/30.09.2020.FM.55.04 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ  
УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ УРГЕНЧЕСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ  
УНИВЕРСИТЕТЕ**

---

**ФЕРГАНСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ**

**ИБРОХИМОВ НОДИРБЕК ИКРОМЖОНОВИЧ**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ  
НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ СЕРЕБРА, СЕРЕБРА-  
КОБАЛЬТА С ПОВЕРХНОСТЯМИ МЕДИ И СЕРЕБРА**

**01.04.04.– Физическая электроника**

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

**Фергана – 2022**

**Тема диссертации доктора философии (PhD) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № В2021.4.PhD/FM445.**

Диссертация выполнена в Ферганском политехническом институте.

Автореферат диссертации на трёх языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещён на веб-странице Научного совета по адресу [www.fizelektronika.urdu.uz](http://www.fizelektronika.urdu.uz) и Информационно-образовательном портале «Ziynet» по адресу [www.ziynet.uz](http://www.ziynet.uz).

**Научный руководитель:** **Ядгаров Ишмунин Джаббарович**  
доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник

**Официальные оппоненты:** **Ташатов Алланазар Каршиевич**  
доктор физико-математических наук, профессор  
**Курбанов Музаффар Кадамбаевич**  
кандидат физико-математических наук

**Ведущая организация:** **Ташкентский государственный технический университет**

Защита диссертации состоится «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2022г. в \_\_\_ часов на заседании Научного совета PhD.03/30.09.2020.FM.55.04 при Ургенческом государственном университете. (Адрес: 220100, г. Ургенч, ул. Х. Алимджана, дом 14. Тел: (99862) 224-66-11; факс: (99862) 224-67-00; e-mail: fizelektronika.urdu@umail.uz).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Ургенческого государственного университета (зарегистрирована за № \_\_\_). (Адрес: 220100, г. Ургенч, ул. Х. Алимджана, дом 14. Тел: (99862) 224-66-11; факс: (99862) 224-67-00; e-mail: fizelektronika.urdu@umail.uz).

Автореферат диссертации разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 года.  
(реестр протокола рассылки \_\_\_\_\_ от «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 года).

**У.О. Кутлиев**

Председатель научного совета по присуждению ученой степени, доктор физико-математических наук

**А.Р. Матназаров**

Учёный секретарь научного совета по присуждению ученой степени, кандидат физико-математических наук, доцент

**К.А. Исмаилов**

Председатель научного семинара при научном совете по присуждению ученой степени, доктор физико-математических наук, профессор

## **ВВЕДЕНИЕ (Аннотация диссертации доктора философии (PhD))**

**Актуальность и востребованность темы диссертации.** Сегодня в мире особое значение придается вопросам создания металлических кластеров разного размера и исследования процессов взаимодействия кластеров с металлическими кристаллами. Эти исследования представляют интерес для различных областей науки и техники. В связи с этим методы математического моделирования позволяют значительно дополнить результаты, полученные экспериментальными методами в этой области и приобретает все большее значение в исследованиях наноразмерных металлических наноструктур.

В последние годы в мире проводятся научные исследования по определению образования кратеров на поверхности кристаллов и процессов деформации кластеров при бомбардировке поверхности кристалла металлическими кластерами. В этом направлении приоритетными считаются исследования по моделированию процессов включения в кристалл металлических кластеров разного размера и формирования тонких пленок на поверхности кристалла. В то же время получение некоторых металлических наноструктур путем бомбардировки кристаллов кластерами считается одной из актуальных задач как с фундаментальной, так и с практической точек зрения.

В Республике Узбекистан все большее внимание уделяется развитию перспективных направлений фундаментальных и прикладных исследований, в частности, созданию новых наноматериалов, изучению их фундаментальных свойств. В Стратегии дальнейшего развития Республики Узбекистан на 2017-2021 гг. поставлены задачи «Стимулирования научно исследовательской и инновационной деятельности, создания эффективных механизмов внедрения научных и инновационных достижений в практику при высших образовательных учреждениях и научно-исследовательских институтах, научно-экспериментальных специализированных лабораториях и центрах высоких технологий»<sup>1</sup>. При реализации этих задач важно определить, в частности, процессы взаимодействия металлических кластеров с поверхностью монокристаллов и механизмы формирования нанопленок на поверхности кристаллов путем осаждения низкоатомных кластеров.

Представленное диссертационное исследование, в определенной мере, способствует выполнению задач, изложенных в Указах Президента Республики Узбекистан № УП-60 от 28 января 2022 года «О стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы», а также постановлениями Президента Республики Узбекистан № ПП-4779 «О дополнительных мерах по сокращению зависимости отраслей экономики от топливно-энергетической продукции, путем повышения энергоэффективности экономики и задействования имеющихся ресурсов» от 10 июля 2020 года а также других

---

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.

нормативно-правовых документах, принятых в Республике за последние годы в данной сфере.

**Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий республики.** Данное исследование выполнено в соответствии с приоритетными направлениями развития науки и технологий Республики Узбекистан - II. «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение».

**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 изучению металлических кластеров и их взаимодействия с кристаллами. Наиболее значительные результаты в указанной области были достигнуты зарубежными учеными, В.Н. Шульгой, Л.В. Редель, Ю.Я. Гафнер, Francesca Valetto, Mehmet Karabacak, P.L. Williams, Y. Mishin и др.

Научные работы известных ученых Узбекистана посвящены моделированию процесса взаимодействия атомов и кластеров с поверхностью монокристаллов. Среди них: А.А. Джурахалов, А.М. Расулов, У.О. Кутлиев и И.Д. Ядгаров. В результате проведенных научных исследований были достигнуты значительные результаты в определении механизмов рассеяния и распыления атомов и кластеров на поверхности металлических кристаллов.

В то же время процесс образования кластеров и образования пленок за счет взаимодействия металлических кластеров с поверхностью кристаллов изучен недостаточно.

**Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертационная работа.** Диссертационная работа выполнена в рамках научно-исследовательского проекта Института ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз. № ОТ-Ф2-46 «Теоретическое исследование процессов взаимодействия фотонов, атомных частиц и электронов с фуллеренами и углеродными нанотрубками» (2017-2020 гг.).

**Целью исследования** является изучение методами минимизации энергии стабильных конфигураций малоатомных металлических кластеров, образования наноструктур на поверхности металлических кристаллов при осаждении на нее металлических кластеров.

**Задачи исследования:** установление стабильных структур и конфигураций кластеров меди, серебра и кобальта;

установление стабильных структур и конфигураций смешанных кластеров  $Cu_mCo_n$ ;

анализ изменений поверхности металлических кристаллов при осаждении на нее некоторых малоатомных кластеров на примере кристаллов меди и серебра;

изучение образования тонкопленочных структур при осаждении кластеров большого размера на поверхности кристалла серебра на примере  $Ag_mCo_n$  (с общим числом атомов до 3000 в одном кластере).

**Объектом исследования** являются компьютерные модели металлических кластеров меди, серебра, кобальта и кристаллов меди и серебра.

**Предметом исследования** являются координаты, скорости атомов, энергии межатомного взаимодействия и энергии связывания металлических кластеров.

**Методы исследования.** В диссертационной работе применены следующие методы: метод минимизации энергии и метод молекулярной динамики (МД) с использованием потенциала ЕАМ и МЕАМ.

**Научная новизна исследования** заключается в следующем:

установлены стабильные структуры и конфигурации малоатомных кластеров (Ag, Cu, Co), а также определены энергии связи для каждого атома в них, зависимости энергии связи от количества атомов в кластерах серебра, меди, кобальта;

определены длины связей между атомами кластеров меди, серебра, кобальта ( $Cu_n$ ,  $Ag_n$  и  $Co_n$ ,  $n=3-60$ ) и смешанных кластеров  $Cu_nCo_1$  ( $n=2-9$ ) и  $Cu_nCo_2$  ( $n=2-8$ );

получено, что при осаждении малых кластеров серебра на поверхность кристаллов меди часть атомов кластера погружается в мишень, а небольшие кластеры значительно деформируются с увеличением энергии кластера, глубина внедрения его в кристалл увеличивается;

определено, что при осаждении малых кластеров на поверхность кристаллов меди, атомы кластера проникают в мишень, глубина проникновения зависит как от энергии, так и от их размеров.

**Практические результаты исследования** заключаются в следующем:

разработаны геометрические модели металлических кластеров и кристаллов;

установлено, что с увеличением энергии кластеров серебра, падающих на поверхность монокристалла меди, они проникают вглубь кристалла;

установлено, что низкоэнергетические металлические кластеры при падении к поверхности кристалла претерпевают значительную деформацию.

**Достоверность результатов исследований** обосновывается применением общепринятых потенциала ЕАМ и МЕАМ для металлических 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 исследования объясняется выявлением характерных особенностей процессов взаимодействия кластеров разного размера с металлической поверхностью.

Практическая значимость результатов исследования объясняется тем, что результаты, полученные при математическом моделировании процессов взаимодействия кластеров с металлическими монокристаллами, способствуют стимулированию и разработке новых конструкционных материалов в нанотехнике и современных элементов микро- и наноэлектроники.

**Внедрение результатов исследования.** На основе результатов изучения процессов взаимодействия низкоэнергетических кластеров серебра, серебра-кобальта с поверхностями меди и серебра:

результаты, установившие, что при осаждении кластеров серебра  $Ag_{20}$  и  $Ag_{60}$  на поверхность монокристалла меди происходит деформация поверхности монокристалла с образованием кратеров разных размеров, были использованы в работе Проекта №ОТ-Атех-2018-503: «Модификация электронной структуры, эмиссионных и оптических свойств поверхности слоев Si, Ni и их окислов ионной бомбардировкой», (Справка № 01/9-14-1108 Ташкентского государственного технического университета от 11 апреля 2022 года). Использование научных результатов позволило оценить свойства наноразмерных систем и освоить фундаментальные законы физики;

результаты определения стабильных структур и конфигурации малоатомных кластеров меди, серебра, кобальта 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, (Справка № 2/1255-670 Академия Наук Республики Узбекистан от 25 марта 2022 года). Использование научных результатов позволило оценить межмолекулярные эффекты при формировании наноразмерных углеродных гетероструктур на поверхности гладких подложек и определить расположение кластеров на поверхности.

**Апробация результатов исследования.** Результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 5 международных и 1 республиканских конференциях.

**Публикация результатов исследования.** Основные результаты исследований по теме диссертации опубликованы в 9 научных трудах, из которых 4 статей в научных журналах, в том числе 2 зарубежных и 2 республиканских журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов докторских диссертаций и получено 3 свидетельства об официальной регистрации программы для ЭВМ.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы, включая 57 рисунков и 5 таблиц. Объем диссертации составляет 112 страницы.

## **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ**

**Во введении** раскрывается актуальность темы исследования, формулируются цели и задачи исследования, описываются объект и предмет исследования, приводится 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 взаимодействия кластеров с поверхностью металлических кристаллов, когда кластерный ион ударяется о твердую поверхность, между кластером и атомами подложки происходят столкновения атомов с высокой плотностью. Этот механизм множественных столкновений вызывает явления, отличные от таковых для мономерных ионов. Проведено моделирование с помощью МД мономера Ag и кластера Ag с размером от нескольких до тысяч атомов, воздействующих на поверхность Si (001). Рассмотрены процессы проникновения, образования повреждений и распыления, а также обсуждаются нелинейные столкновительные процессы кластерных ионов.

Кластеры могут быть однородными, то есть состоящими только из одного типа атомов или молекул, или гетерогенными. Они могут быть нейтральными или заряженными. Они могут удерживаться вместе очень разными видами сил: сильным притяжением между противоположно заряженными ионами (как в кластерах NaCl), притяжением ван-дер-Ваальса (как в кластерах He и Ar), ковалентными химическими связями (как в кластерах Si) или металлической связью (как в кластерах Na и Cu).

Рассмотрены биметаллические нанокристаллы, образованные благородными и не благородными металлами, используемыми в катализе, практические гетерогенные катализаторы для топливных элементов, органические реакции и каталитические преобразователи, поэтому может быть достигнут новый важный научно-технический прогресс в отношении синергетического эффекта на активность и специфичность.

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

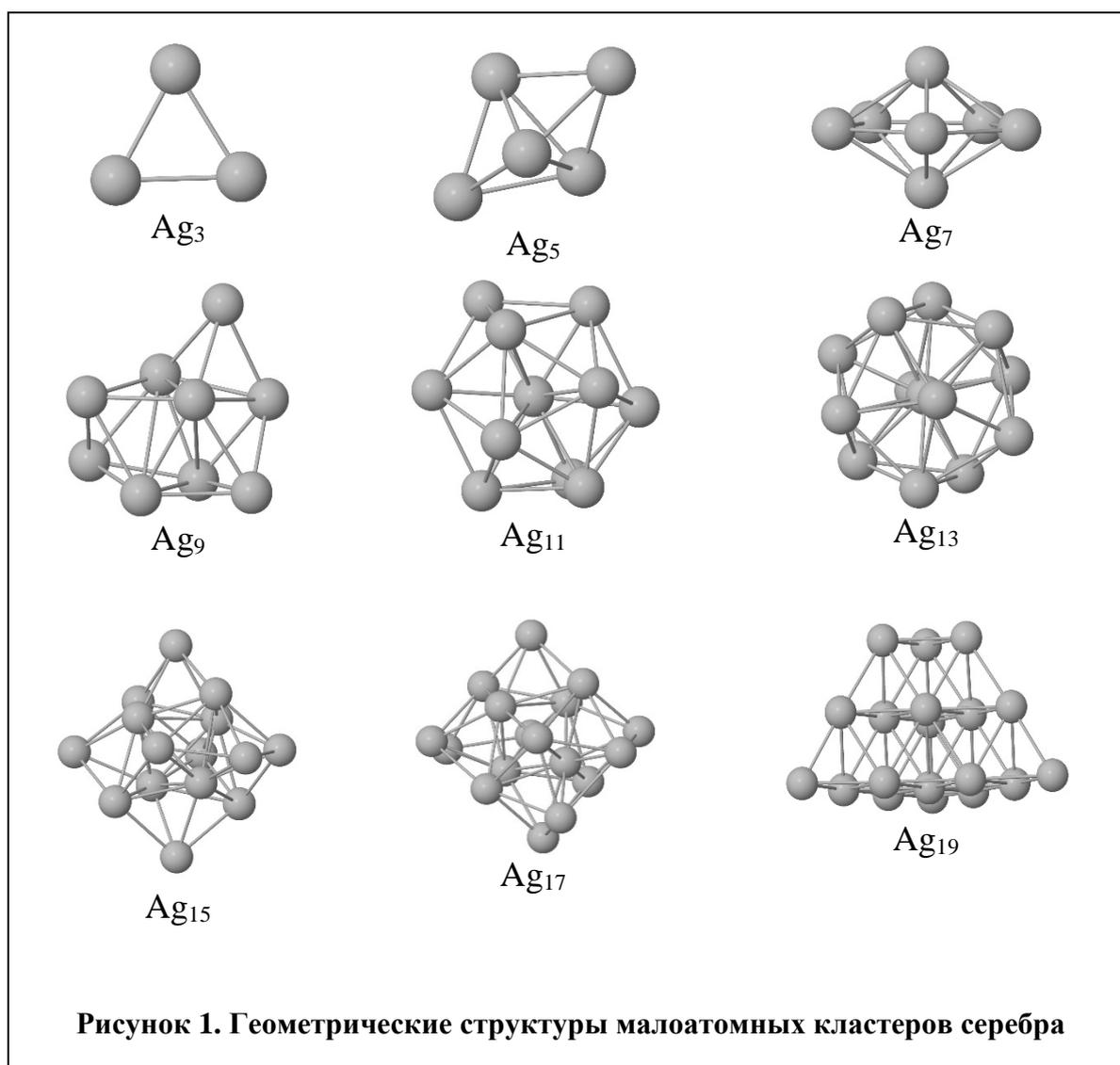
Методы молекулярной динамики (МД) используются в широком диапазоне приложений, как в науке, так и в технике, по причине того, что их можно использовать для моделирования процессов в молекулярном масштабе (наномасштаб), начиная от простых газов и жидкостей до сложных материалов. В классическом моделировании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

**В третьей главе** диссертации приведены результаты моделирования малоатомных металлических кластеров серебра, меди, кобальта и смешанных кластеров меди и кобальта, а также геометрическое расположение и конфигурации атомов в этих кластерах. Модельные эксперименты проводились в основном с использованием программного пакета LAMMPS.

Небольшие кластеры серебра ( $Ag_n$ ,  $n = 3-60$ ) моделировались методами МД с использованием потенциала EAM. Сначала определялись геометрические структуры, равновесные конфигурации этих кластеров при температуре кластера 0 К, а затем кластеры «разогревались» до 300 К.

На рис.1 показаны геометрические структуры малоатомных кластеров серебра. На этих рисунках шарики изображают атомы серебра, в некоторых

случаях разными серыми тонами для лучшего восприятия структуры кластеров, серой линией между шариками показывают взаимодействие между атомами. Кластер  $Ag_3$  имеет форму равностороннего треугольника. Кластер  $Ag_5$  состоит из пяти атомов, 3 атома кластера, расположенных в одной плоскости, образуют простой треугольник, а два других атома расположены симметрично выше и ниже центра этого треугольника. Кластер  $Ag_7$  состоит из семи атомов, при этом 5 атомов кластера образуют простой пятиугольник в одной плоскости, а два других атома симметрично расположены выше и ниже центра этого пятиугольника. Кластеры с  $Ag_9$  по  $Ag_{19}$  по мере возрастания числа атомов в них приобретают более шарообразную форму.



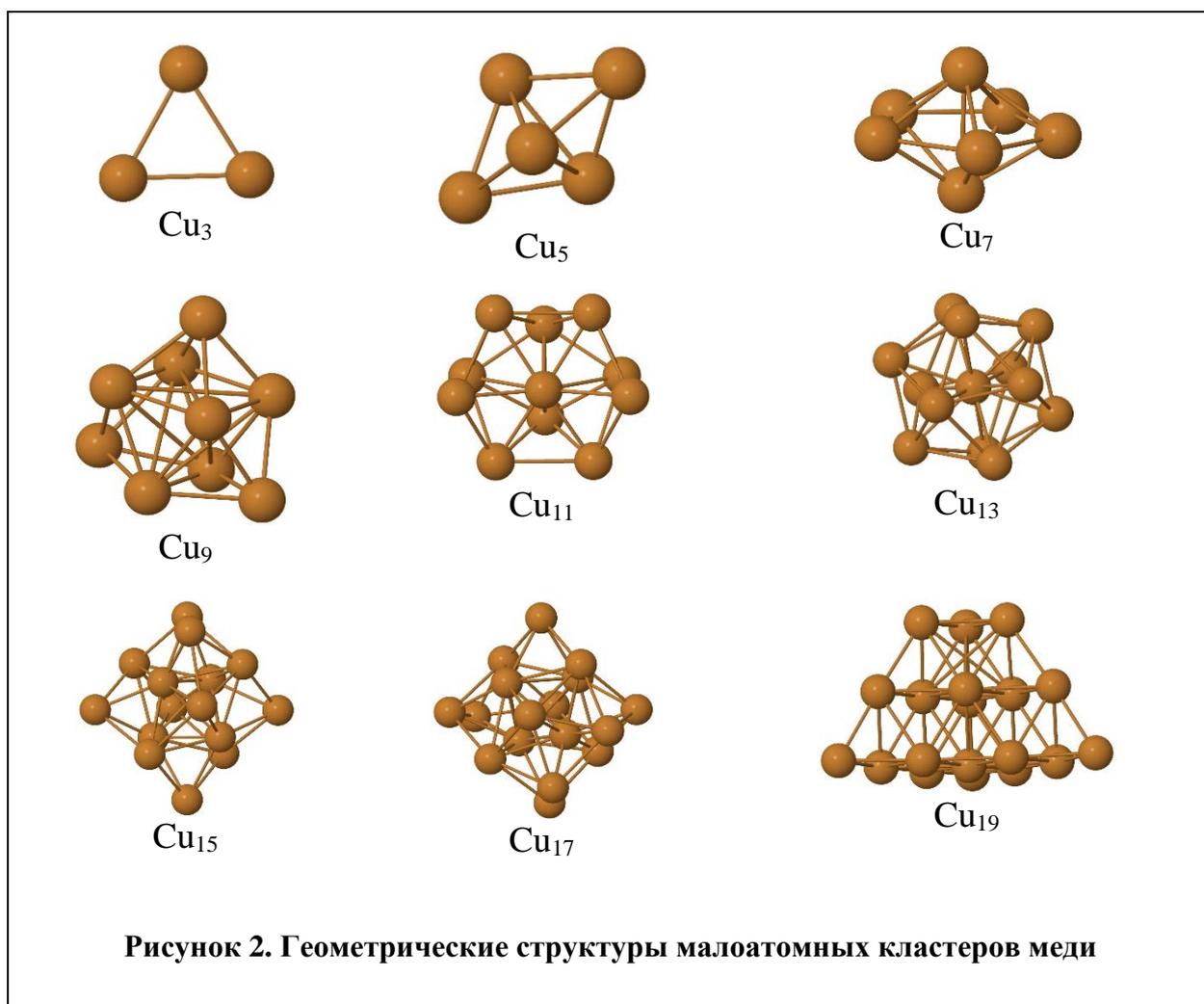
Расстояния между атомами кластера, т.е. длины связей, определяли с помощью программы Jmol. В кластере  $Ag_3$  расстояния связи Ag-Ag составляют  $2,77\text{\AA}$ . В кластере  $Ag_5$   $2,75\text{\AA}$  и  $2,78\text{\AA}$ . В кластере  $Ag_7$  эти расстояния составляют  $2,72\text{\AA}$ ,  $2,75\text{\AA}$  и  $2,82\text{\AA}$ . В кластере  $Ag_9$   $2,48\text{\AA} \div 3,11\text{\AA}$ . В кластере  $Ag_{11}$  эти расстояния составляют  $2,69\text{\AA} \div 2,85\text{\AA}$ . В кластере  $Ag_{13}$   $2,67\text{\AA}$  и  $2,81\text{\AA}$ . В кластере  $Ag_{15}$   $2,67\text{\AA} \div 2,88\text{\AA}$ . В кластере  $Ag_{17}$   $2,65\text{\AA} \div 2,89\text{\AA}$ . В

кластере  $\text{Ag}_{19}$   $2,75\text{\AA} \div 2,79\text{\AA}$ .

Структура кластеров серебра с более чем 25 атомами ближе к идеальной сферической форме. В кластере  $\text{Ag}_{25}$  расстояния связи Ag-Ag составляют  $2,51\text{\AA} \div 2,94\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Ag}_{30}$   $2,45\text{\AA} \div 3\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Ag}_{35}$  эти расстояния составляют  $2,54\text{\AA} \div 3\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Ag}_{40}$   $2,61\text{\AA} \div 2,88\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Ag}_{45}$   $2,65\text{\AA} \div 2,89\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Ag}_{50}$   $2,63\text{\AA} \div 2,9\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Ag}_{55}$   $2,64\text{\AA} \div 2,84\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Ag}_{60}$   $2,7\text{\AA} \div 2,85\text{\AA}$ .

Малоатомные металлические кластеры меди ( $\text{Cu}_n$ ,  $n = 3-60$ ) моделировались методами МД с использованием потенциала ЕАМ.

На рис. 2 показаны геометрические структуры малоатомных кластеров меди. На этих рисунках шарики изображают атомы меди, сплошные линии между шариками показывают взаимодействие между атомами. Кластер  $\text{Cu}_3$  имеет форму равностороннего треугольника. Кластер  $\text{Cu}_5$  состоит из пяти атомов, 3 атома кластера образуют простой треугольник, расположенный в одной плоскости, а два других атома расположены симметрично выше и ниже центра этого треугольника. Кластер  $\text{Cu}_7$  состоит из семи атомов, при этом 5 атомов кластера образуют простой пятиугольник в одной плоскости, а два других атома симметрично расположены выше и ниже центра этого пятиугольника. Кластеры с  $\text{Cu}_9$  по  $\text{Cu}_{19}$  по мере возрастания числа атомов в них приобретают более шарообразную форму.

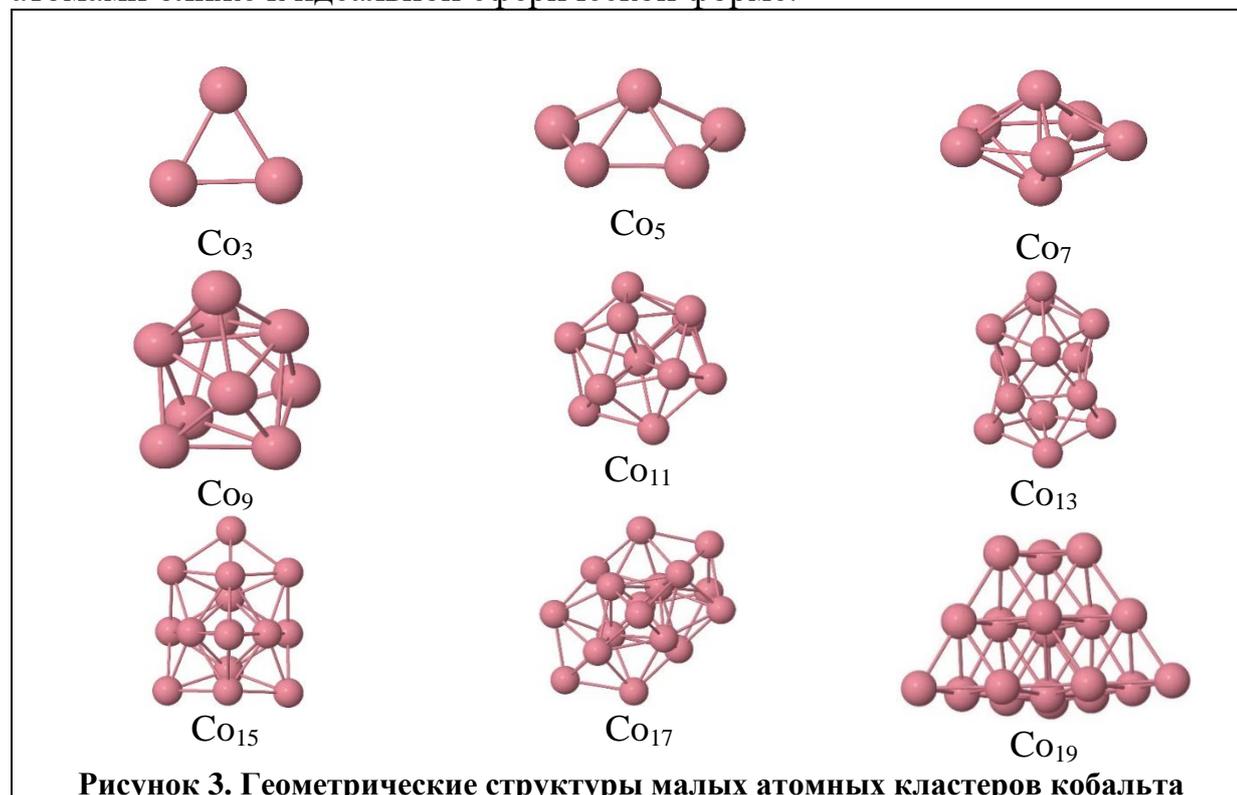


В кластере  $\text{Cu}_3$  расстояния связи Cu-Cu составляют  $2,6\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_5$   $2,6\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_7$  эти расстояния составляют  $2,62\text{\AA}$  и  $2,59\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_9$   $2\text{\AA} \div 3,04\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_{11}$  эти расстояния составляют  $2,53\text{\AA} \div 2,67\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_{13}$   $2,51\text{\AA}$  и  $2,64\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_{15}$   $2,52\text{\AA} \div 2,67\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_{17}$   $2,47\text{\AA} \div 2,69\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_{19}$   $2,33\text{\AA} \div 2,64\text{\AA}$ .

Структура кластеров меди с более чем 25 атомами ближе к идеальной сферической форме. В кластере  $\text{Cu}_{25}$  расстояния связи Cu-Cu составляют  $2,01\text{\AA} \div 3,12\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_{30}$   $2,35\text{\AA} \div 2,92\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_{35}$  эти расстояния составляют  $2,34\text{\AA} \div 2,83\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_{40}$   $2,3\text{\AA} \div 3,02\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_{45}$   $2,34\text{\AA} \div 2,98\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_{50}$   $2,37\text{\AA} \div 3,01\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_{55}$   $2,47\text{\AA} \div 2,67\text{\AA}$ . В кластере  $\text{Cu}_{60}$   $2,18\text{\AA} \div 2,69\text{\AA}$ .

Малоатомные металлические кластеры кобальта ( $\text{Co}_n$ ,  $n = 3-60$ ) моделировались программой Jmol на основе методов МД с использованием потенциала MEAM.

На рис.3 показаны геометрические структуры малоатомных кластеров кобальта. На этих изображениях сферы представляют собой атомы кобальта, а линии, соединяющие сферы, показывают взаимодействие атомов. Кластер  $\text{Co}_3$  имеет форму равностороннего треугольника. Кластер  $\text{Co}_5$  состоит из пяти атомов, четыре атома образуют простую трапециевидную форму в одной плоскости, а оставшийся один атом расположен в верхней части центра этой трапеции. Кластер  $\text{Co}_7$  состоит из семи атомов, при этом 5 атомов кластера образуют простой пятиугольник в одной плоскости, а два других атома симметрично расположены выше и ниже центра этого пятиугольника. Кластеры с  $\text{Co}_9$  по  $\text{Co}_{19}$  по мере возрастания числа атомов в них приобретают более шарообразную форму. Структура кластеров кобальта с более чем 25 атомами ближе к идеальной сферической форме.

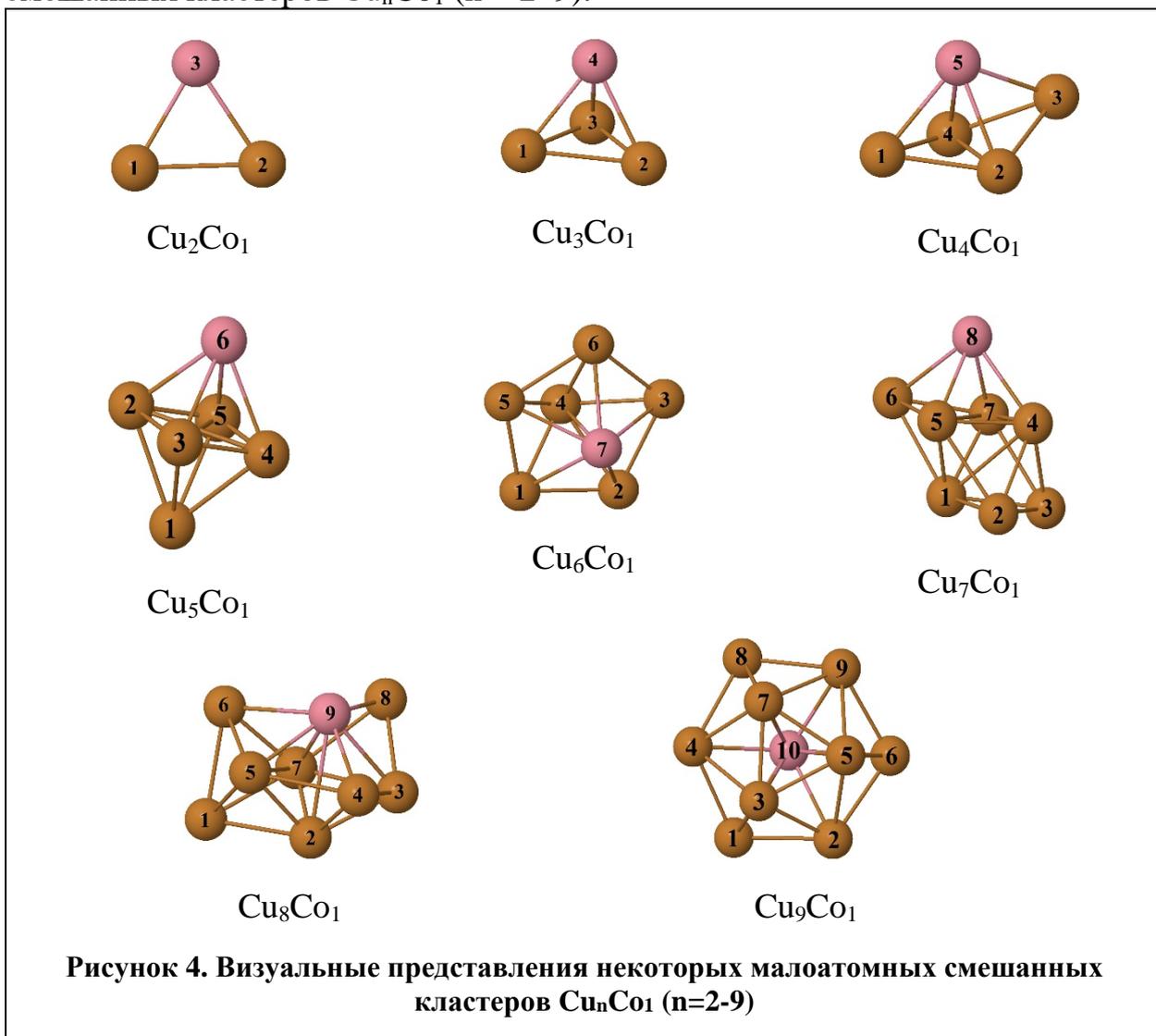


Расстояния между связями Co-Co в кластере  $Co_3$  составляют 2,48 Å. В кластере  $Co_5$  - 2,45 Å, 2,47 Å, 2,49 Å и 2,52 Å. Эти расстояния в кластере  $Co_7$  составляют 2,4 Å, 2,48 Å и 2,83 Å. В кластере  $Co_9$  2,33 Å ÷ 2,75 Å. В кластере  $Co_{11}$  эти расстояния составляют 2,21 Å ÷ 2,73 Å. В кластере  $Co_{13}$  - 2,36 Å и 2,77 Å. В кластере  $Co_{15}$  2,22 Å ÷ 2,7 Å. В кластере  $Co_{17}$  2,32 Å ÷ 2,7 Å. В кластере  $Co_{19}$  2,32 Å ÷ 2,77 Å.

Структура кластеров серебра с более чем 25 атомами ближе к идеальной сферической форме. В кластере  $Co_{25}$  расстояния между связями Co-Co составляют 2,24 Å ÷ 2,66 Å. В кластере  $Co_{30}$  2,25 Å ÷ 2,72 Å. В кластере  $Co_{35}$  эти расстояния составляют 2,24 Å ÷ 2,66 Å. В кластере  $Co_{40}$  2,26 Å ÷ 2,67 Å. В кластере  $Co_{45}$  2,28 Å ÷ 2,73 Å. В кластере  $Co_{50}$  2,3 Å ÷ 2,73 Å. В кластере  $Co_{55}$  2,28 Å ÷ 2,73 Å. В кластере  $Co_{60}$  2,31 Å ÷ 2,75 Å.

В результате приведенных выше расчетов было установлено, что связи между атомами кластеров серебра, меди и кобальта зависят от их размера и конфигурации. Разнообразие связей в кластерах приводит к изменению энергетических свойств кластеров.

На рис. 4 показаны визуальные изображения некоторых малоатомных смешанных кластеров  $Cu_nCo_1$  ( $n = 2-9$ ).



Длины связей между атомами кластеров смешанного типа разного размера представлены в табл. 1.

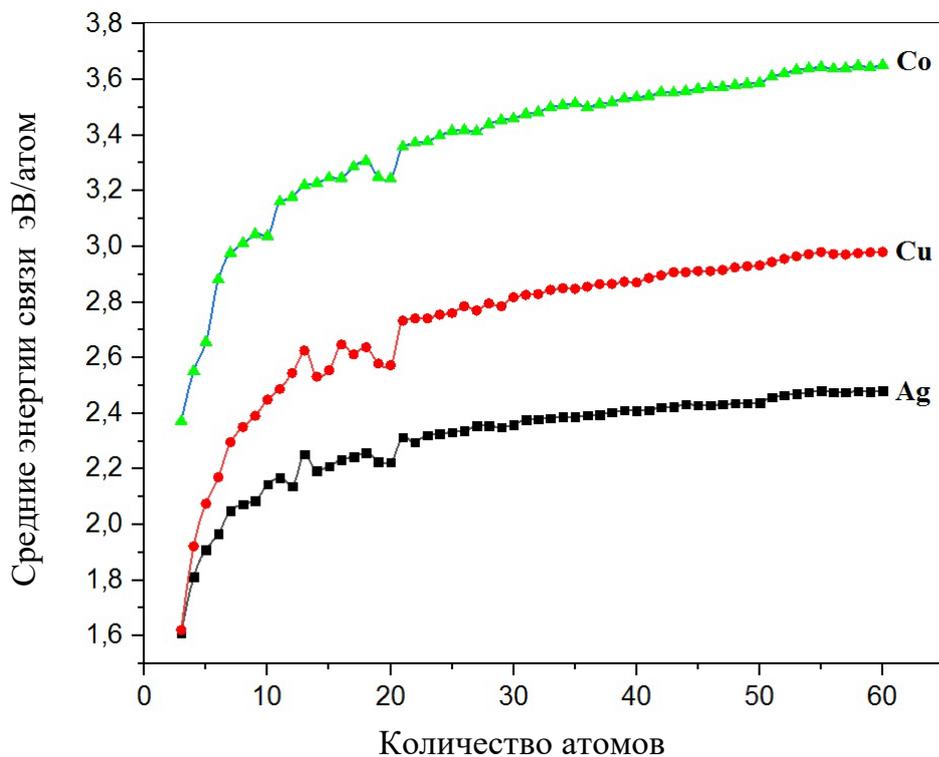
Таблица 1.

**Расстояния между атомами малоатомных смешанных кластеров  
Cu<sub>n</sub>Co<sub>1</sub> (n=2-9)**

№	Кластеры	Расстояние связи r, <math>\text{Å}</math>
1	Cu <sub>2</sub> Co <sub>1</sub>	$r_{12}=2,65, r_{13}=r_{23}=2,53$
2	Cu <sub>3</sub> Co <sub>1</sub>	$r_{12}=r_{13}=r_{23}=2,65, r_{14}=r_{24}=r_{34}=2,51$
3	Cu <sub>4</sub> Co <sub>1</sub>	$r_{24}=2,7, r_{25}=r_{45}=2,53, r_{12}=r_{14}=r_{15}=r_{23}=r_{34}=r_{35}=2,57$
4	Cu <sub>5</sub> Co <sub>1</sub>	$r_{24}=r_{35}=3,15, r_{12}=r_{13}=r_{14}=r_{15}=2,62, r_{26}=r_{36}=r_{46}=r_{56}=2,52$
5	Cu <sub>6</sub> Co <sub>1</sub>	$r_{47}=2,67, r_{17}=r_{27}=r_{37}=r_{57}=r_{67}=2,59,$ $r_{12}=r_{15}=r_{23}=r_{36}=r_{56}=2,56, r_{14}=r_{24}=r_{34}=r_{45}=r_{46}=2,53$
6	Cu <sub>7</sub> Co <sub>1</sub>	$r_{57}=3, r_{14}=2,96, r_{23}=2,73, r_{16}=2,71, r_{25}=r_{37}=2,7$ $r_{68}=2,64, r_{48}=2,61, r_{12}=r_{13}=r_{24}=r_{34}=2,5, r_{56}=r_{67}=2,48$ $r_{58}=r_{78}=2,45, r_{15}=r_{17}=2,44, r_{45}=r_{47}=2,43$
7	Cu <sub>8</sub> Co <sub>1</sub>	$r_{29}=3,24, r_{57}=3,11, r_{24}=r_{78}=2,47, r_{17}=r_{27}=2,45$ $r_{16}=r_{23}=2,44, r_{25}=r_{38}=r_{39}=2,43, r_{12}=r_{79}=2,42$ $r_{15}=r_{89}=2,41, r_{67}=r_{37}=2,4, r_{56}=2,39, r_{45}=r_{49}=r_{69}=2,38$ $r_{34}=2,36$
8	Cu <sub>9</sub> Co <sub>1</sub>	$r_{310}=r_{510}=r_{710}=2,72, r_{12}=r_{14}=r_{26}=r_{48}=r_{69}=r_{89}=2,62$ $r_{210}=r_{410}=r_{910}=2,58, r_{110}=r_{610}=r_{810}=2,55$ $r_{23}=r_{25}=r_{34}=r_{47}=r_{59}=r_{79}=2,53, r_{13}=r_{56}=r_{78}=2,51$ $r_{35}=r_{37}=r_{57}=2,45$

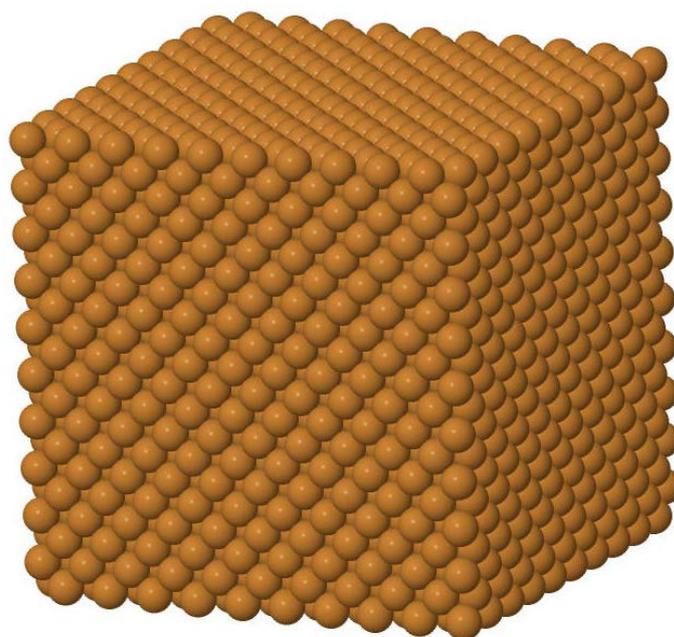
На рис. 5 приведены графики зависимости средней энергии связи (на один атом кластера) в зависимости от размеров кластеров (числа атомов в них). Из графиков видно, что чем больше кластеры, тем больше значение средней энергии связи атомов в них. Очевидно, что это является следствием

уменьшения «вклада» поверхностных атомов в значение средней энергии связи, с ростом кластеров.

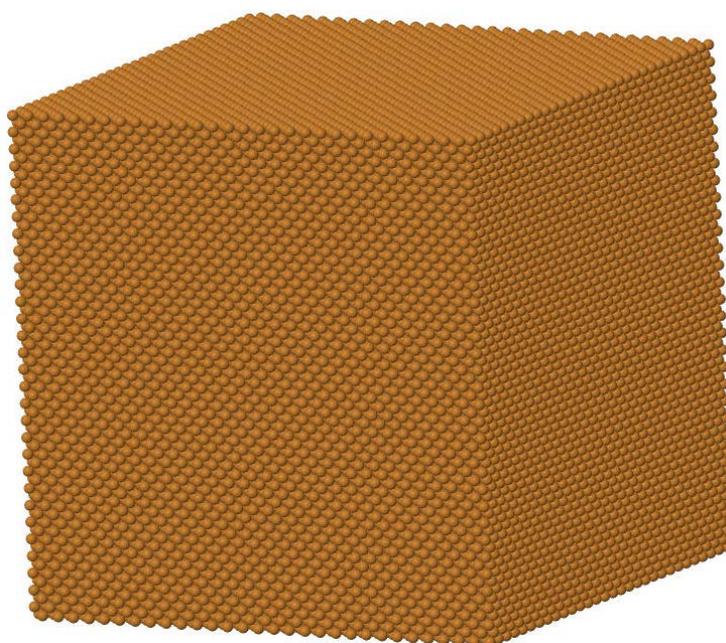


**Рисунок 5.** Энергия связи для каждого атома зависит от количества атомов в кластерах серебра, меди и кобальта при T= 0 К.

Используя потенциал EAM в программном пакете LAMMPS, на основе методов МД были созданы модели монокристаллов меди, состоящих из 4000 и 108000 атомов, при температуре  $T = 0$  К. Первоначально в каждой симуляции, после создания начальной конфигурации, мы минимизировали падение ниже 10000 шагов. Этапы моделирования равновесия выполнялись в условиях изотермической изобарии (NPT), а периодические граничные условия применялись ко всем направлениям прямоугольного блока моделирования. Мы провели процесс моделирования методом молекулярной динамики с шагом по времени 0,0001 пс. Процесс моделирования длился 100 пс и давление поддерживали на уровне 1 бар с помощью баростата Берендсена. Когда температура плавления и температура растворителя устанавливаются независимо с помощью термостата Берендсена, температура поддерживается на уровне 300 К в течение 1 пс. Эти модели показаны на рисунках 6 и 7.



**Рисунок 6. Модель кристалла Cu (100), состоящая из 4000 атомов**

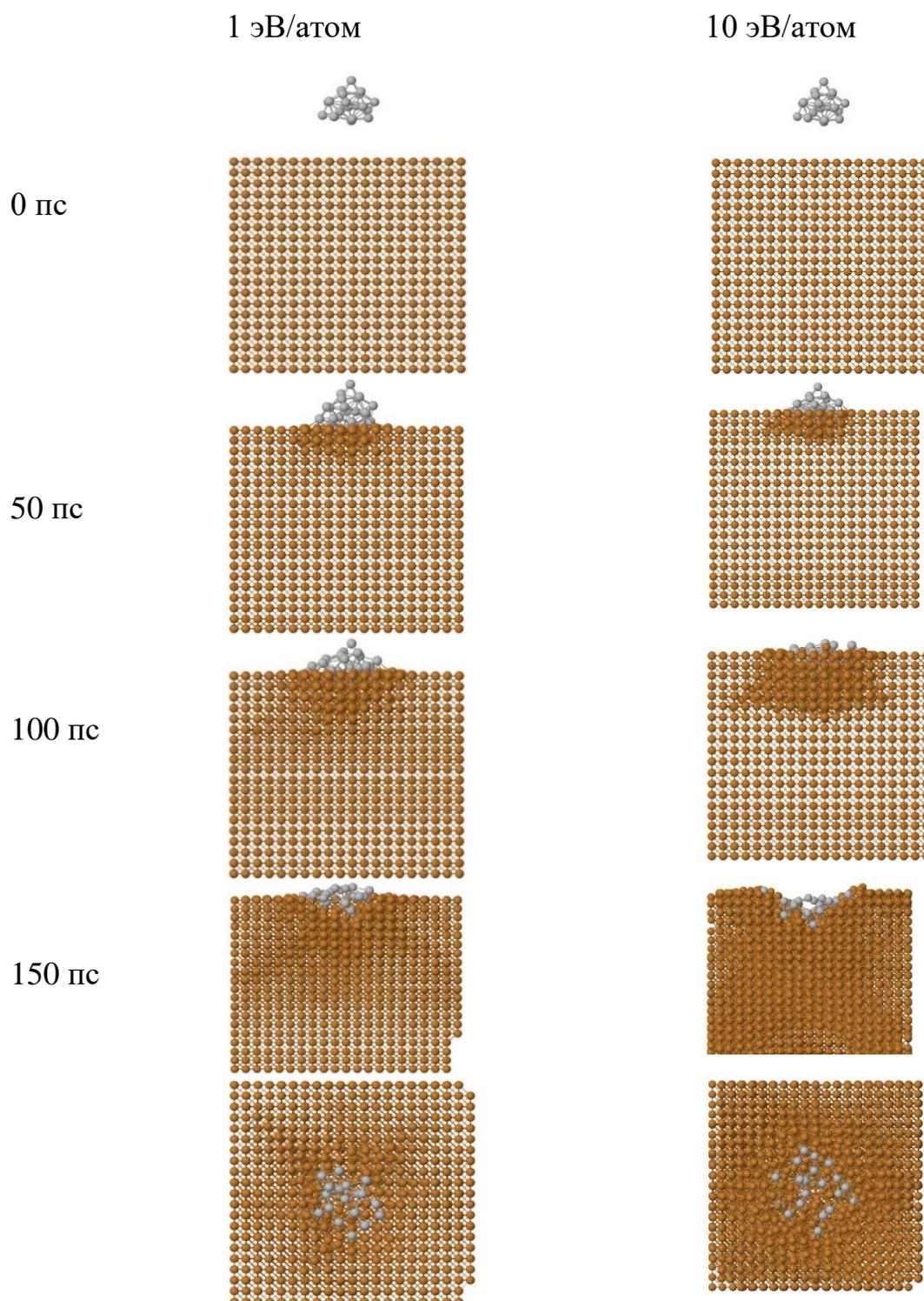


**Рисунок 7. Модель кристалла Cu (100), состоящая из 108000 атомов**

**В четвертой главе** рассмотрены процессы образования тонких пленок при осаждении кластеров с низкой энергией на поверхности кристалла серебра.

Осаждение небольших кластеров серебра на поверхности кристалла меди проводилось с помощью компьютерного моделирования, основанного на методе МД. В работе использованы потенциал ЕАМ при расчете процессов взаимодействия кластерных и поверхностных атомов. На первом этапе моделирования были найдены равновесные конфигурации металлических кластеров  $Ag_n$  ( $n = 3-20$ ). На втором этапе моделирования были построены модели кристалла меди с ориентацией (001) для поверхности. На третьем этапе

моделирования кластеры серебра с разной энергией (1 эВ / атом и 10 эВ / атом) осаждались вертикально на поверхность кристалла меди. Как видно из рисунка 8, в результате осаждения часть атомов кластера погружается в мишень, а небольшие кластеры значительно деформируются. По мере увеличения энергии кластера глубина погружения в поверхность увеличивается.

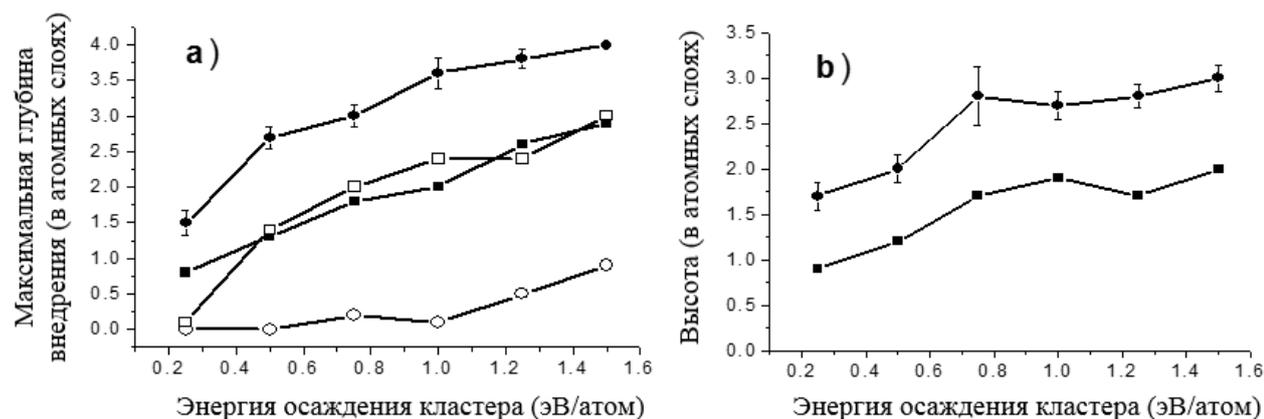


**Рисунок 8. Осаждения кластера  $Ag_{20}$  падающего с энергией 1 эВ/атом и 10 эВ/атом, на поверхность кристалла меди (глубина внедрения 4,9 Å и 8,8Å соответственно)**

С помощью компьютерного моделирования, основанного на методе МД, были исследованы кластеры  $Ag_nCo_m$  с  $n = m$  (где  $n = 100, 250, 500, 750, 1000, 1250$  и  $1500$ ), поступающие на поверхность  $Ag(100)$  при энергиях  $0,5$  эВ на атом, с образованием тонких пленок. В этом случае кластеры  $Ag_nCo_m$  с числом атомов  $200, 500, 1000, 1500, 2000, 2500$  и  $3000$  осаждаются последовательно со случайным выбором следующего кластера из указанного списка кластеров. После осаждения каждого кластера проходит  $150$  пс, а затем осаждается следующий. Подложка имеет размер  $148,2 \times 148,2 \times 98,8$  Å и состоит из  $124416$  атомов. Расчет проводился при комнатной температуре с учетом периодического граничного условия в двух измерениях и электрон-фононной связи.

Первой характеристикой осаждения в рассматриваемом диапазоне энергий является проникновение кластеров в подложку и связанное с этим повреждение. Поверхностное повреждение, вызванное мягкой посадкой атомов  $Co$ , уже было изучено экспериментально и с помощью МД. Поверхностная туннельная микроскопия показала, что оно является значительным. Ситуация может быть иной, если налетающие атомы  $Co$  связаны внутри кластеров, как в данном случае.

Максимальное проникновение (а) и средняя высота ступеньки вокруг кластеров (б) в зависимости от энергии осаждения показано на рис. 9а, где темные квадраты представляют результаты для  $Ag$  в маленьком кластере, темные круги для  $Ag$  в больших кластерах, белые кружки для  $Co$  в малых кластерах и белые квадраты для  $Co$  в больших кластерах. На рисунке 9б кружками показаны результаты для малого кластера, квадраты - для больших кластеров. Отображаемые полосы погрешностей представляют стандартную ошибку среднего и отображаются только для одной кривой на графике.



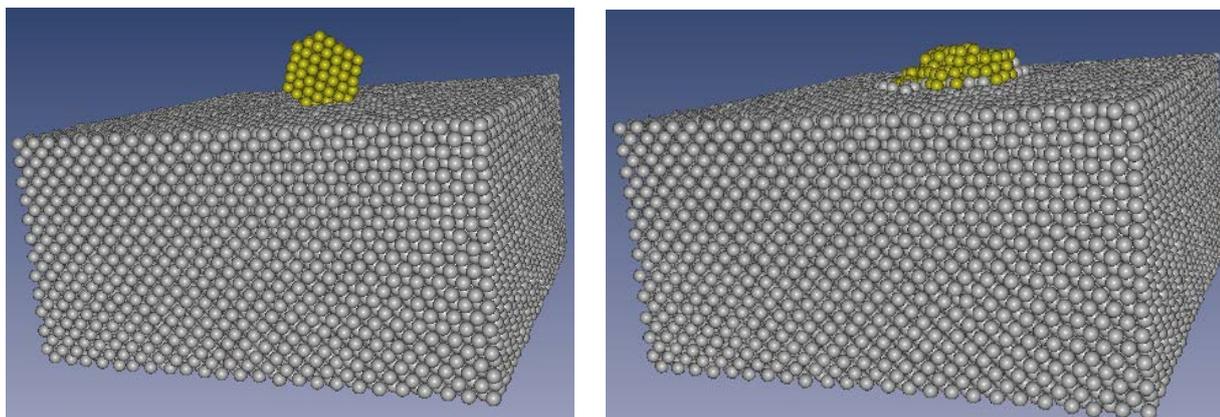
**Рисунок 9. Максимальное проникновение (а) и средняя высота ступеньки вокруг кластеров (б) в зависимости от энергии осаждения.**

При рассматриваемых низких энергиях (не более  $1,5$  эВ на атом) проникновение кластера, если оно есть, является лишь частичным.  $Co$  всегда обнаруживаются перегруппированным в один кластер, окруженный слоем серебра. При проникновении кластер вытесняет атомы  $Ag$  с подложки с

образованием аддитивных атомов. Для обоих кластеров доля атомов кластера с конечным положением ниже поверхности подложки одинакова и близка к линейно возрастающей с увеличением энергии осаждения. Она близка к 3 процентам при 0,25 эВ / ат и 30 процентам при 1,5 эВ / ат. Согласно правилу сохранения объема, в случае самого маленького кластера количество атомов подложки, смещенных над поверхностью, в точности равно количеству атомов кластера под этой поверхностью. Для большего кластера оно несколько меньше, поскольку объем, приходящийся на атомы Со под поверхностью, меньше объема, приходящегося на атомы Аг в подложке.

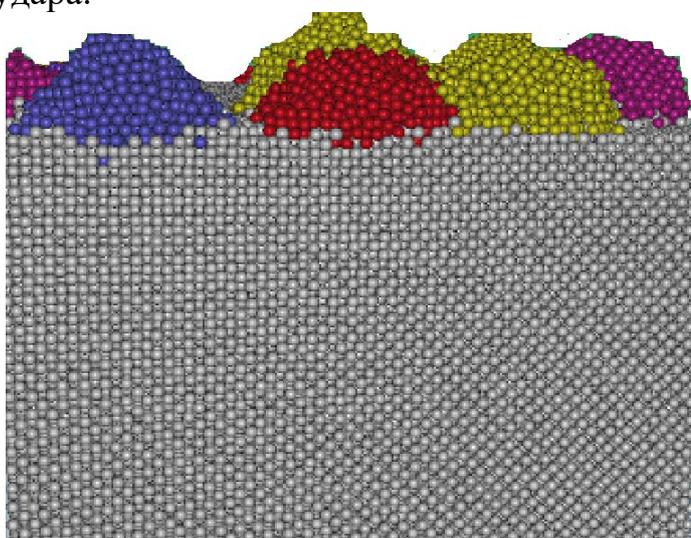
На рис. 9 показана максимальная глубина проникновения падающих кластеров (рис. 9а) и высота слоя, образованного атомами подложки над поверхностью (рис. 9б), как функции падающей энергии. Различают проникновение каждого из элементов, образующих падающие кластеры. Результаты усредняются по десяти независимым осаждениям для каждой энергии, и приводятся стандартные ошибки среднего. Самый маленький кластер не проникает в два слоя в среднем при максимальной рассматриваемой энергии. Самый большой кластер систематически проникает глубже самого маленького. Систематически также Со, первоначально окруженный атомами Аг, имеет меньшее проникновение, чем Аг, и все еще остается окруженным своей серебряной оболочкой. За исключением самого маленького кластера с падающей энергией ниже 0,5 эВ / ат, атомы Со и Аг всегда находятся, по крайней мере, в одном слое в глубине подложки. Это говорит о том, что в реальных экспериментах особенно трудно избежать повреждения подложки. В результате удара атомы Аг покидают кластер и образуют присоединенные атомы. Ад-атомы либо обнаруживаются перегруппированными и образующими ступеньку на периферии кластера, либо оказываются изолированными на больших расстояниях от кластера.

Каждый кластер ударяется о поверхность кристалла при нормальном падении с заданной начальной кинетической энергией, случайным образом выбирая точки удара на поверхности и их ориентацию по отношению к поверхности. За каждым ударом следят в течение 150 пс при комнатной температуре. В пределах рассматриваемого времени эволюции 150 пс термостимулированные модификации конфигурации могут иметь достаточно высокую вероятность того, что они произойдут. Осаждение характеризуется несколькими важными особенностями. Это можно проиллюстрировать с помощью рис. 10, который представляет кластер до его осаждения и в системе кластер-подложка после 150 пс эволюции. Например, представлен кластер  $Co_{10}Ag_{191}$ , а энергия осаждения составляет 0,5 эВ / атом. Конечная система характеризуется ограниченным проникновением кластера в подложку.



**Рисунок 10. Начальная и конечная конфигурации кластера  $\text{Co}_{10}\text{Ag}_{191}$  замедляющегося при кинетической энергии  $0,5 \text{ эВ} / \text{ атом}$ .**

Он претерпевает некоторую деформацию, сопровождающуюся структурной аккомодацией кластера с подложкой, которая ограничена в случае рис. 10. В то же время верхняя часть кластера может сохранять свое первоначальное атомное расположение. В случае рисунка 10 в подложке создается некоторое повреждение, и оболочка кластера Ag имеет тенденцию распространяться по поверхности подложки. В то время как ядро Co подвергается лишь умеренному влиянию осаждения, решетка Ag, которая уже изначально искажена, подвергается дальнейшей деформации в результате удара.



**Рисунок 11. Образование тонких пленок путем осаждения кластеров с низкой энергией**

На рис. 11 представлена пленка, выращенная осаждением кластеров  $\text{Ag}_n\text{Co}_m$   $0,5 \text{ эВ} / \text{ атом}$  с числом атомов 200, 500, 1000, 1500, 2000, 2500 и 3000 после осаждения 65 кластеров. Из рисунка 10 видно, что некоторые кластеры сильно деформируются в результате образования тонкой пленки. Решетка в свободных кластерах искажена, и это искажение усиливается ударом. Память о первоначальной морфологии

кластера частично сохраняется после удара более крупного кластера, как в отношении ядра, так и оболочки. Такой эффект памяти не обнаружен для небольшого кластера, морфология которого разрушается в результате удара, а его изменение формы определяется эпитаксиальной аккомодацией. Этот процесс является лишь частичным для рассматриваемого кластера большого размера в пределах времени моделирования 150 пс. Следовательно, на атомном уровне система кластер-подложка после осаждения показывает

сложную структуру, и память о начальных геометрических свойствах является лишь частичной. Это может иметь большое значение для катализа, магнитных и оптических свойств, и в настоящее время ведется дальнейшая работа, чтобы лучше понять возможности отслеживания последствий взаимодействия кластера с поверхностью.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Модели монокристаллов серебра (число атомов 2000 и 4000) и меди (число атомов 4000 и 108000) были построены методом компьютерного моделирования при температуре  $T = 0$  К.
2. Установлены стабильные структуры и конфигурации малоатомных кластеров, а также определены энергии связи для каждого атома в них, зависимости энергии связи от количества атомов в кластерах серебра, меди и кобальта при  $T = 0$  К.
3. Определены стабильные структуры и конфигурации смешанных кластеров  $\text{Co}_{10}\text{Ag}_{191}$  и  $\text{Co}_{285}\text{Ag}_{301}$ , а также определены энергии связи для каждого атома в них.
4. Определены длины связей между атомами кластеров меди, серебра, кобальта и смешанных кластеров  $\text{Cu}_n\text{Co}_1$  ( $n=2-9$ ) и  $\text{Cu}_n\text{Co}_2$  ( $n=2-8$ ).
5. Получены визуальные изображения некоторых малоатомных кластеров меди, серебра, кобальта и смешанных кластеров  $\text{Cu}_n\text{Co}_1$  ( $n=2-9$ ) и  $\text{Cu}_n\text{Co}_2$  ( $n=2-8$ ).
6. Проведены модельные эксперименты осаждения малых кластеров серебра на поверхности кристаллов меди методами компьютерного моделирования, в результате осаждения, часть атомов кластера погружается в мишень, а небольшие кластеры значительно деформируются. По мере увеличения энергии кластера, глубина внедрения его в кристалл увеличивается.
7. Было проведено моделирование процессов осаждения кластеров  $\text{Co}_{10}\text{Ag}_{191}$  и  $\text{Co}_{285}\text{Ag}_{301}$  на поверхность кристалла серебра, результаты моделирования показывают, что проникновение кластеров в мишень зависит как от их энергии, так и от их размеров, проникновение кластеров в кристалл мишени приводит к образованию тонкопленочных структур.

**SCIENTIFIC COUNCIL No.PhD.03/30.09.2020.FM.55.04 ON AWARD OF  
SCIENTIFIC DEGREES AT URGENCH STATE UNIVERSITY**  

---

**FERGANA POLYTECHNIC INSTITUTE**

**IBROKHIMOV NODIRBEK IKROMJONOVICH**

**MODELING OF PROCESSES OF INTERACTION OF LOW ENERGY  
SILVER, SILVER-COBALT CLUSTERS WITH COPPER AND SILVER  
SURFACES**

**01.04.04 –Physical electronics**

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

**The theme of the dissertation of doctor of philosophy (PhD) was registered by the Supreme Attestation Commission of the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number № B2021.4.PhD/FM445.**

The dissertation has been prepared at the Fergana Polytechnic Institute.

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

**Scientific supervisor:** **Yadgarov Ishmumin Djabbarovich**  
Doctor of Physical and Mathematical Sciences

**Official opponents:** **Tashatov Allanazar Karshievich**  
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor  
**Kurbanov Muzaffar Kadambaevich**  
Candidate of Physical and Mathematical Sciences

**Leading organization:** **Tashkent state technical university**

The defense will take place on «\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 at \_\_\_\_ at the meeting of the Scientific Council number PhD.03/30.09.2020.FM.55.04 at Urgench State University. (Address: 14 Kh. Olimjan str., Urgench city, 220100, Uzbekistan, Ph.: (99862)224-66-11, fax: (99862)224-67-00, e-mail: [fizelektronika.urdu@umail.uz](mailto:fizelektronika.urdu@umail.uz)).

The PhD dissertation is can be looked through in the Information-resource centre of the Urgench state University (is registered № \_\_) (Address: 14 Kh. Olimjan str., Urgench city, 220100, Uzbekistan, Ph.: (99862)224-66-11, fax: (99862)224-67-00).

The abstract of the dissertation is sent out on «\_\_» \_\_\_\_\_ 2022.  
(Mailing report № \_\_\_\_\_ on «\_\_» \_\_\_\_\_ 2022).

**U.O. Kutliev**

Chairman of the scientific council on award of scientific degree, Doctor of Physical and Mathematical Sciences

**A.R. Matnazarov**

Scientific secretary of scientific council on award of scientific degree, Candidate of Physical and Mathematical Science, dotsent

**K.A. Ismaylov**

Chairman of scientific seminar under scientific council on award of scientific degree, Doctor of Physical and Mathematical Science, Professor

## INTRODUCTION (abstract of the PhD dissertation)

**Aim of the research work.** The aim of this dissertation is to study the stable configuration of low-atom metal clusters by minimizing energy, the formation of nanostructures in the process of deposition of metal clusters on the surface of metal crystals.

**Objects of the research work:** computer models of copper, silver, cobalt metal clusters and copper and silver crystals.

**The scientific novelty of the research is as follows:**

stable structures and configurations of low-atomic clusters (Ag, Cu, Co) were established, as well as the binding energies for each atom in them, the dependences of the binding energy on the number of atoms in silver, copper, cobalt clusters were determined;

bond lengths between atoms of copper, silver, cobalt clusters ( $\text{Cu}_n$ ,  $\text{Ag}_n$  and  $\text{Co}_n$ ,  $n=3-60$ ) and mixed  $\text{Cu}_n\text{Co}_1$  ( $n=2-9$ ) and  $\text{Cu}_n\text{Co}_2$  ( $n=2-8$ ) clusters were determined;

in the deposition of small silver clusters on the surface of copper crystals, it has been found that some atoms of the cluster penetrate between the surface layers, the small clusters become significantly deformed, and the depth of their penetration into the crystal increases with increasing cluster energy;

during the deposition of small clusters on the surface of copper crystals, it has been found that the cluster atoms penetrate into the crystal, and the depth of penetration depends on the energy and their size.

**Scientific and practical significance of research results.**

The scientific significance of the results is that they have allowed us to obtain the characteristic features of the processes of interaction of atoms and some low-atomic and polyhydric clusters with the surface of a solid, as well as to reveal the properties of interactions.

The obtained results have allowed analyzing the characteristics of the process of sedimentation of small clusters on the surface of crystals.

The research results obtained by mathematical modeling of the interaction processes of metal atoms and clusters can contribute to the development of new structural materials and modern elements of micro- and nanoelectronics and a number of applications of nanoengineering.

**Approval of research results.** The results of the dissertation were presented and discussed at 5 international and 1 national conferences.

**Publication of research results.** The results of the dissertation are presented in 9 scientific articles, of which 4 scientific articles, including 2 foreign and 2 articles published in journals recommended by the Higher Attestation Commission of the Republic of Uzbekistan for publication of the main scientific results of dissertations and computer software. 3 certificates of official registration of computer codes have been granted.

**The structure and scope of the dissertation.** The dissertation consists of introduction, four chapters, conclusion and a list of references, including 57 figures and 5 tables. The text of the dissertation consists of 112 pages.

**ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ**  
**СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ**  
**LIST OF PUBLISHED WORKS**

**I бўлим (Часть I, Part I)**

1. A.M. Rasulov, N.I. Ibrokhimov. Clusters Deposition on Surface an Atomic Scale Study by Computer Simulation Method // Journal of Applied Mathematics and Physics, No. 7, -pp. 2303-2314, 2019. [01.00.00, №6], Web of Science, Crossref, Google-Scholar, IF: 0.7.
2. R.A. Muminov, A.M. Rasulov, N.I. Ibrokhimov. Computer modeling thin film growth on the surface by low energy cluster deposition // Computational nanotechnology, No. 2, -pp. 160-163, 2019. [01.00.00, №60], Crossref, Google-Scholar, IF: 0.397.
3. N.I. Ibrokhimov, A.M. Rasulov, I.D. Yadgarov, M. T. Khalilov. Copper clusters: study of geometric structure using computer simulation // Karakalpak Scientific Journal, Vol. 4, Iss. 1, 2021. Google-Scholar.
4. А.М. Расулов, Н.И. Иброхимов, И.Н. Рахматшоев. Компьютерное моделирование процессов роста тонких пленок при осаждении металлических кластеров на поверхность кристаллов // Научно-технический журнал ФерПИ, Спец выпуск, стр. 16-23, 2019. [05. 00. 00, №20]. Google-Scholar.

**II бўлим (Часть II, Part II)**

1. Н.И. Иброхимов, А.М. Расулов, И.Д. Ядгаров. Моделирование малоатомных металлических кластеров серебра. Восьмая Международная конференция по Физической Электронике ИРЕС-8, Часть 1, стр. 47, сентября 2021 г, Ташкент.
2. Н.И. Иброхимов, А.М. Расулов, И.Д. Ядгаров. Моделирование малоатомных бинарных кластеров  $Cu_nCo_2$ . “Яримўтказгичлар физикаси, микро- ва наноэлектрониканинг фундаментал ва амалий муаммолари” I Халқаро анжуман материаллар тўплами, 144-146 бетлар, октябрь 2021 йил, Тошкент.
3. N.I. Ibrokhimov, A.M. Rasulov, I.D. Yadgarov, M. T. Khalilov. Computer simulation of low atomic metal clusters by the method of molecular dynamics. «Issues of innovative development of science, education and technology» International scientific and practical online conference, 2022 y, 12 april, Andijan.
4. А.М. Расулов, Н.И. Иброхимов. Моделирование осаждения кластеров  $Co_nAg_m$  на поверхности кристаллов Ag(100). Илмий-амалий конференция материаллар тўплами, 2019 йил. Қарши.
5. А.М. Расулов, Н.И. Иброхимов, И.А. Жўраев. Моделирование процессов формирования наноструктур на поверхность Ag(100). Материалы IV Международной конференции по Оптическим и фотоэлектрическим явлениям в полупроводниковых микро- и наноструктурах. Часть 1, стр.

47, мая 2018 г, Фергана.

6. А.М. Расулов, А.Х. Хайдаров, Н.И. Иброхимов, И.А. Жўраев. Компьютерное моделирование процесса роста тонкой плёнки. Седьмая Международная конференция по Физической Электронике IPES-7, Часть 1, стр. 199-201, мая 2018 г, Ташкент.
7. Н.И. Иброхимов, И.Д. Ядгаров, Х.И. Жабборов. Ихтиёрий кимёвий элементдан ҳосил қилинган кластернинг умумий энергиясини ва ҳар бир атом энергиясини ҳисоблаш дастури // Электрон ҳисоблаш машиналари учун яратилган дастурнинг расмий рўйхатдан ўтказилганлиги тўғрисидаги гувоҳнома DGU 11781, 01.06.2021 йил.
8. Н.И. Иброхимов, И.Д. Ядгаров, Х.И. Жабборов. Мис кристаллининг юзасига тушаётган кумуш кластернинг энергиясини аниқлаш дастури // Электрон ҳисоблаш машиналари учун яратилган дастурнинг расмий рўйхатдан ўтказилганлиги тўғрисидаги гувоҳнома DGU 12355, 06.08.2021 йил.
9. Н.И. Иброхимов, И.Д. Ядгаров, А.М. Расулов, Х.А. Эгамбердиев, М.А. Норбўтаев. Тўрт минг атомдан ташкил топган мис монокристаллининг бошланғич ва чегаравий шартларини аниқлаш дастури // Электрон ҳисоблаш машиналари учун яратилган дастурнинг расмий рўйхатдан ўтказилганлиги тўғрисидаги гувоҳнома DGU 12841, 05.10.2021 йил.

Автореферат “Til va adabiyot ta’limi” журналі таҳририятида таҳрирдан  
ўтказилди (29.07. 2022 йил).

Босмага рухсат этилди: 01.08. 2022 йил  
Бичими 60x84 1/16, “Times New Roman”  
гарнитурда рақамли босма усулида босилди.  
Шартли босма табоғи 3. 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, Қушбеги кўчаси, 6-уй.

