

**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**

**ЖАББОРОВ ХАЙИТМУРОД ИШМЎМИН ЎҒЛИ**

**ПАСТ ЭНЕРГИЯЛИ УГЛЕРОД ВА ВОДОРОД АТОМЛАРИНИНГ**  
**ЭРКИН ГРАФЕН СИРТИ БИЛАН ЎЗARO ТАЪСИРИ**  
**ЖАРАЁНЛАРИНИ КОМПЮТЕРДА МОДЕЛЛАШТИРИШ**

**01.04.04 – Физик электроника**

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

**Тошкент - 2022**

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори(PhD)  
диссертацияси автореферати мундарижаси**  
**Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD)  
диссертации**  
**Contents of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD)  
on physical-mathematical sciences**

**Жабборов Хайитмурод Ишмўмин ўғли**

Паст энергияли углерод ва водород атомларининг эркин графен сирти билан ўзаро таъсири жараёнларини компьютерда моделлаштириш.....

3

**Жабборов Хайитмурод Ишмўмин угли**

Компьютерное моделирование процессов взаимодействия атомов углерода и водорода низких энергий с поверхностью свободного графена.....

21

**Jabborov Khayitmurod Ishmumin o'gli**

Computer simulation of the interaction of low-energy carbon and hydrogen atoms with the surface of free graphene.....

38

**Эълон қилинган ишлар рўйхати**

Список опубликованных работ

List of published works.....

42

**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**

**ЖАББОРОВ ХАЙИТМУРОД ИШМЎМИН ЎҒЛИ**

**ПАСТ ЭНЕРГИЯЛИ УГЛЕРОД ВА ВОДОРОД АТОМЛАРИНИНГ**  
**ЭРКИН ГРАФЕН СИРТИ БИЛАН ЎЗАРО ТАЪСИРИ**  
**ЖАРАЁНЛАРИНИ КОМПЮТЕРДА МОДЕЛЛАШТИРИШ**

**01.04.04 – Физик электроника**

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

**Тошкент –2022**

Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида В2022.3.PhD/FM742 рақам билан рўйхатга олинган.

Диссертация ЎЗР ФА Ион-плазма ва лазер технологиялари институтида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб-саҳифасида (<http://iplt.uz/>) ҳамда «Ziyonet» Ахборот-таълим порталида ([www.ziyonet.uz](http://www.ziyonet.uz)) жойлаштирилган.

Илмий раҳбар:

Джуманов Жамолжон Худойкулович  
техника фанлари доктори, профессор

Расмий оппонентлар:

Максимов Сергей Евлантиевич  
физика-математика фанлари доктори, катта илмий ходим

Мурзаев Рамиль Тухфатович  
физика-математика фанлари номзоди, катта илмий ходим

Етакчи ташкилот:

Ислом Каримов номидаги Тошкент давлат  
техника университети

Диссертация ҳимояси Ион-плазма ва лазер технологиялари институти ҳузуридаги DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 рақамли Илмий кенгашнинг 2022 йил «27» декабр соат 14<sup>00</sup> даги мажлисида бўлиб ўтади (Манзил: 100125, Тошкент ш., Дўрмон йўли кўчаси, 33-уй. Тел./факс: (99871) 262-32-54, e-mail: [info@iplt.uz](mailto:info@iplt.uz), Ион-плазма ва лазер технологиялари институти мажлислар зали).

Диссертация билан Ион-плазма ва лазер технологиялари институтининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (10 рақами билан рўйхатга олинган). Манзил: 100125, Тошкент ш., Дўрмон йўли кўчаси, 33-уй. Тел./факс: (99871) 262-31-69.

Диссертация автореферати 2022 йил «15» декабр куни тарқатилди.

(2022 йил «15» декабр даги 10 рақамли реестр баённомаси).



Х.Б. Ашуров  
Илмий даражалар берувчи Илмий кенгаш раиси, т.ф.д., профессор

И.Д. Ядгаров  
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) диссертациясининг аннотацияси)

**Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати.** Жаҳонда углерод атомларидан ташкил топган икки ўлчовли (2D) материал графен билан атомларнинг ўзаро таъсири жараёнларини тадқиқ қилиш масалаларига алоҳида аҳамият берилмоқда. Ҳозирги кунда ривожланган мамлакатларда икки ўлчовли тузилиши ва ўзига хос ноёб физик-кимёвий хусусиятлари туфайли графен наноэлектроника, биологик муҳандислик, композит материаллар ёки энергия сақлаш соҳаларида ишлатилиши мўлжалланмоқда. Бу борада, графен билан водород ва углерод атомларининг ўзаро таъсири натижасидаги адсорбция ва графеннинг функцияллашув жараёнларини тадқиқ қилишга алоҳида эътибор қаратилмоқда.

Жаҳонда графен ва углеродли нанотубкалар янги углерод материаллари синфлари сифатида пайдо бўлмоқда ва қуёш панеллари учун оптик шаффоф электрон ўтказувчи пленкаларнинг янги авлоди учун муҳим қўшимчалар сифатида ишлатишга қаратилган илмий тадқиқотлар олиб борилмоқда. Ушбу йўналишда, жумладан графен ва углеродли наноструктураларни атомлар билан бомбардимон қилиш жараёнини моделлаштириш орқали янги юқори аниқликдаги наноматериаллар структураларини аниқлаш бўйича тадқиқотлар устивор ҳисобланмоқда. Шу билан бирга эркин графен сирти билан водород ва углерод атомларининг ўзаро таъсирининг динамик жараёнларини молекуляр динамика усули асосида моделлаштириш 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, водород ва углерод атомларининг графен билан ўзаро таъсири натижасида графен сиртидаги адсорбция, атомларнинг ўтиши, тўзғиш механизмларини аниқлаш муҳим ҳисобланади.

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 келади<sup>1</sup>. Диссертация бўйича олиб борилган тадқиқотлар 2015-йил 15-декабрда қабул қилинган "2011-2015 йилларда Ўзбекистон Республикаси саноатини ривожлантиришнинг устувор

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

йўналишлари тўғрисида" ги ПП-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.** Диссертация иши бўйича тадқиқотлар республика фан ва технологиялар ривожланишининг II. «Физика, астрономия, энергетика ва машинасозлик» номли устувор йўналишига мувофиқ амалга оширилган.

**Муаммонинг ўрганилганлик даражаси.** Турли хорижий илмий марказларда ушбу мавзу бўйича бир қатор муҳим илмий тадқиқотлар, шу жумладан углерод наноструктураларининг адсорбцион ва механик хусусиятларини олиш учун математик моделлаштириш усулларидадан фойдаланган ҳолда тадқиқотлар ўтказилди. Бу соҳада энг салмоқли натижаларга чет эллик олимлар E. Despiau-Pujo, A. Davydova, S. A. Bhuyan, X. Qin, W. Yan (Китай), F. M. Peeters, S. Yu. Davydov, S.V. Dmitriev, A.B. Елецкий, Ю.А. Баимова (Россия).

Ўзбекистонлик олимлар Балтенков А.С., Джурахалов А.А., Кутлиев У.О., Ядгаров И.Д., Алябьев Д.В.лар атом ва кластерларнинг углерод наноструктуралари билан ўзаро таъсирлашув жараёнларини ҳам назарий ҳам экспериментал усуллар билан ўрганишган.

Шу билан бирга, паст энергияли водород ва углерод атомларининг графен сирти билан ўзаро таъсири ва атомларнинг адсорбцияси, тўзғиши жараёнлари етарлича ўрганилмаган.

**Тадқиқотнинг диссертация бажарилган илмий-тадқиқот муассасасининг илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги.** Диссертация иши Ион-плазма ва лазер технологиялари институтида илмий-тадқиқот режалари доирасидаги қуйидаги лойиҳа мавзуларини бажариш мобайнида бажарилди: № ОТ-Ф2-46 «Углеродли нанотрубкалар ва фуллеренлар билан атом зарралари, электронлар ва фотонларнинг ўзаро таъсири жараёнини назарий тадқиқ этиш» (2016-2020 йй.),

**Тадқиқотнинг мақсади** водород ва углерод атомларининг графен билан ўзаро таъсирининг динамик ва водородлашмаган ва водородлашган углерод атомларининг графенга адсорбцияси жараёнларини ўрганишдан иборат.

**Тадқиқотнинг вазифалари:**

нанографендаги нуқсонларнинг нанографен атомлари ўртасидаги когезия энергиясига таъсирини аниқлаш;

графенда вакансия ва дивакансиялар мавжудлигининг углерод атомлари сочилишига, графен атомларининг тўзғишига, углерод атомларининг

адсорбциясига ва углерод атомларининг графендан ўтиши жараёнларига таъсирини аниқлаш;

графеннинг тўзғиши учун углерод атомларига керак бўладиган минимал кинетик энергиянинг атомлар тушиш бурчагига боғлиқлигини аниқлаш;

графен юзасига водородлашган ва водородлашмаган углерод атомларининг чўкиши (адсорбция) жараёнларини аниқлаш.

**Тадқиқот объектлари** сифатида водород, углерод, водородлашган углерод атомлари ва эркин графен олинган.

**Тадқиқот предмети** атомларнинг координаталари, тезликлари, боғланиш энергиялари ва графен ҳисобланади.

**Тадқиқотнинг усуллари.** Диссертация ишида углеродли структураларни ҳисоблаш учун оптималлаштирилган REBO ва AIREBO эмперик потенциаллари асосида классик молекуляр динамика методларидан фойдаланилган ҳолда сонли моделлаштириш методлари қўлланилди.

**Тадқиқотларнинг илмий янгилиги** қуйидаги натижалардан иборат:

нанографендаги углерод атомларининг ўртача когезия энергияси нуқсонлар сонининг кўпайиши билан монотон равишда камайиши аниқланди;

нанографенда вакансия кўринишидаги нуқсонларнинг мавжудлиги, асосан, сочилган атомларнинг адсорбцияси, ўтиши (нанографен орқали), тўзғиши жараёнларига сезиларли таъсир кўрсатиши аниқланди;

графеннинг тўзғиши учун керак бўладиган углерод атомларининг минимал кинетик энергиясининг (кресло ва зигзаг йўналишлари бўйлаб) атомлар тушиш бурчагига боғлиқлиги аниқланди;

графенда C, CH, CH<sub>2</sub> ва CH<sub>3</sub> хемосорбциясининг максимал эҳтимоли уларнинг чўкиш энергияси 2.3 эВ тенг бўлганида кузатилиши аниқланди;

водородланган углерод атомларини (CH, CH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>) нанографенга чўкиш жараёнларини таҳлил қилиш шуни кўрсатдики, бундай объектларнинг хемсорбцияси углерод атомларининг водородланиш даражасига тескари боғлиқ экан.

**Тадқиқотнинг амалий натижалари қуйидагилардан иборат:**

графен ва нанографен листларининг геометрик модели ишлаб чиқилган ва графендан водород ва углерод атомларининг сочилиши бўйича модель экспериментлари ўтказилган.

олинган натижалар атомларнинг сочилиш назариясига ва материалларнинг корпускуляр назариясига муҳим хисса қўшади.

олинган натижалар экспериментал олинган маълумотларни тўлдиради ва таҳлил қилишга ёрдам беради.

**Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги.** Масаланинг тўғри қўйилганлиги, узоқ вақтда ўзининг тўғрилигини кўрсатган кенг фойдаланиладиган математик методларнинг қўлланилганлиги, ҳисоблашлардаги асосий параметрларнинг (боғланиш энергияси) аниқлиги ва назорат қилиниш имкониятларининг мавжудлиги, жараёнларнинг экспериментал натижалар билан мос тушиши билан асосланади.

**Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.** Углерод наноструктуралари бўйича олинган тадқиқот натижаларини моделлаштиришда олинган натижалар билан солиштириш имкониятларининг мавжудлиги, углерод наноструктураларида атомларнинг сочилишида устувор жараёнлар (адсорбция, сочилиш, қайтиш) тўғрисида, сочилаётган атомлар энергия диапазонлари ва фазовий жойлашувларнинг ушбу структуралар модификацияларига таъсирини аниқлаш имконини беради.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти бу олинган маълумотлар ва юқорида айтиб ўтилган жараёнлар катталиклари сочилаётган атомлар дасталарининг углерод наноструктуралари билан ўзаро таъсири механизми ва жараёнларини чуқур тушуниш, сочилган атомларнинг бошқариладиган адсорбцияси имкониятларини баҳолаш имконини беради.

**Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши.** Графендан атом зарраларининг сочилиши ва адсорбцияси бўйича ўтказилган ҳисоблаш экспериментлари натижалари асосида:

C, CN, CH<sub>2</sub> ва CH<sub>3</sub> ларнинг графен сиртида хемосорбциясининг максимал эҳтимоллиги ва нанографендаги углерод атомлари ўртача боғланиш энергиясининг нуқсонлар сони ошиши билан камайишини кўрсатиш № Ф2-Ф2-Ф53 рақамли “A<sup>3</sup>B<sup>5</sup> ва A<sup>2</sup>B<sup>6</sup> плёнкаларнинг юзаси ва юза ости соҳаларида ҳосил қилинган икки қатламли наноўлчамли тизимларнинг квант ўлчамли эффектлари ва электрон ҳоссалари” мавзусидаги фундаментал лойиҳада фойдаланилган. (Тошкент давлат техника университетининг 2022-йил 28-июлдаги № 01/9-14-2153 сонли маълумотномаси); Илмий натижадан фойдаланиш наноўлчамли тизимлар ҳоссаларини ўрганиш ва физикавий фундаментал қонуниятларни ўзлаштириш имкониятини яратган;

углерод атомларининг графен сиртига тушиши натижасида графенинг чангланиши учун тушаётган атомларининг минимал кинетик энергиялари билан тушиш бурчаклари орасидаги боғланишни аниқлаш № ОТ-Ф2-52 рақамли “Рух оксиди нанородлари ва нанозарралари сиртининг турли материаллар ва ташқи атмосфера билан ўзаро таъсир механизмларининг оптик ва электрофизик хоссаларини тадқиқ этиш” мавзусидаги фундаментал лойиҳада фойдаланилган. (Ўзбекистон Республикаси Фанлар Академиясининг 2022-йил 29-августдаги № 2/1255-2098 сонли маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш нанотруктурали материалларни синтез қилишда нуқсонларнинг ҳосил бўлиши механизмларини самарали таҳлил қилиш ва баҳолаш имконини берди.

**Тадқиқот натижаларининг апробацияси.** Тадқиқотнинг асосий натижалари 7 та илмий-амалий конференцияларда, шу жумладан 5 та халқаро ва 2 та республика миқёсидаги илмий-амалий конференцияларда муҳокама қилинган.

**Тадқиқот натижаларининг эълон қилиниши.** Диссертация мавзуси бўйича олинган натижалар 15 та илмий ишда чоп этилган, шу жумладан 6 та илмий мақолалар Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссияси томонидан тавсия этилган журналларда, шуларнинг 1 таси чет эл журналида

нашр этилган ва 2 та ЭҲМ учун дастурни рўйхатдан ўтказиш бўйича муаллифлик гувоҳномаси олинган.

**Диссертация ҳажми ва тузилиши.** Диссертация таркиби кириш, тўртта боб, хулосалар, илова ва фойдаланилган адабиётлар рўйхатидан иборат. Диссертация ҳажми 105 бетни ташкил қилиб ўз ичига 41 та расм ва 9 та жадвални олган.

## ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

**Кириш** қисмида тадқиқот мавзусининг долзарблиги очиб берилади, тадқиқотнинг мақсад ва вазифалари шакллантирилади, тадқиқот объекти ва предмети тавсифланади, танланган тадқиқот объектларининг долзарблиги ҳақида қисқача маълумот берилади, тадқиқотнинг фан ва технологияларни ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мувофиқлиги. Республика кўрсатилади, тадқиқотнинг илмий янгилиги ва амалий натижалари берилади, илмий ва амалий аҳамияти, олинган натижаларнинг амалга оширилиши очиб берилади. Диссертациянинг тузилиши баён этилган ва диссертация тадқиқоти мавзуси бўйича чоп этилган ишлар сони ҳақида маълумот берилган.

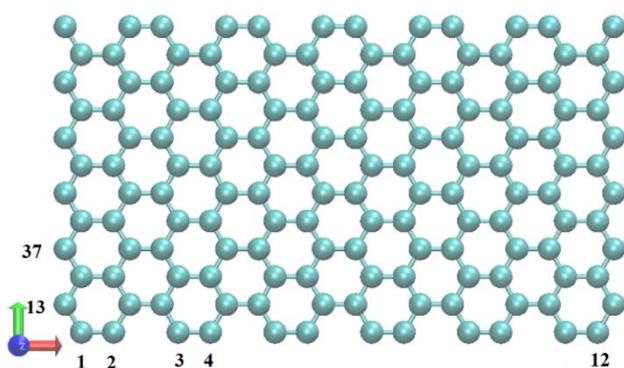
Диссертациянинг «**Диссертация мавзуси бўйича адабиётлардаги манбалар таҳлили**» деб номланувчи биринчи бобида графеннинг умумий тавсифи келтирилган. Атомларнинг графен билан ўзаро таъсирини компютерда симуляция қилиш бўйича адабиётлар таҳлили шуни кўрсатадики, графенни ўрганиш қаттиқ жисмлар физикасининг энг муҳим вазифаларидан бири ҳисобланади. Графен кўплаб илғор саноат тармоғларига жуда мос келадиган ноёб материал. Графенни янада долзарб материалга айлантириш учун графен ишлаб чиқариш, хоссалари билан боғлиқ турли жиҳатларни янада чуқурроқ ўрганиш керак.

Адабиётлар таҳлилидан кўришиб турибдики, атомларнинг графен билан ўзаро таъсири бўйича бир қатор назарий ва экспериментал ишлар мавжудлигига қарамай, адсорбция, атомлар сочилиши, тўзғиш, ўтиш ва атомларнинг графен билан боғланиши механизмлари ҳақида етарлича тушунча йўқ.

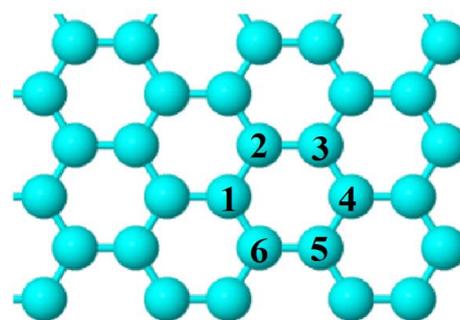
**“Паст энергияли водород атомларининг графен билан ўзаро таъсирини компютерда моделлаштириш усуллари”** номли иккинчи бобида физик жараёнларни моделлаштиришда асосий ёндашувлар, ҳисоблашларни моделлаштириш учун қисқача маълумот берилган. Молекуляр динамика пакет дастури LAMMPS ҳақида қисқача маълумот, шунингдек, ўзаро таъсир потенциаллари, даврий чегара шартлари, ансамбллар ва термостатлар ҳақида маълумотлар келтирилган. Нютон тенгламалари асосида атом-молекуляр тизимларни ҳисоблашнинг классик алгоритмларининг қисқача тавсифи баён қилинган. Модел тизимини яратиш кетма – кетлиги, бошланғич ва чегаравий шартларни белгилаш (ўзаро таъсирнинг модел потенциалини танлаш, структура атомларининг бошланғич координаталарини, структуранинг

температурасини, атомларнинг бошланғич тезлигини, даврий чегара шартларини белгилаш) қисқача тавсифланган.

**“Графендан водород ва углерод атомларининг сочилишини компьютерда моделлаштириш”** номли учинчи бобида нуқсонларнинг компьютер моделлаштиришлари келтирилган. Нанографен битта текисликда ётувчи (1-расм) ва графен учун  $2.46 \text{ \AA}$  панжара доимийли 144 атомли углерод атомларидан иборат конфигурацияси моделлаштирилди (атомларни рақамлаш куйидан бошлаб, чапдан ўнгга). Графендаги атомларнинг ўртача боғланиш энергияси  $6.81 \text{ эВ}$  га тенг. Мавжуд нуқсонлар графен структурасидан углерод атомларини кетма-кет олиб ташлашдан кейин ҳосил бўлувчи нуқтавий бўш ўринлар комбинацияси сифатида моделлаштирилган. Нуқтавий нуқсон куйидагича моделлаштирилган: атомларнинг бўш ўринлари кетма-кет равишда олти бурчакли графен гексагонини қамраб олади ва уларнинг сони 1 дан 6 гача бўлади (2-расмдаги 1 дан 6 гача рақамланган графен атомларига қаранг.)



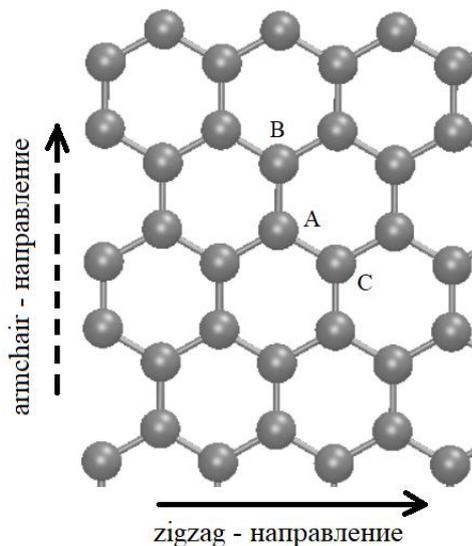
**1-расм.** Нанографен битта текисликда ётувчи ва графен учун  $2.46 \text{ \AA}$  панжара доимийли 144 атомли углерод атомларидан иборат конфигурацияси моделлаштирилди (атомларни рақамлаш куйидан бошлаб, чапдан ўнгга).



**2-расм.** Идеал графен панжарасининг бўлаги, ундаги “рақамланган” атомлар кетма-кет олиб ташлашдан кейинги нуқтавий нуқсонларни кўрсатади.

Шуни таъкидлаш керакки, бизнинг натижаларимизга кўра, нанографенда нуқсонлар вужудга келган бўлса-да, нанографеннинг олти бурчакли тузилиши етарлича сақланиб қолган. Қонуниятларга зид бўлмаган равишда, атомлар деярли силжимаган. Вакансиялар ва дивакансияларнинг графендаги углерод атомларининг силжишига таъсири кўриб чиқилди. Ясси олти бурчакли структурадаги 112 углерод атомидан ташкил топган тўртбурчаклар шаклидаги нуқсонсиз графеннинг молекуляр модели ушбу структуранинг текислиги бўйлаб чегара атомларига даврий шартлар ўрнатилиши билан қурилган. Графен молекуляр моделининг мувозанат тузилиши ва унга мос келадиган когезия энергияси энергияни минималлаштириш усулидан фойдаланиб олинган, унга кўра, энг яқин атомлар орасидаги масофа 1.42 ангстрем (Å) ва ҳар бир графен атомининг  $E_h$  когезия энергияси 7.395 эВ.

Вакансия графендан битта атомни олиб ташлаш билан характерланади ва дивакансия энг яқин иккита атомни олиб ташлаш сифатида белгиланди, шу билан бирга *armchair* йўналиши бўйлаб иккита атомни олиб ташлаш (дивакансия кейинчалик а-дивакансия деб аталади) ва *zig-zag* йўналиши бўйлаб (z-дивакансия). а-дивакансия ва z-дивакансия нуқсонлари таркибий жиҳатдан бир-бирига ўхшашдир ва углерод атомларининг тушиш йўналишига қараб фарқланади (3-расмга қаранг).



**3-расм.** Вакансия (атом А), а-дивакансия (А ва В атомлари), z дивакансиялари (А ва С атомлари) ва йўналишларини ҳосил қилиш учун кўрсатилган ажратиб олинган атомлари билан нуқсонсиз графен бўлаги: *armchair* ва *zig-zag* йўналишлари. Кўрсатилган *zig-zag* йўналиши углерод атомларининг сирпаниб тушиш йўналишидир.

Тегишли атомлар олиб ташланганидан сўнг, вакансия ва дивакансия мавжуд бўлганда мувозанат тузилмалари ва когезия энергиясини топиш учун энергияни минималлаштириш усули яна қўлланилди. Вакансия мавжуд бўлганда, вакансияга энг яқин учта атомда  $E_h=4.917$  эВ, 14 атомда когезия энергияси 0.01 эВ дан кўпроқ, қолганларида эса 0.01 эВ дан камроққа ўзгарганлиги, бутун структуранинг когезия энергиясининг умумий пасайиши 7.526 эВ га тенг бўлди. Дивакансия мавжуд бўлганда, унга энг яқин тўртта

атом  $E_h=4.917$  эВ га эга, 13 атомда когезия энергияси 0.01 эВ дан кўпроқ, қолган атомларда эса 0.01 эВ дан камроққа ўзгарди, бутун структуранинг когезия энергиясининг умумий пасайиши 10.048 эВ га тенг.

Эътиборли томони, вакансия мавжуд бўлганда, бутун тузилишнинг умумий когезия энергиясининг пасайиши графендаги битта углерод атомининг  $E_h$  га тенг бўлади ва дивакансия мавжуд бўлганда, бу пасайиш кичикроқ бўлади; шунинг учун битта графен билан дивакансия икки вакансияга эга графенга қараганда барқарорроқ.

Вакансия ва дивакансияларнинг мавжудлиги натижасида графеннинг чангланиши ва адсорбцияси кузатилади (1-жадвалга қаранг). Сочилаётган атомлар графен сиртида адсорбция атомларини (адатомлар) ҳосил қилади. Тушаётган атомлар вакансия ва дивакансияларнинг борлиги сабабли графендан ўтиш ёки айрим ҳолларда ортга сочилиш кузатилади. Нуқсонсиз графенда тушаётган углерод атомларининг графендан ўтиши, чангланиш, адсорбция жараёнлари кузатилади. Шунингдек, вакансия ва дивакансияларнинг борлиги сабабли бундай жараёнларнинг эхтимоллиги ортиб боради.

Жадвал №1

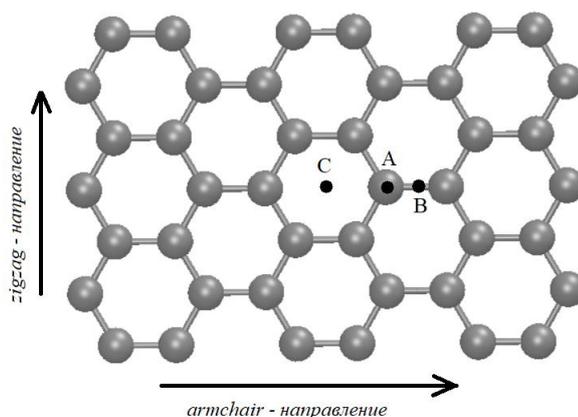
Нуқсонсиз, вакансия ва дивакансияли графендан 43,5 эВ энергия ва 22° бурчак остида углерод атомларининг сочилиши натижалари

Нуқсон турлари	Углерод атомлари сони			
	Графен атомларининг чангланиши	Графен билан боғланиш	Графендан ўтган атомлар	Графендан сочилишган атомлар
нуқсонсиз	0	0	0	100
вакансия	9	28	4	68
а-дивакансия	4	39	6	55
z-дивакансия	8	17	31	52

1-жадвал шуни кўрсатадики, вакансиялар, дивакансиялар мавжудлиги ва дивакансия жойлашувининг сирпанувчи бурчаклар билан тушаётган углерод атомлари йўналишига мослиги чангланиш, чўкиш, графен орқали ўтиш ва ортга сочилиш жараёнларига сезиларли таъсир қилади.

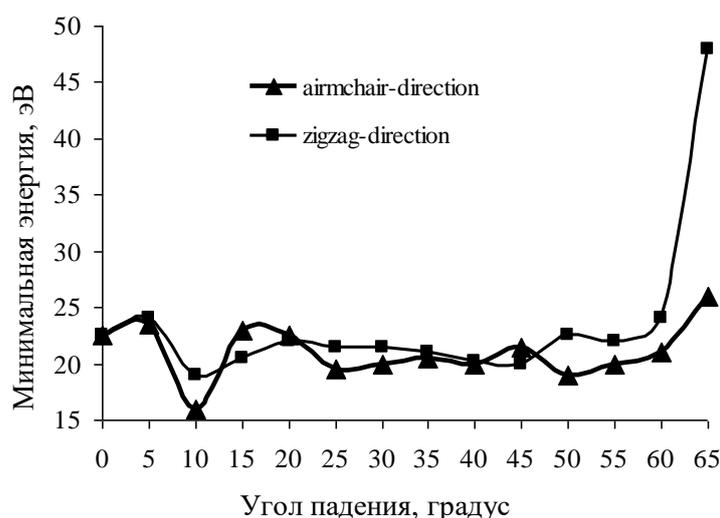
Графеннинг сочилиши учун углерод атомларининг минимал кинетик энергиясининг тушиш бурчагига боғлиқлиги кўриб чиқилди. Ясси гексогонал ўлчамдаги 112 углерод атомларидан иборат тўртбурчак графеннинг молекуляр модели ушбу структуранинг текислиги бўйлаб чегара атомларига даврий шартлар қўйиш билан қурилган. REBO потенциали углерод тузилмаларини яхши тасвирлайди. 300 К гача қиздирилган графеннинг молекуляр модели олингандан сўнг, графеннинг тўзғиш жараёнлари ва бу углерод атомининг

графенга тушиш бурчагига ва тўзғиш учун зарур бўлган тегишли минимал кинетик энергияга боғлиқлиги ўрганилди. Тўзғиш графен таъсирида унинг атомларидан бирининг йўқолиши билан тавсифланади. Агар углерод атоми графеннинг танланган жойларига, хусусан: графен атомига, иккита энг яқин графен атомлари орасидаги ўрта нуқтага ёки олти бурчакли гексагоннинг геометрик ўрта нуқтасига тушса, маълум бурчакларда тўзғиши мумкин (4-расм). Танланган графен жойларига боғланмаслик учун, биз ҳар бир энергия қиймати учун графен юзасидаги тасодифий танланган нуқтада 100 та углерод атомларини олдик ва бу ёндашув лаборатория тажрибаларига мос келади. Биринчидан, графеннинг тўзғиши учун минимал кинетик энергия графен углерод атомининг тўғри бурчак остида сочилиши аниқланди ва бу энергия 22.5 эВ га тенг. Кейин,  $90^\circ$  градусдан ўлчаганда тушиш бурчаги  $\beta$  ни графенга хос бўлган икки йўналиш бўйлаб  $5^\circ$  қадам билан  $5^\circ$  дан  $65^\circ$  гача ўзгартирилди: armchair ва zig-zag (4-расмга қаранг).



**4-расм.** Танланган нуқталар билан графеннинг бўлаги: А - графен атоми, Б - иккита энг яқин графен атомлари орасидаги ўрта нуқта ва С - олти бурчакли гексагонни геометрик ўрта нуқтаси.

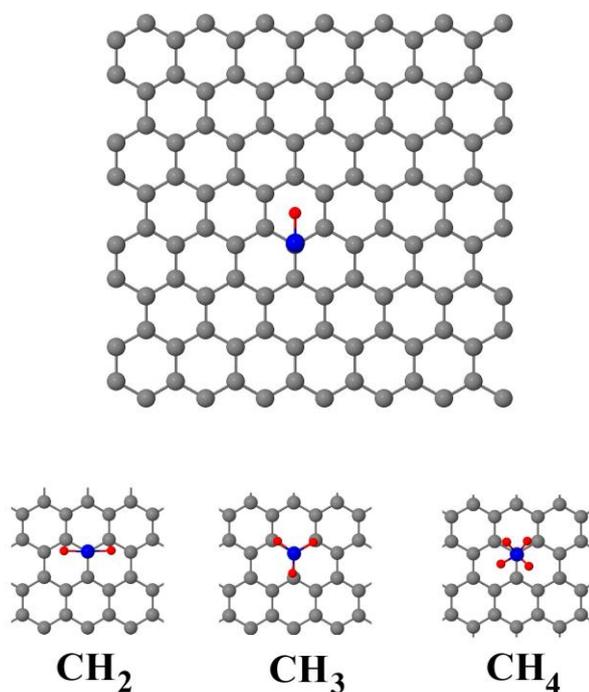
Ҳар бир тушиш бурчагида тушган углерод атомлари энергиясининг ўзгариш босқичи 0.5 эВни ташкил этди, графеннинг сочилиши бошланадиган энергия қиймати танланди ва бу энергия куйида  $E_{a,z}(\beta)$ , сифатида белгиланган минимал энергия ҳисобланади. Бу ерда  $\beta$  бурчакнинг тушишини билдиради ва индекслардан бири бу йўналиш номининг биринчи ҳарфи билан тушиш йўналишини кўрсатади. Ушбу минимал энергия тушиш бурчагига боғлиқ. 5-расм.



**5-расм.** Графеннинг тўзгиш учун углерод атомларининг минимал кинетик энергиясининг мос равишда учбурчаклар ва квадратлар билан белгиланган armchair ва zig-zag йўналишлари бўйлаб тушиш бурчагига боғлиқлик графиги.

5-расмдан кўриниб турибдики, armchair ва zig-zag йўналишлари учун тўзгиш учун минимал энергия минимум нуктаси мавжуд, бу  $10^\circ$  га мос келади, лекин кресло йўналиши учун янада аниқроқ айтадиган бўлсак,  $5^\circ$  ва  $10^\circ$  орасидаги фарқ  $E_a(5^\circ) - E_a(10^\circ) = 7.5$  эВ ва зигзаг учун фарқ  $E_z(5^\circ) - E_z(10^\circ) = 5$  эВ. Умуман олганда,  $E_a(\beta)$  ва  $E_z(\beta)$  йўналишлар бир-биридан фарқ қилса-да,  $5^\circ$  дан  $60^\circ$  гача ўзгарганда тушиш бурчагига камроқ боғлиқдир. Тўғри бурчакдан ўлчанганда  $70^\circ$  дан  $90^\circ$  гача бўлган тушиш бурчаклари (яъни, графен юзасидан ўлчанган бўлса,  $0^\circ$  дан  $30^\circ$  гача) одатда сирпанувчи бурчаклар деб аталади ва одатда тўзгиш учун ишлатилмайди. Хулоса қилиш мумкинки,  $E_z(65^\circ)/E_a(65^\circ) = 1.85$ , бу графен атомларининг armchair йўналиши қараганда zig-zag йўналиши бўйлаб углерод атомлари зичроқ жойлашганлиги ва шунинг учун тўзгиш жараёни учун кўпроқ энергия талаб этилади.

Диссертациянинг **тўртинчи бобида** водород ва углерод атомларининг графендан сочилишини компютерда моделлаштириш, водородланган ва водородланмаган углерод атомларининг графенга чўкиш таъсирини ўрганиш натижалари келтирилган. Дастлабки структуралар VMD дастури ёрдамида куриб олинди. Ҳисоб-китобларда углерод ва водород-углерод тузилмаларини жуда яхши тавсифлай оладиган иккинчи авлод Brenner потенциали (REBO) ишлатилган. Углерод атомининг турли даражадаги водородланиш даражасига эга бўлган компютер моделлари, яъни метин  $\text{CH}$ , метилен  $\text{CH}_2$ , метил  $\text{CH}_3$  ва метан  $\text{CH}_4$  молекулалари курилган. Графенга адсорбцияланган молекулалар б-расмда келтирилган. Компьютер моделлаштиришга кўра метиндаги атомлар орасидаги масофа  $1.09 \text{ \AA}$ , водород атомининг когезия энергияси  $2.263$  эВ.

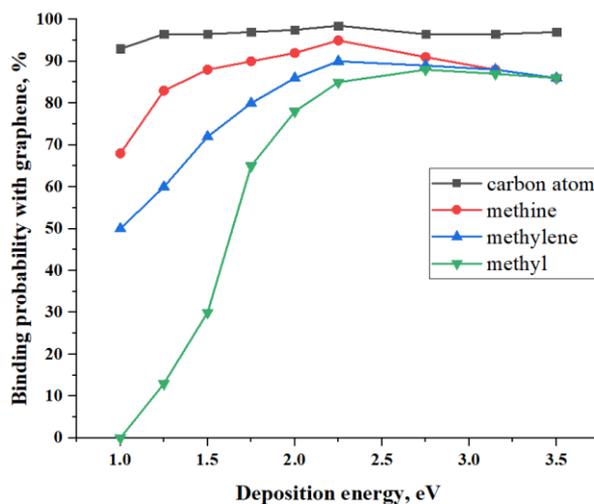


**Расм.6.** Метиннинг графен ячейкасига чўкиш жараёни. Метилен, метил ва метан билан графен ячейкасининг бир қисми. Кулранг доиралар графен углерод атомлари; қизил доиралар водород атомлари, кўк доира эса молекулалардаги водород атоми.

Метиленда водород атомлари углерод атомининг қарама-қарши томонларида углерод атомидан  $1.105 \text{ \AA}$  масофада бир хил чизикда жойлашган, углерод атомининг когезия энергияси  $2.117 \text{ эВ}$  ни ташкил этади. Метил ўртада углерод атоми ва бурчакларида водород атомлари бўлган текис тўғри чизикли учбурчак. Углерод ва водород атомлари орасидаги масофа  $1.093 \text{ \AA}$ , водород атомининг когезия энергияси эса  $2.229 \text{ эВ}$  ни ташкил этади. Метан тўғри чизикли қаттиқ тетраэдр бўлиб, ўртада углерод атоми ва бурчакларида водород атомлари жойлашган. Углерод ва водород атомлари орасидаги масофа  $1.089 \text{ \AA}$  га ва водород атомининг когезия энергияси  $3.637 \text{ эВ}$ . Водородланган молекулаларининг компьютер моделларини қурилгандан сўнг  $\text{CH}$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_4$  нуқсонсиз графен структурасини  $300 \text{ K}$  гача қиздирилади ва графен юзасида водородланган ва водородланмаган углерод атомларини  $1.0$ ,  $1.2$ ,  $1.5$ ,  $2.3$  ва  $3.1 \text{ эВ}$  кинетик энергияларида чўкиш амалга оширилди. Ушбу жараён хона ҳароратида статистик бўлганлиги сабабли, ҳар бир чўкиш энергиясида графенга ётқизилган молекуланинг жойлашиши  $100$  марта ўтиш билан текширилди. Молекуланинг чўкиш жараёни тасодифийдир.  $\text{CH}$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_4$  молекулаларининг графенга нисбатан дастлабки йўналиши ҳам тасодифий равишда ўрнатилди.

Компютер моделлаштириш натижаларига кўра углерод, метан, метилен ва метилнинг битта атомининг боғланиш энергияси  $1 \text{ эВ}$  дан ошади. Бу хемосорбсияга тўғри келади, яъни зарраларининг жуфтлашмаган валент электронлари ва нуқсонсиз графен туфайли кимёвий боғланишлар ҳосил бўлади. Метаннинг жуфтлашмаган валент электронлари йўқ ва унинг графенга хемосорбсияси ўрганилган ва чўкиш энергия каторида кузатилмайди.

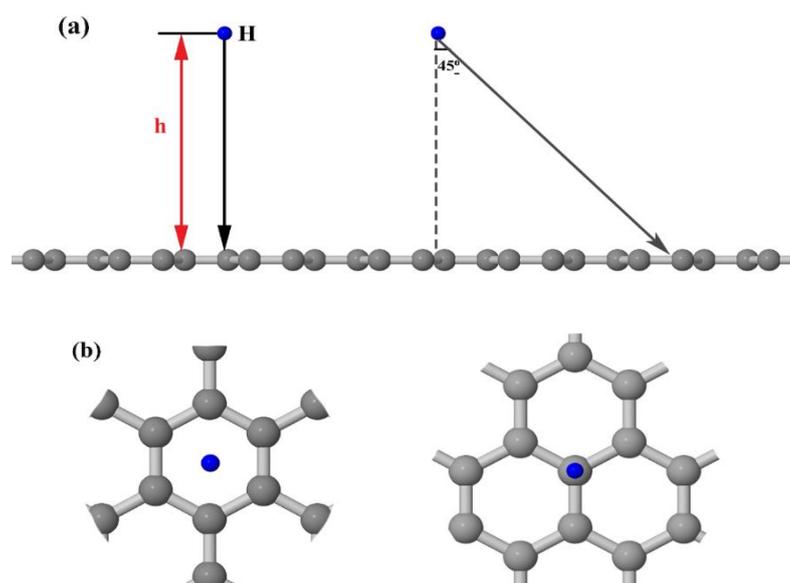
Метаннинг 1 эВ дан кам боғланиш энергиясида физик адсорбцияланиш эҳтимоли функционал зичлик назарияси усулларида батафсил муҳокама қилинди. C, CH, CH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub> чўккан зарраларнинг боғланиш эҳтимоли боғлиқликлари 7-расмда келтирилган. Кўришиб турибдики, бу боғлиқликлар чўкиш энергияси билан 2.3 эВ гача ошиб боради ва углерод атомининг водородланиш даражасига боғлиқ; водородланиш даражаси қанчалик катта бўлса, боғланиш эҳтимоли шунчалик кам бўлади.



**Расм.7.** Чўкиш энергиясининг функцияси сифатида атом/молекуланинг графенга боғланиш эҳтимоли.

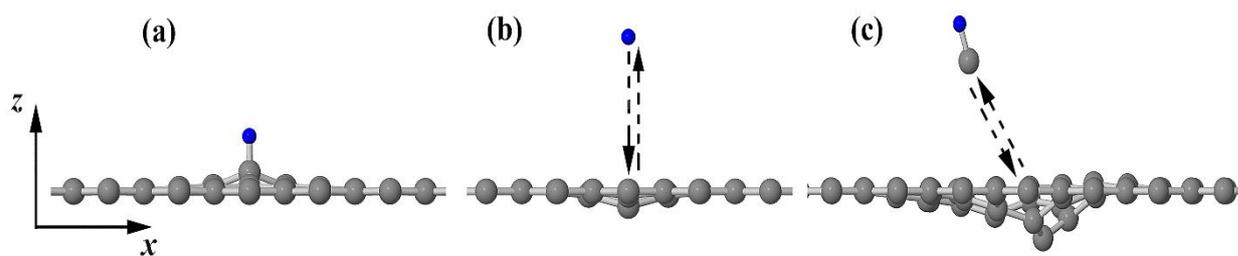
Шундай қилиб, молекуляр динамика усули ёрдамида водородланган ва водородлашмаган углерод атомларининг нуқсонсиз графенга чўкиши углерод атомларининг водородланиш даражасига боғлиқлиги аниқланди. Углерод атомининг водородланиш даражаси қанчалик юқори бўлса, унинг графендаги хемосорбсияси эҳтимоли шунчалик паст бўлади. Метан тўлиқ водородланган углерод атоми сифатида 1 дан 3.1 эВ гача бўлган ораликда чўкиш энергияси графенда хемосорбсияга учрамайди.

Графен ҳарорати ва тушиш бурчагининг графенга кам энергияли водород атомларининг сочилиш жараёнига таъсири кўриб чиқилди. Симуляция эмперик атомлар орасидаги таъсир потенциали AIREBO билан эркин кенг тарқалган LAMMPS дастурий пакет (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) ёрдамида амалга оширилди. LAMMPS-бу жараёнларни моделлаштиришга қаратилган классик молекуляр динамика асосидаги ҳисоблаш пакет дастури. AIREBO потенциали графендаги C–C ва C – H боғланишларни ҳамда ўзаро боғлиқ бўлмаган C–C ва C–H таъсирини тавсифлаш учун ишлатилади. 100 × 100 Å ўлчамдаги графен структураси 3936 углерод атомидан иборат бўлиб, улар олти бурчакли ясси гексагон учларида бир-биридан 1.42 Å масофада жойлашган. Даврий чегара шартлари учта йўналиш бўйлаб қўлланилган. Бундан ташқари, x ва y ўқлари бўйлаб, симуляция вақти-вақти билан шундай такрорланганки, чексиз графен варағи кўпайтирилади. z йўналишида даврий панжара водород атомининг қандайдир баландликдан тушишига имкон берадиган даражада катта танланган.



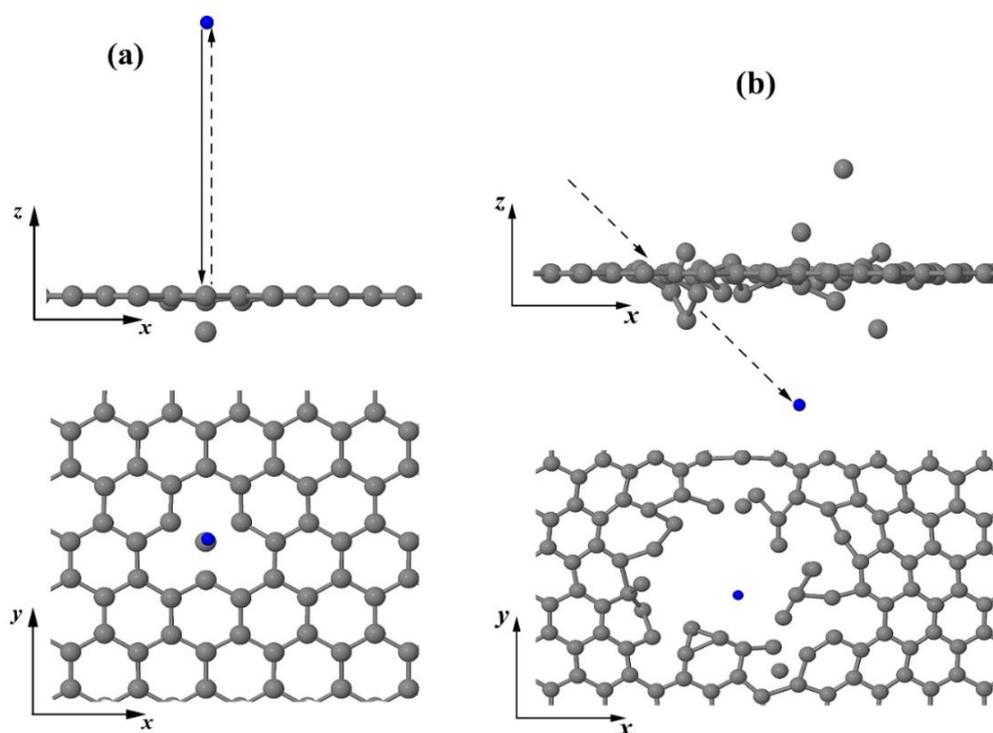
**8-расм.** (а) Графен структурасига тўғри бурчак остида ( $90^\circ$ ) ва  $45^\circ$  бурчак остида тушаётган водород атомининг схематик тасвири; (б) тушаётган водород атомининг нишон нуктаси: гексагон марказида ва графен структурасидаги углерод атомининг устида.

8а-расмда водород атомининг графен юзасига икки хил бурчак остида тушиш йўналиши схематик кўрсатилган:  $90^\circ$  ва  $45^\circ$ . 8б-расмда гексагон марказига ёки углерод атоми устига тушган водороднинг нишон нуктаси кўрсатилган. Графен юзасидан водород атомигача бўлган масофа  $h = \{10, 20\}$  Å. Атом энергиялари 1 эВ кадам билан 0.1 эВ дан 500 эВ гача танланган. Структура учун NVE микроканоник ансамблидан фойдаланилди ва жараён графен учун 0, 300 ёки 600 К ҳароратгача киздирилди. Симуляция пайтида водород Н атомлари 1 пс дан 10 пс гача бўлган вақт оралиғида графенга таъсирлашди. Бу ерда водород атомининг графен варағи билан ўзаро таъсири жараёни ўрганилди, турли натижалар олинди. Бунда графен варағидаги адсорбция, водород атомининг графен сиртига таъсирида структурада бузилиш билан ўтиши, водород атомининг графен юзасидан қайтиши ва графен структурасини бузилиши кузатилди. Симуляция конфигурациялари JMOE дастури ёрдамида визуаллаштирилди. 9-расмда водород атоми графен сиртига  $90^\circ$  ва  $45^\circ$  бурчак остида водород атоми турли хил энергияларда тушиш жараёни келтирилган. Водород атомларининг углерод атоми устидаги нишон нуктаси бўйлаб 1.5 эВ дан 4.5 эВ гача бўлган энергия оралиғида адсорбцияланиш жараёни, 9а-расмда водород атоми графен структурасига  $45^\circ$  бурчак остида тушганда адсорбция жараёни иккала нишон нукталарида ҳам кузатилмаслиги аниқланди.



**Расм. 9.** (а) – тўғри бурчак остида адсорбцияланиш жараёни; (б) – тўғри бурчак остида водороднинг ортга қайтиш жараёни; (с) -  $45^\circ$  бурчак остида 25 эВ энергияда адсорбцияланиш билан ортга қайтиш жараёни. Кулранг доиралар-углерод атомлари; кўк-водород атомлари;

Ҳисоблаш натижаларига кўра графенга  $0^\circ$  бурчакда тушиши билан водород атомининг ортга қайтиш жараёни 4.6 эВ дан 56.7 эВ гача бўлган энергия оралиғида кузатилди (расм. 9б). 25 эВ энергияга эга бўлган водород атомининг  $45^\circ$  бурчак остида тушишида адсорбция билан қайтиш жараёни биргаликда кузатилган (расм. 9с). Натижаларнинг таҳлили шунни кўрсатдики, графен структурасида бузилиш жараёни 57 эВ дан 500 эВ гача энергиялар оралиғида графен атоми устидаги нишон нуқталарида водород атомларининг  $90^\circ$  ва  $45^\circ$  бурчакда тушиши билан кузатилган (10 а,б-расм), аммо водород атомлари  $45^\circ$  бурчакка тушганда нишон нуқтаси гексагон марказида графен тузилишининг бузилиши аниқланмади.



**Расм.10.** Визуал тасвирлар: (а) – водород атоми тўғри бурчак остида тушганда графенда бузилиш жараёни; (б) -  $45^\circ$  бурчак остида тушганда бузилиш + ўтиш жараёни.

Водород атомлари графен сиртига нормал  $90^\circ$  бурчак остида тушганда, хароратнинг адсорбция, қайтиш, графен структураси бузилиши жараёнларига таъсири

Температура, К	Адсорбция жараёни учун энергия оралиғи, эВ	Қайтиш жараёни учун энергия оралиғи, эВ	Бузилиш жараёни учун энергия оралиғи, эВ	Фарқ, %
0	1.5 ÷ 4.5	4.6 ÷ 56	56.2 ÷ 500	10.5
300	1.7 ÷ 4.1	1.8 ÷ 73	73.1 ÷ 500	8
600	1.8 ÷ 3.7	1.9 ÷ 77	2 ÷ 500	17

Ҳисоблашлар асосида водород атомларининг графен сиртидаги адсорбцияси қайтиши ва графен структурасининг бузилиши жараёнларига хароратнинг таъсири 1-жадвалда келтирилган.

## ХУЛОСА

1. Нанографен структурасидаги чеккадаги атомларнинг олиниши, ушбу структуранинг турғун ҳолатига жиддий таъсир этмаслиги аниқланган. Ҳисоблашларга асосан нуқсонли нанографеннинг гексогонал структураси етарлича сақланиб қолганини ва атомларнинг силжиши кузатилмаган.

2. Вақансия ва дивакансияларнинг мавжудлиги шунингдек, дивакансия ориентациянинг сирпанувчи бурчаклар билан тушаётган углерод атомлари йўналишига мослиги углерод атомлари сочилиши, чўкиши, графен орқали ўтиши ва тесқари сочилиши жараёнларига сезиларли таъсир кўрсатиши аниқланди.

3. Графеннинг тўзғиши учун углерод атомларининг минимал кинетик энергиясининг атомлар (armchair ва zigzag бўйлаб) тушиш бурчагига боғлиқлиги аниқланди.

4. Углерод атоми, метин, метилен ва метилнинг графен билан боғланиш энергияси 1 эВ дан ортиқ эканлиги аниқланди. Бу кимёсорбцияга тўғри келади, яъни кимёвий боғланишлар тушаётган зарраларининг жуфтланмаган валент электронлари ва нуқсонсиз графен томонидан ҳосил бўлади.

5. Водородланган ва водородланмаган углерод атомларининг нуқсонсиз графенга чўкиш жараёнлари углерод атомларининг водородланиш даражасига боғлиқлиги аниқланди. Углерод атомининг водородланиш даражаси қанчалик юқори бўлса, унинг графенда хемосорбсияланиш эҳтимоли шунчалик паст бўлиши кўрсатилди.

6. Графенда C, CH, CH<sub>2</sub> ва CH<sub>3</sub> хемосорбциясининг максимал эҳтимоли уларнинг чўкиш энергияси 2.3 эВ бўлганида аниқланди.

7. Водород атомлари графен структурасига 45° бурчак остида тушганда иккала нишон нуқтасида ҳам адсорбция жараёни кузатилмаслиги аниқланди. Графенга нормал тушиш пайтида водород атомининг қайта сочилиши жараёни 4.6 эВ дан 56.7 эВ гача бўлган энергия оралиғида кузатилди. Натижалар таҳлили шуни кўрсатдики, графен структурасидаги бузилиш жараёнлари 57 эВ дан 500 эВ гача энергия оралиғида графен атоми устидаги нишон нуқталари бўйлаб водород атомларининг тушиши пайтида кузатилди.

**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**

**ЖАББОРОВ ХАЙИТМУРОД ИШМУМИН УГЛИ**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ УГЛЕРОДА И ВОДОРОДА НИЗКИХ  
ЭНЕРГИЙ С ПОВЕРХНОСТЬЮ СВОБОДНОГО ГРАФЕНА**

**01.04.04 – Физическая электроника**

**АВТОРЕФЕРАТ**

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

**Ташкент - 2022**

Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за номером B2022.3.PhD/FM742.

Докторская диссертация выполнена в Институте ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А. Арифова.

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещен на веб-странице Научного совета ([www.iplt.uz](http://www.iplt.uz)) и на Информационно-образовательном портале «Ziyonet» ([www.ziyonet.uz](http://www.ziyonet.uz)).

- Научный руководитель:** Джуманов Жамолжон Худойкулович  
доктор технических наук, профессор
- Официальные оппоненты:** Максимов Сергей Евлантьевич  
доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник
- Мурзаев Рамиль Тухфатович  
кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник
- Ведущая организация:** Ташкентский государственный технический университет имени Ислама Каримова

Защита диссертации состоится «27» декабря 2022 года в 14<sup>00</sup> часов на заседании Научного совета DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 при Институте ионно-плазменных и лазерных технологий АНРУз. (Адрес: 100125, г.Ташкент, улица Дўрмон, д. 33. Тел./факс: (+99871) 263-32-54, e-mail:info@iplt.uz, зал заседаний Института ионно-плазменных и лазерных технологий.)

Диссертация зарегистрирована в Информационно-ресурсном центре Института ионно-плазменных и лазерных технологий (регистрационный номер № 10), с диссертацией можно ознакомиться в ИРЦ (Адрес: 100125, г.Ташкент, улица Дўрмон, д. 33. Тел./факс: (+99871) 263-32-54).

Автореферат диссертации разослан «15» декабря 2022 г.  
(реестр протокола рассылки № 10 от 15 декабря 2022 г.).



**Х.Б. Ашуров**  
председатель Научного совета по присуждению учёных степеней, д.т.н, профессор

**И.Д. Ядгаров**  
учёный секретарь Научного совета по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., старший научный сотрудник.

**Б.Е. Умирзаков**  
председатель научного семинара при Научном совете по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., профессор

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

**Актуальность и востребованность темы диссертации.** В настоящее время особое значение в мире уделяется вопросам исследования процессов взаимодействия атомов с двумерным (2D) материалом графеном, состоящим из атомов углерода. На сегодняшний день в развитых странах благодаря двумерной структуре и уникальным физико-химическим свойствам графен планируется использовать в области нанoeлектроники, биологической инженерии, композитных материалов и хранения энергии. В связи с этим особое внимание уделяется исследованию процессов адсорбции и окисления графена в результате взаимодействия атомов водорода и углерода с графеном.

Во всем мире графен и углеродные нанотрубки появляются как новые классы углеродных материалов, и проводятся научные исследования, направленные на их использование в качестве важных добавок для нового поколения оптически прозрачных электронных проводящих пленок для солнечных батарей. В этом направлении, в том числе путем моделирования процесса бомбардировки атомами графеновых и углеродных наноструктур, преобладают исследования по определению новых структур наноматериалов высокой точности. В то же время моделирование динамических процессов взаимодействия атомов водорода и углерода с поверхностью свободного графена на основе метода молекулярной динамики является одной из актуальных задач.

В Республике Узбекистан растет внимание к развитию перспективных направлений фундаментальных и прикладных исследований, в частности, большое внимание уделяется созданию новых наноматериалов, исследованию их фундаментальных физических свойств и применению полученных результатов на практике. В стратегии дальнейшего развития Республики Узбекистан на 2017-2021 годы определены задачи "по стимулированию научно-исследовательской и инновационной деятельности, разработке эффективных механизмов внедрения научных и инновационных достижений на практике". При реализации этих задач, в частности, в результате взаимодействия атомов водорода и углерода с графеном, важно определить механизмы адсорбции на поверхности графена, прохождения атомов, распыления.

Данная работа соответствует задачам, предусмотренным в Указе Президента Республики Узбекистан № УП-4947 «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан» от 7 февраля 2017 года<sup>1</sup>, в Постановлениях Президента Республики Узбекистан № ПП-1442 «О приоритетных направлениях развития индустрии Республики Узбекистан на 2011-2015гг.» от 15 декабря 2015г., № ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии Наук, организаций, управления,

---

<sup>1</sup> Стратегия действия 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

и финансирования научной деятельности» от 17 февраля 2017 года, а также в других нормативно-правовых документах, принятых в данной сфере.

**Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики Узбекистан.** 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, E.Despiau-Pujo, A. Davydova, S. A. Bhuyan, X. Qin, W. Yan (Китай), F. M. Peeters, S. Yu. Davydov, S.V. Dmitriev, A.B. Елецкий, Ю.А. Баимовой (Россия).

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 И.Д., PhD Алябьев Д.В. исследовали процессы взаимодействия атомов и кластеров с углеродными наноструктурами как теоретическими методами, так и методами математического моделирования.

В то же время процесс взаимодействия атомов водорода и углерода с поверхностью графена изучен недостаточно.

**Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертационная работа.** Диссертационное исследование выполнено в рамках плана научно-исследовательских работ следующего 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 атомов водорода и углерода с графеном, процессов осаждения негидрированного и гидрированного атомов углерода на графеновый лист.

**Задачи исследования:**

определение влияния дефектов на стабильность листа нанографена;

установление влияния наличия вакансий, дивакансий на процессы распыления, осаждения, прохождение сквозь графена и рассеяние атомов углерода на графен;

выявление зависимости минимальной кинетической энергии атомов углерода для распыления графена от угла падения;

выявление закономерностей процессов осаждения гидрированного и негидрированного атома углерода на графен.

**Объектами исследования** являются атомы водорода, углерода, гидрированные атомы углерода, графен.

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

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

**Научная новизна исследования** заключается в следующем:

установлено, что потеря структурой нанографена краевых атомов не оказывает существенного влияния на стабильность этой структуры;

получено, что наличие дефектов в виде вакансий в нанографене оказывает существенное влияние на процесс рассеяния, главным образом на процессы адсорбции и прохождения (сквозь нанографен) рассеянных атомов;

установлены зависимости минимальной кинетической энергии атомов углерода для распыления графена от угла падения вдоль armchair- и zigzag-направлений.

установлено, что максимальная вероятность хемосорбции C, CH, CH<sub>2</sub> и CH<sub>3</sub> на графене наблюдается при энергии осаждения около 2.3 эВ.

определено, что анализ процессов осаждения гидрированных атомов углерода (CH, CH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>) на нанографен показал, что хемосорбция таких объектов обратно зависима от степени гидрированности атомов углерода.

**Практические результаты исследования** заключаются в следующем:

разработаны геометрические модели листов (нано)графена, проведены модельные эксперименты по рассеянию атомов водорода и углерода на графене;

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 исследования** обосновывается применением общепринятых потенциалов REBO и AIREBO для углерод-углеродных и углерод-водородных взаимодействий, точность которых подтверждена 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 связана с выявлением характерных особенностей процессов взаимодействия атомов водорода и негидрированного и гидрированного атомов углерода с графеном.

Практическая значимость результатов исследования связана с тем, что результаты, полученные при математическом моделировании процессов взаимодействия атомов водорода и углерода с графеном, способствуют

стимулированию и разработке новых конструкционных материалов в современных элементах микро- и нанoeлектроники.

**Внедрение результатов исследования.** На основе результатов изучения процессов взаимодействия атомов водорода и углерода с графеном, процессов осаждения негидрированного и гидрированного атомов углерода на графеновым листом:

Результаты определения максимальной вероятности хемосорбции C, CN, CH<sub>2</sub> и CH<sub>3</sub> в графене и уменьшение средней энергии связи атомов углерода с увеличением количества дефектов в нанографене 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<sub>3</sub>B<sub>5</sub>» (Справка № 01/9-14-2153, Ташкентского государственного технического университета от 28 июля 2022 года). Использование научных результатов позволило изучить свойства наноразмерных систем и углубить знания по фундаментальным закономерностям.

Определение связи между минимальными кинетическими энергиями падающих атомов и углами падения для распыления графена в результате падения атомов углерода на поверхность графена было использовано в Проекте № ОТ-Ф2-52 «Исследование механизмов влияния контакта с окружающей атмосферой и различными материалами поверхности наночастиц и нанородов оксида цинка на их оптические и электрофизические свойства» (Справка № 2/1255-2098 Академия Наук Республики Узбекистан от 29 августа 2022 года). Использование научных результатов позволило эффективно анализировать и оценить механизмы образования дефектов при синтезе наноструктурированных материалов.

**Апробация результатов исследования.** Результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 5 международных и 2 республиканских конференциях.

**Публикация результатов исследования.** Результаты, полученные по теме диссертации, изложены в 15 научных трудах, в том числе 1 в зарубежных и 5 в республиканских журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан 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, приложения, заключения и списка литературы включая 41 рисунков и 9 таблиц. Текст диссертации изложен на 105 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.

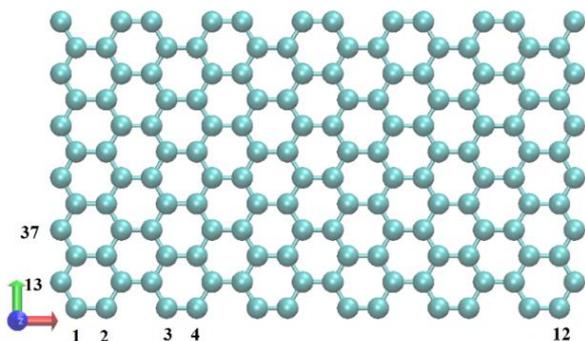
В первой главе диссертации **«Анализ литературных источников по тематике диссертации»** приведена общая классификация графена. Анализ литературы по компьютерному моделированию взаимодействия атомов с графеном показывает, что изучение графена является одной из важнейших задач физика твердого тела. Это связано с уникальными свойствами этой структуры. Графен — это «умный» материал, который хорошо подходит для многих передовых промышленных приложений; различные аспекты, связанные с производством графена, свойствами и реальными приложениями, необходимо дополнительно изучить, чтобы сделать графен практически применимым материалом.

Из обзора следует, что, несмотря на ряд теоретических и экспериментальных работ по взаимодействию атомов с графеном, нет полного понимания механизмов адсорбции, отскакивания, разрушения в структуре, проникновения, связывания атомов с графеном.

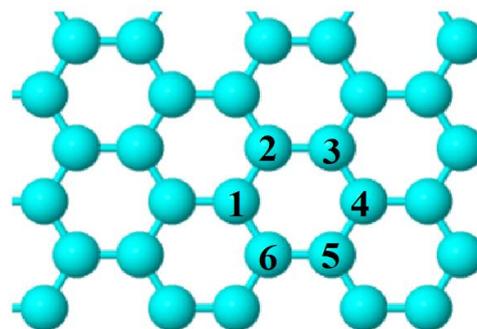
Во второй главе **«Методы компьютерного моделирования взаимодействия низкоэнергетических атомов водорода с графеном»** приводится краткий обзор основных подходов в моделировании физических процессов, связанных с вычислительными методами. Приведено краткое описание пакета программа для молекулярной динамики LAMMPS, т. н. потенциалы взаимодействия, ансамбли и термостаты, периодические граничные условия. Здесь вводится т.н. «функция корреляции», описывающая обменные электрон - электронные взаимодействия. Приведено краткое описание «классических» алгоритмов расчета атомно-молекулярных систем на основе уравнений Ньютона. Кратко описана последовательность создания модельной системы и задания начальных и граничных условий (выбор модельного потенциала взаимодействия, задание начальных координат атомов структуры, «термолизация» структуры – задание начальных скоростей атомов, задание периодических граничных условий).

В третьей главе **“Компьютерное моделирование рассеяния атомов водорода и углерода на графене”** приведено компьютерное моделирование дефектов в нанографенах. Нанографен моделировался из 144 атомов углерода (рис.1), расположенных в одной плоскости и в соответствующей для графенов конфигурации атомов углерода с постоянной решётки 2.46 Å. (нумерация

атомов идет снизу – слева направо). Средняя энергия когезии атомов листа – 6.81 эВ. Наличие дефектов моделировалось как последовательное изъятие атомов углерода из структуры графена в виде точечных вакансий с их разными комбинациями. Точечный дефект моделировался следующим образом: вакансии атомов постепенно охватывают одну шестиугольную ячейку графена и количество вакансий бралось от 1 до 6 (см. атомы графена, помеченные цифрами от 1 до 6, на рис.2).



**Рис.1.** Нанографен из 144 атомов углерода, расположенных в одной плоскости и в соответствующей для графенов конфигурации атомов углерода с постоянной решётки 2.46 Å. (нумерация атомов идет снизу – слева направо).

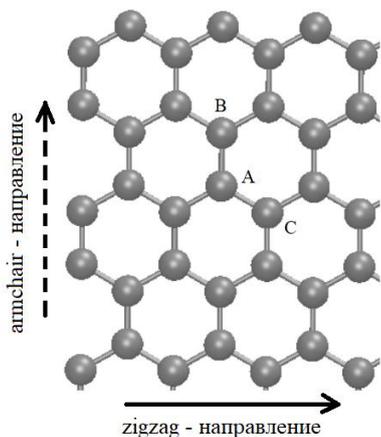


**Рис.2.** Участок идеальной графеновой решётки, цифрами указаны «помеченные» атомы, которые последовательно удалялись из графена, для задания дефектов;

Следует отметить, что согласно нашим расчетам гексагональная структура нанографена оказалась достаточно сохраняемой: хотя в нанографене и возникали дефекты, атомы, как правило, практически не смещались.

Было рассмотрено влияние вакансий и дивакансий на скользящее рассеяние атомов углерода на графене. Молекулярная модель бездефектного графена прямоугольной формы, состоящая из 112 атомов углерода в плоской гексагональной упаковке, строилась с наложением периодических условий на граничные атомы вдоль плоскости этой структуры. Равновесная структура и соответствующая энергия когезии молекулярной модели графена находились методом минимизации энергии, и было получено, что расстояние между ближайшими атомами равно 1.42 Å, а энергия когезии  $E_h$  каждого атома графена равна 7.395 эВ. Вакансия определялась изъятием одного атома из графена, а дивакансия задавалась как изъятие двух ближайших атомов, при этом было рассмотрено изъятие двух атомов вдоль *armchair*-направления (такую дивакансию в дальнейшем называем *a*-дивакансией) и вдоль *zigzag*-направления (*z*-дивакансия). Дефекты *a*-дивакансия и *z*-дивакансия структурно тождественны друг другу и различаются лишь ориентацией к направлению скользящего падения атомов углерода, рассматриваемого в дальнейшем (см. рис.3). После изъятия соответствующих атомов снова использовали метод минимизации энергии для нахождения равновесных структур и энергии когезии при наличии вакансии и дивакансии. Было

получено, что при наличии вакансии три атома ближайšie к вакансии имеют  $E_h=4.917$  эВ, у 14 атомов энергия когезии изменилась более чем на 0.01 эВ, а у оставшихся менее чем на 0.01 эВ, суммарное уменьшение энергии когезии всей структуры равняется 7.526 эВ. При наличии дивакансии четыре ближайших к ней атома имеют  $E_h=4.917$  эВ, у 13 атомов энергия когезии изменилась более чем на 0.01 эВ, а у оставшихся менее чем на 0.01 эВ, суммарное уменьшение энергии когезии всей структуры равняется 10.048 эВ.



**Рис. 3.** Участок бездефектного графена с указанными извлекаемыми атомами для образования вакансии (атом А), а-дивакансии (атомы А и В), z-дивакансии (атомы А и С) и характерными для графена направлениями: armchair- и zigzag-направлениями. Указанное zigzag-направление является направлением скользящего падения атомов углерода.

В результате наличия вакансий и дивакансий наблюдается распыление и осаждение графена (см. Таблицу №1), область недефектности графена увеличивается, и если даже графен не распылялся, то один из его атомов может стать адатомом к графену, т.е. не участвовать в идеальной структуре графена. Рассеиваемые атомы, которые связались с графеном, обычно становятся адатомами к графену. Падающие атомы благодаря вакансиям и дивакансиям проходят сквозь графен или, что не часто, отражаются назад (см. Таблицу №1). Отметим, что такой процесс как прохождение падающего атома углерода сквозь бездефектный графен без распыления указан в литературе, где также указаны случаи образования вакансий; благодаря же вакансиям и дивакансиям такой процесс становится намного более вероятным.

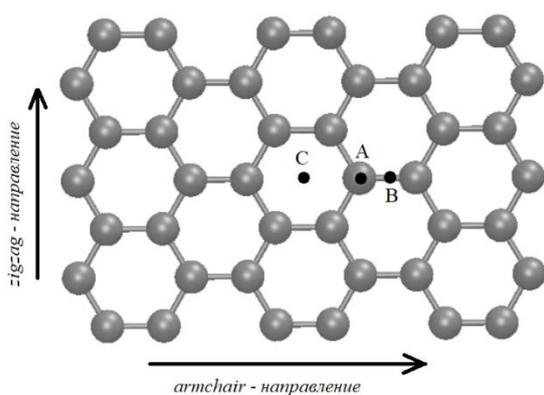
Таблица №1

Результат рассеяния 100 атомов углерода с энергией 43.5 эВ под углом 22° в zigzag-направлении на графене без дефектов, с вакансиями и дивакансиями.

Вид дефекта	Количество атомов углерода			
	Распыленные атомы графена	Связавшиеся с графеном	Прошедшие сквозь графен	Рассеянные атомы
нет дефектов	0	0	0	100
вакансия	9	28	4	68
а-дивакансия	4	39	6	55
z-дивакансия	8	17	31	52

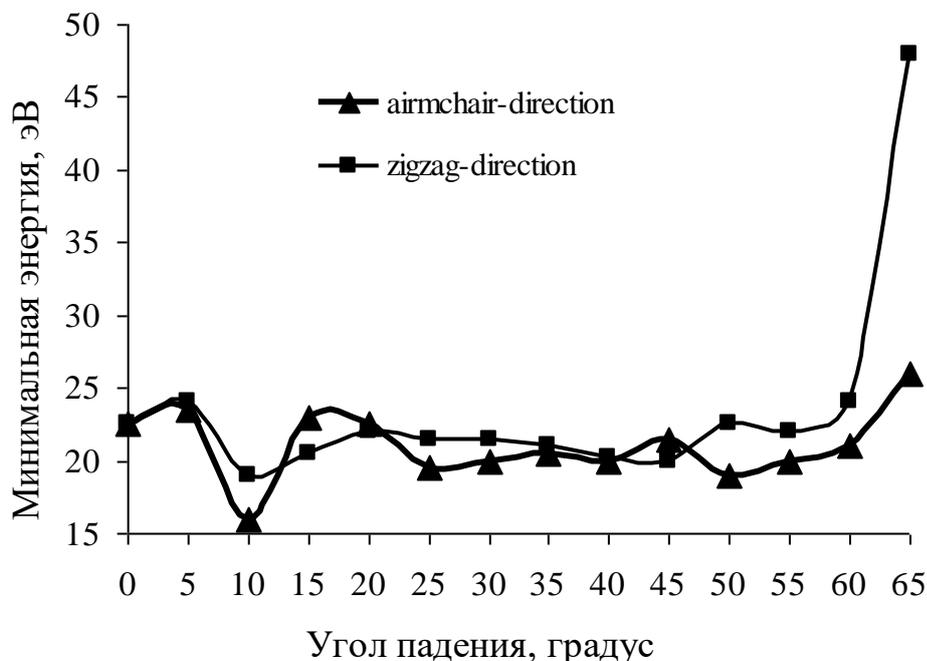
Из таблицы №1 следует, что наличие вакансий, дивакансий, а также ориентация дивакансии к направлению падающих атомов углерода существенно сказываются на процессах распыления, осаждения, на прохождении сквозь графен и рассеянии назад налетающих атомов углерода при скользящем падении.

Была рассмотрена зависимость минимальной кинетической энергии атомов углерода для распыления графена от угла падения. Молекулярная модель графена прямоугольной формы, состоящая из 112 атомов углерода в плоской гексагональной упаковке, строилась с наложением периодических условий на граничные атомы вдоль плоскости этой структуры. (REBO), которая хорошо описывает углеродные структуры. После того как была получена молекулярная модель графена, разогретого до 300 К, изучались процессы распыления графена и зависимость этих процессов от угла падения атома углерода на графен и соответствующей минимальной кинетической энергии, необходимой для распыления. Распыление определяется как потеря графеном одного из своих атомов. Если атом углерода падает на избранные места графена, а именно: атом графена, точную середину между двумя ближайшими атомами графена или геометрическую середину гексагональной ячейки (см. рис.4). Чтобы не быть привязанными к избранным местам графена, мы для каждого значения энергий брали 100 падений атомов углерода на случайным образом выбранную точку поверхности графена, и такой подход более соответствует лабораторным экспериментам. Сначала была определена минимальная кинетическая энергия для распыления при нормальном падении атома углерода на графен, и эта энергия оказалось равной 22.5 эВ. Затем меняли угол падения  $\beta$ , отмеряемый от нормали в градусах, с  $5^\circ$  до  $65^\circ$  с шагом  $5^\circ$  вдоль двух характерных для графена направлений: *armchair* и *zigzag*(рис.4).



**Рис. 4.** Участок графена с избранными точками: *A* – атом графена, *B* – точная середина между двумя ближайшими атомами графена и *C* – геометрическая середина гексагональной ячейки.

Шаг изменения энергий падающих атомов углерода при каждом угле падения составлял 0.5 эВ, выбирали такое значение энергии, с которого начинается распыление графена, и эта энергия считалась за минимальную энергию, обозначаемую в дальнейшем как  $E_{a,z}(\beta)$ , где  $\beta$  – указывает на угол падения, а один из индексов указывает на направление падения по первой букве названия этого направления. Эти минимальные энергии в зависимости от угла падения приведены на рис. 5.

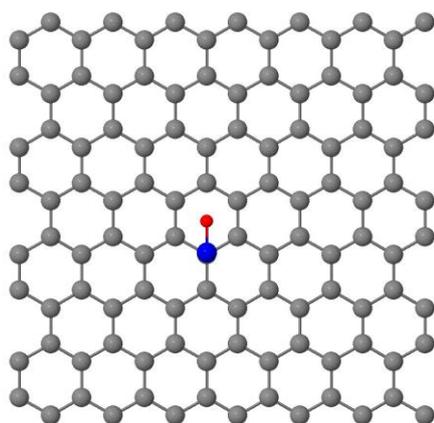


**Рис. 5.** Графики зависимости минимальной кинетической энергии атомов углерода для распыления графена от угла падения вдоль armchair- и zigzag-направлений, помеченные треугольниками и квадратами соответственно.

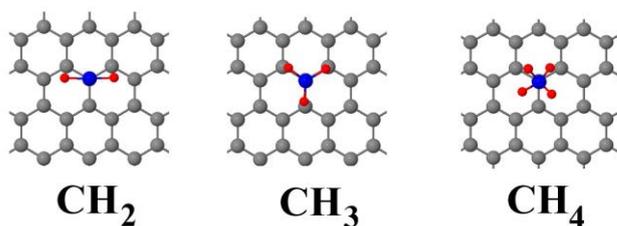
Из рис. 5 видно, что имеется хорошо выраженный минимум в зависимости минимальных энергий для распыления, приходящийся на 10° для armchair- и zigzag-направлений, но более сильно выраженный для armchair-направления, т.к. разность  $E_a(5^\circ)-E_a(10^\circ)= 7.5$  эВ, а разность  $E_z(5^\circ)-E_z(10^\circ)=5$  эВ. В общем  $E_a(\beta)$  и  $E_z(\beta)$ , хотя и отличаются друг от друга, однако слабо зависят от угла падения, когда он меняется от 5° до 60°. Углы падения от 60° до 90°, измеряемые от нормали (т.е. 0° до 30°, если измерять от поверхности графена), принято считать скользящими углами падения, такие углы, как правило, не используют для распыления. Отметим, что  $E_z(65^\circ)/E_a(65^\circ)=1.85$ , что объясняется тем, что вдоль zigzag-направления атомы графена расположены более плотно, чем вдоль armchair-направления, и более плотное расположение атомов сильно препятствует распылению графена при скользящих углах.

В четвертой главе диссертации «Компьютерное моделирование рассеяния атомов водорода и углерода на графене» приводятся результаты исследования

влияния процессов осаждения гидрированного и негидрированного атома углерода на графен. С помощью программы VMD получены исходные структуры. В расчетах использовался потенциал Бреннера второго поколения (REBO), который может очень хорошо описывать углеродные и водородно-углеродные структуры. Построены компьютерные модели атома углерода с разной степенью его гидрирования, а именно метина  $\text{CH}$ , метилена  $\text{CH}_2$ , метила  $\text{CH}_3$  и метана  $\text{CH}_4$ . Пример всех рассмотренных молекул, адсорбированных на графене, представлен на рис. 6. Согласно компьютерному моделированию, расстояние между атомами в метине составляет  $1.09 \text{ \AA}$ , энергия когезии атома водорода составляет  $2.263 \text{ эВ}$ .



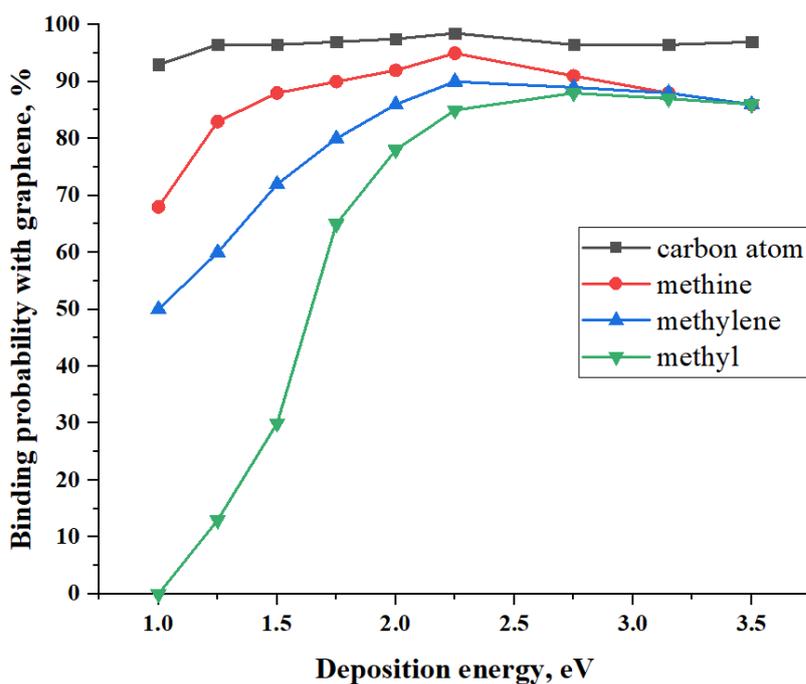
**Рис. 6.** Графеновая бездефектная имитационная ячейка квадратной формы с поглощенным атомом водорода (метин). Часть моделирующей ячейки с метиленом, метилом и метаном. Серые кружки — атомы углерода графена; красные кружки — атомы водорода, а синий кружок — атом углерода с поглощенным водородом.



В метиле атомы водорода расположены на одной линии с противоположных сторон от атома углерода на расстоянии  $1.105 \text{ \AA}$  от атома углерода, а энергия сцепления атомов водорода равна  $2.117 \text{ эВ}$ . Метил представляет собой плоский прямолинейный треугольник, в середине которого расположен атом углерода, а по углам расположены атомы водорода. Расстояние между атомами углерода и водорода составляет  $1.093 \text{ \AA}$ , а энергия когезии атома водорода составляет  $2.229 \text{ эВ}$ . Метан представляет собой прямолинейный твердый тетраэдр, с атомом углерода в середине и атомами водорода в его углах. Расстояние между атомами углерода и водорода составляет  $1.089 \text{ \AA}$ , а энергия когезии атома водорода равна  $3.637 \text{ эВ}$ , что согласуется с экспериментальными данными и получены на основе критерия наилучшего совпадения расчетных и экспериментальных значений. После построения компьютерных моделей свободных гидрированных молекул  $\text{CH}$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_4$  и бездефектного графена структуры нагревают до  $300 \text{ К}$ . Затем моделируется процесс осаждения гидрированных и дегидрированных атомов

углерода ( $E = 1.0, 1.2, 1.5, 2.3$  и  $3.1$  эВ) на поверхность графена. Поскольку этот процесс является статистическим при комнатной температуре, место осаждаемой молекулы на графене при каждой энергии осаждения исследуется для 100 численных прогонов. Процесс осаждения молекулы носит случайный характер. Начальная ориентация молекул  $\text{CH}$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_4$  относительно графена также задается случайным образом.

По результатам компьютерного моделирования энергия связи одиночного атома углерода, метина, метилена и метила составляет более 1 эВ. Это соответствует хемосорбции, что означает, что химические связи образуются за счет неспаренных валентных электронов падающих частиц и бездефектного графена. Метан не имеет неспаренных валентных электронов и в исследованном диапазоне энергий осаждения его хемосорбции на графене не наблюдается. Вероятность физической адсорбции метана при энергии связи менее 1 эВ подробно обсуждалась в литературе методами теории функционала плотности. Зависимости вероятности связывания осажденных частиц  $\text{C}$ ,  $\text{CH}$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}_3$  представлены на рис. 7. Видно, что эти зависимости возрастают с ростом энергии осаждения до 2.3 эВ и зависят от степени гидрирования атома углерода: чем больше степень гидрирования, тем больше меньше вероятность связывания.



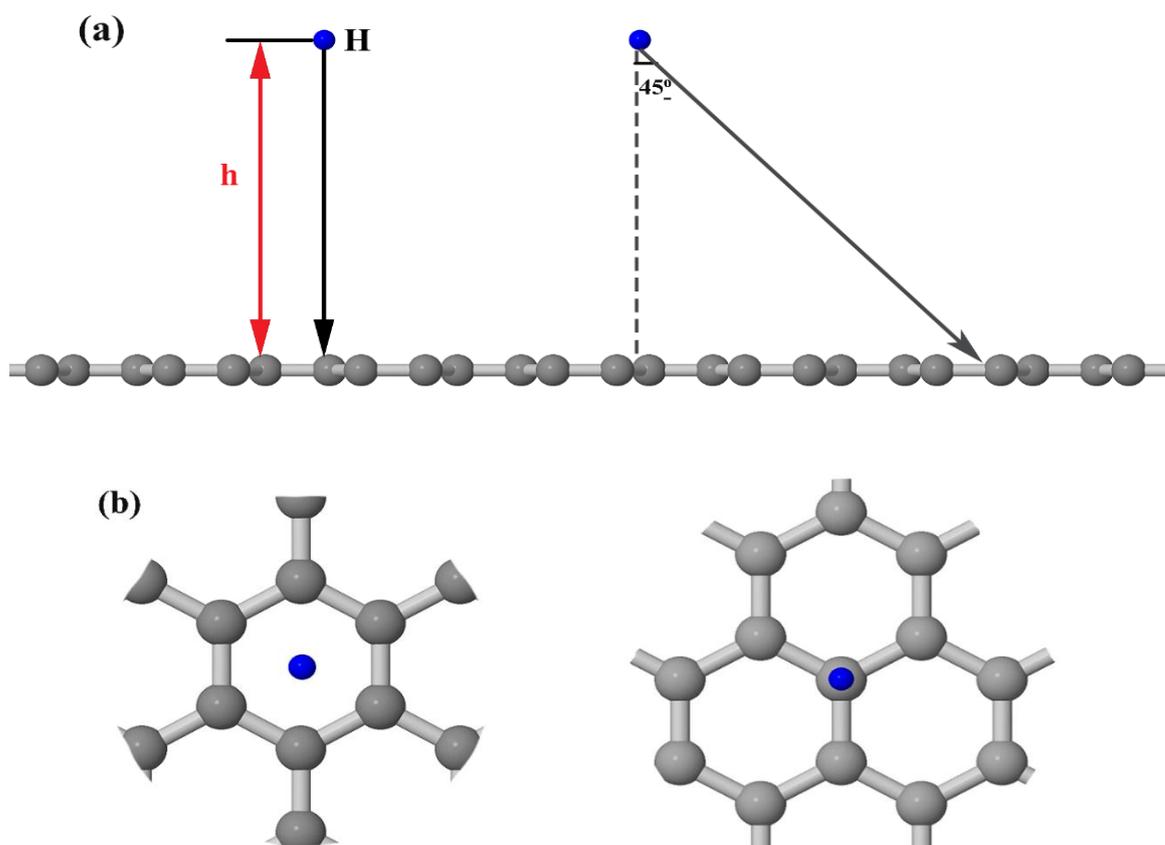
**Рис. 7.** Вероятность связывания осаждения атома/молекулы на графене как функция энергии осаждения.

Таким образом, методом молекулярной динамики установлено, что процессы осаждения гидрированных и дегидрированных атомов углерода на бездефектный графен зависят от степени гидрирования атомов углерода. Показано, что чем выше степень гидрирования атома углерода, тем меньше вероятность его хемосорбции на графене. Метан как полностью

гидрированный атом углерода не подвергается хемосорбции на графене при энергиях осаждения от 1 до 3.1 эВ.

Было рассмотрено влияние температуры графена и угла падения на процесс рассеяния низкоэнергетических атомов водорода на графен. Моделирование проводилось с помощью свободно распространяемого пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) с эмпирическим потенциалом межатомного взаимодействия AIREBO. LAMMPS- это классический код моделирования молекулярной динамики, ориентированный на моделирование материалов. Потенциал AIREBO используется для описания связей С – С и С – Н в графене, а также несвязанных взаимодействий С – С и С – Н.

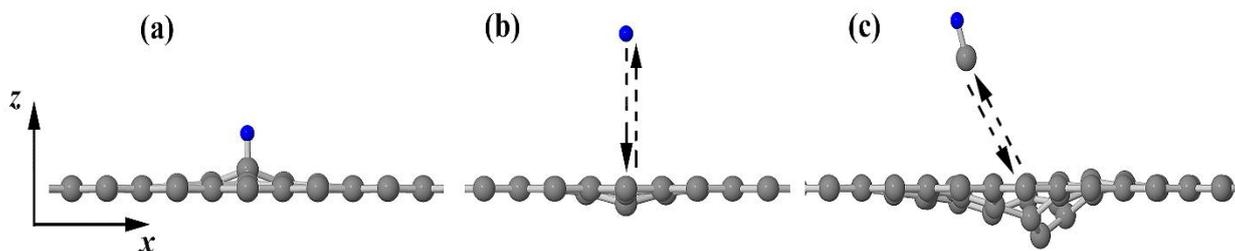
Графеновая структура размером  $100 \times 100 \text{ \AA}$  состоит из 3936 атомов углерода, которые располагаются в вершинах гексагональных плоских ячеек на расстоянии  $1.42 \text{ \AA}$  друг от друга. Периодические граничные условия прикладывались вдоль трех направлений. Причем, по осям  $x$  и  $y$ , периодическое повторение ячейки моделирования осуществлялось так, чтобы воспроизводился бесконечный лист графена. В направлении  $z$  ячейка периодичности была выбрана достаточно большой, так, чтобы позволить падение атома водорода с некоторой высоты.



**Рис.8.** (а) Схематическое изображение падения атома водорода на графеновую структуру под прямым углом ( $0^\circ$ ) и под углом  $45^\circ$ ; (б) Прицельная точка падения атома водорода: по центру гексагона и над атомом в структуре графена.

На рис. 8а схематично показано направление падения атома водорода на поверхность графена при двух углах:  $0^\circ$  и  $45^\circ$ . На рисунке 8b показана прицельная точка падения водорода в центре гексагона или над атомом углерода. Расстояние от поверхности графена до атома водорода равно  $h = \{10, 20\}$  Å. Энергии атомов подбирались величиной от 0.1 эВ до 500 эВ с шагом 5эВ. Структура подводилась к заданной температуре 0, 300 или 600 К с применением микроканонического ансамбля NVE. В процессе моделирования атомы Н осаждались на графен в течении времени от 1 пс до 10 пс. Здесь исследован процесс взаимодействия атома водорода с плоскостью графена, в результате чего может быть реализован один из сценариев – адсорбция на листе, прохождение атома водорода с повреждением графена, отскок атома водорода от поверхности графена, разрушение структура графена. Конфигурации моделирования были визуализированы с помощью программного обеспечения Jmol.

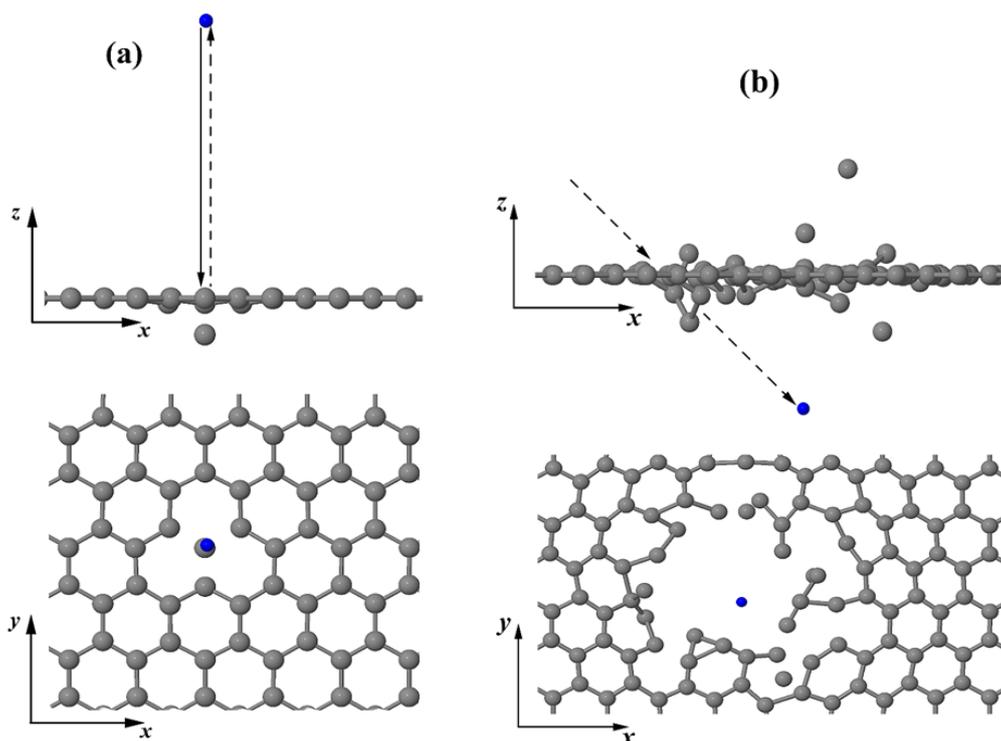
На рис. 9 приведены результаты исследования процессов, наблюдаемых при падении атома водорода на поверхность графена по нормали и под углом  $45^\circ$  при различных энергиях. Процесс адсорбции атомов водорода по прицельной точке над атомом углерода в диапазоне энергий с 1.5 эВ до 4.5 эВ показан на рис.9а. Обнаружено, что при падении атома водорода под углом  $45^\circ$  на графенную структуру, на обоих прицельных точках процесс адсорбции не наблюдается.



**Рис. 9.** (a) – процесс адсорбции под прямым углом; (b) – процесс отскакивания под прямым углом; (c) – процесс отскакивания с захватом атома углерода под углом  $45^\circ$  при энергии 25 эВ. Серые кружки - атомы углерода; синие - атомы водорода;

В соответствии с результатами расчетов, процесс отскакивания атома водорода при нормальном падении на графен, наблюдался в диапазоне энергий от 4.6 эВ до 56.7 эВ (Рис 9b). В случае падения атома водорода с энергией 25 эВ под углом  $45^\circ$  наблюдался процесс отскакивания с адсорбцией (Рис 9c).

Анализ результатов показал, что процесс разрушения в структуре графена наблюдался при нормальном падении атомов водорода по прицельным точкам над атомом графена в пределах энергий от 57 эВ до 500 эВ (Рис 10a,b), а при падении атомов водорода под углом  $45^\circ$  по прицельной точке в центре гексогона, разрушение структуры графена не обнаружилось.



**Рис.10.** Визуальные представления: (а) – процесс разрушения при падении атома водорода под прямым углом; (b) – процесс разрушения + прохождения при падении под углом 45°.

Зависимости этих расчетов от температуры графена для атомов водорода, падающих по нормали на атом углерода приведены в таблице 2.

Таблица 2.

Влияние точки падения и температуры поверхности графена на вероятности адсорбции, отскакивания и разрушения структуры графена, при падении атомов Н по нормали на монослой чистой поверхности графена.

Температура, К	Промежуток энергии для процесса адсорбции, эВ	Промежуток энергии для процесса отскакивания, эВ	Промежуток энергии для процесса разрушения, эВ	Разница, %
0	1.5 ÷ 4.5	4.6 ÷ 56	56.2 ÷ 500	10.5
300	1.7 ÷ 4.1	1.8 ÷ 73	73.1 ÷ 500	8
600	1.8 ÷ 3.7	1.9 ÷ 77	2 ÷ 500	17

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Показано, что потеря структурой нанографена краевых атомов не оказывает существенного влияния на стабильность этой структуры. Согласно расчетам, гексагональная структура дефектного нанографена оказалась достаточно сохраняемой, атомы, как правило, практически не смещались.

2. Определено, что наличие вакансий и дивакансий, а также ориентация дивакансии к направлению падающих атомов углерода существенно сказываются на процессах распыления, осаждения, на прохождение сквозь графен и рассеяние назад налетающих атомов углерода при скользящем падении.

3. Установлены зависимости минимальной кинетической энергии атомов углерода для распыления графена от угла падения вдоль armchair- и zigzag-направлении.

4. Определено, что энергия связи одиночного атома углерода, метина, метилена и метила составляет более 1 эВ. Это соответствует хемосорбции, что означает, что химические связи образуются за счет неспаренных валентных электронов падающих частиц и бездефектного графена.

5. Установлено, что процессы осаждения гидрированных и дегидрированных атомов углерода на бездефектный графен зависят от степени гидрирования атомов углерода. Показано, что чем выше степень гидрирования атома углерода, тем меньше вероятность его хемосорбции на графене.

6. Установлено, что максимальная вероятность хемосорбции C, CH, CH<sub>2</sub> и CH<sub>3</sub> на графене должна наблюдаться при энергии их осаждения около 2.3 эВ.

7. Обнаружено, что при падении атома водорода под углом 45° на графенную структуру, на обоих прицельных точках процесс адсорбции не наблюдается. Процесс отскакивания атома водорода при нормальном падении на графен наблюдался в диапазоне энергий от 4.6 эВ до 56.7 эВ. Анализ результатов показал, что процесс разрушения в структуре графена наблюдался при нормальном падении атомов водорода по прицельным точкам над атомом графена в пределах энергий от 57 эВ до 500 эВ.

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

---

**INSTITUTE OF ION-PLASMA AND LASER TECHNOLOGIES**

**JABBOROV KHAYITMUROD ISHMUMIN O'G'LI**

**COMPUTER SIMULATION OF THE INTERACTION OF LOW-ENERGY  
CARBON AND HYDROGEN ATOMS WITH THE SURFACE OF FREE  
GRAPHENE**

**01.04.04 – Physical electronics**

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

**Tashkent – 2022**

**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 B2022.3.PhD/FM742.**

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](http://www.iplt.uz)) and on Information-educational portal «ZiyoNet» (<http://www.ziynet.uz>).

**Scientific supervisor:**

**Djumanov Jamoljon Khudoykulovich**  
Doctor of Technical Sciences, professor

**Official opponents:**

**Maksimov Sergey Yevlantievich**  
Doctor of Physical and Mathematical Sciences

**Murzaev Ramil Tukhfatovich**  
Candidate of Physical and Mathematical Sciences

**Leading organization:**

**Tashkent state technical university named after Islam Karimov**

The defense will take place on «27» December 2022 at 14<sup>00</sup> 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](mailto: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 № 10) (Address: 100125, 33, Durmon yuli str., Tashkent, Uzbekistan. Phone: (+99871) 262-31-69).

The abstract of the dissertation is sent out on «15» December 2022.

(Mailing report № 10 on «15» December 2022).



**Kh.B. Ashurov**  
Chairman of scientific council on award of scientific degrees, doctor of technical science, professor

**I.D. Yadgarov**  
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 dissertation)

**The aim of the research** is to study the dynamic processes of interaction of hydrogen and carbon atoms with graphene, the deposition of non-hydrogenated and hydrogenated carbon atoms on a graphene sheet.

**The objectives of the research** are as follows.

- determination of the effect of defects on the cohesion energies of nanographene sheet atoms;
- determination of the presence of vacancies, divacancies on the processes of sputtering, deposition, passage through graphene and scattering of carbon atoms on graphene;
- identification of the dependence of the minimum kinetic energy of carbon atoms for graphene atomization on the angle of incidence;
- Identification of the deposition processes of hydrogenated and non-hydrogenated carbon atoms on graphene.

**The objects of the study** are hydrogen atoms, carbon atoms, hydrogenated carbon atoms, graphene.

**The subject of the study** are the coordinates, the velocities of atoms, the energies of interatomic interaction and the binding energies of atoms and graphene.

**The scientific novelty of the research consists of the following.**

- It was found that the average cohesion energy of carbon atoms in nanographene decreases monotonically with an increase in the number of defects;
- It was found that the presence of defects in the form of vacancies in nanographene has a significant effect on the scattering process, mainly on the processes of adsorption and passage (through nanographene) of scattered atoms;
- The dependence of the minimum kinetic energy of carbon atoms for graphene sputtering on the angle of incidence along the armchair and zigzag directions has been established;
- It was found that the maximum probability of C, CH, CH<sub>2</sub>, and CH<sub>3</sub> chemisorption on graphene is observed at a deposition energy of about 2.3 eV;
- An analysis of the processes of deposition of hydrogenated carbon atoms (CH, CH<sub>2</sub>, and CH<sub>3</sub>) on nanographene showed that the chemisorption of such objects is inversely dependent on the degree of hydrogenation of carbon atoms.

**Implementation of the research results.**

Based on the results of studying the processes of interaction of hydrogen and carbon atoms with graphene, the deposition of non-hydrogenated and hydrogenated carbon atoms on a graphene sheet:

The results of determining the maximum probability of chemisorption of C, CH, CH<sub>2</sub> and CH<sub>3</sub> in graphene and a decrease in the average binding energy of carbon atoms with an increase in the number of defects in nanographene were

used in the work of Project №. OT-F2-53: "Quantum-dimensional effects and electronic properties of two-layer nanoscale structures created on the surface and near-surface region of  $A_3B_5$  films" (Reference №. 01/9-14-2153, Tashkent State Technical University, dated July 28, 2022). The use of scientific results made it possible to study the properties of nanoscale systems and master the fundamental laws of physics.

The relationship between the minimum kinetic energies of incident atoms and the angles of incidence was determined, for graphene sputtering as a result of the fall of carbon atoms on the surface of graphene was used in the work of Project №. OT-F2-52 "Study of the mechanisms of influence of contact with the surrounding atmosphere and various materials on the surface of nanoparticles and oxide nanorods zinc on their optical and electrophysical properties" (Reference №. 2/1255-2098 of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan dated August 29, 2022) The use of scientific results made it possible to effectively analyze and evaluate the mechanisms of defect formation during the synthesis of nanostructured materials.

**The structure and volume of the dissertation.** The dissertation consists of Introduction, four Chapters, Conclusion and Reference. The dissertation volume is 105 pages.

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

**I бўлим (Часть I, Part I)**

1. Kh.I. Jabborov, A.N. Ulukmuradov, I.D.Yadgarov, N.I. Ibrokhimov. Effect of hydrogenation of carbon atom on its deposition on graphene // Letters on Materials, 12 (1), 2022 pp. 27-31. Scopus IF=1.7
2. Н.Ю. Тураев, В.Г. Стельмах, Х.И. Жабборов, Х.Ширинов. Зависимость минимальной кинетической энергии атомов углерода для распыления графена от угла падения // ДАН РУз., 2017 (2), сс. 108-111. [01.00.00, №7]
3. В.Г.Стельмах, А.А.Джурахалов, Х.И. Жабборов. Влияние вакансий и дивакансий на скользящее рассеяние атомов углерода на графене//Узбекский Физический журнал, 2016, Vol.18, №6, сс.378-380. [01.00.00, №5]
4. Х.И. Жабборов, Н.А. Сайфуллаева, В.Г. Стельмах, И.Д. Ядгаров. Компьютерное моделирование влияния гидрирования атома углерода при его осаждении на графен // Узбекский Физический журнал, 2019, Vol.21, №2, сс.107-110. [01.00.00, №5]
5. Б.Н. Рахимов, Х.И. Жабборов. Компьютерное моделирование рассеяние атомов водорода на графене // Потомки Мухаммеда аль-Хорезми научно-практический журнал. 2017. № 1(1). сс. 34-37. [05.00.00, № 10]
6. В.Г. Стельмах, И.Д.Ядгаров, А.М. Расулов. Х.И. Жабборов. Компьютерное моделирование дефекты и деформации в нанографенах // Научно-технический журнал ФерПИИ. 2017 Том. 21. № 4. [05.00.00, №20]

**II бўлим (Часть II, Part II)**

7. Х.И. Жабборов, И.Д. Ядгаров // Влияние температуры на взаимодействие атомов водорода с графеном.VIII международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии-ЛАПЛАЗ-2022». Сборник научных трудов. 22-25 март 2022 г. Москва. сс. 216.
8. Х.И.Жабборов, Ю.А.Баимова. Компьютерное моделирование процессов рассеяния при падении атома водорода под прямым углом // 51-я Международная Тулиновская конференция по Физике Взаимодействия Заряженных Частиц с Кристаллами. Москва, МГУ им М.В. Ломоносова, 24-26 мая 2022.
9. Х.Жабборов, В. Стельмах, И. Ядгаров. Влияние дефектов графена на осаждение атомов углерода // Роль молодёжи в развитии науки и образования. Материалы Республиканской научно-технической конференции. 2-часть. 23-ноября 2018 г. сс. 42.Ташкент.
- 10.Х.И. Жабборов, Ж.Х. Джуманов, И.Д.Ядгаров. Компьютерное моделирование осаждения атомов углерода на графен // Сборник

- тезисов докладов “Восьмая международная конференция по физической электронике IPES-8”. 23-24 сентября 2021 г. сс.55-56. Ташкент.
11. Х.И. Жабборов, Ж.Х. Джуманов, И.Д.Ядгаров. Компьютерное моделирование процессов адсорбция атомов водорода на поверхности графена // Яримўтказгичлар физикаси, микро- ва наноэлектрониканинг фундаментал ва амалий муаммолари” мавзусидаги I-халқаро анжуман материаллари. 28-29 октябрь 2021 йил. 146-147 бетлар. Тошкент.
  12. Х.И. Жабборов, Н.А. Сайфуллаева. Компьютерное моделирование распыления графена нормально падающими атомами углерода. 1-часть. Сборник докладов Республиканской научно-технической конференции «Роль информационно-коммуникационных технологий в инновационном развитии отраслей экономики». 14-15-март 2019 г. сс. 360-361. Ташкент.
  13. А.М. Расулов, В.Г. Стельмах, Х.И. Жабборов. Моделирование взаимодействия низкоэнергетическими атомами углерода с графеном // III- Международная научно-практическая конференция: “Современные материалы, техника и технологии в машиностроении”. Сборник научных статей. 19-21 апреля 2016г. сс. 81-83. Андижан.
  14. В.Г. Стельмах, Х.И. Жабборов. Графитсимон структурали кристалларда атомларнинг фазовий жойлашувини таъминлаш дастури // ЭҲМ учун яратилган дастурнинг расмий рўйхатдан ўтганлиги тўғрисидаги гувоҳнома. 24.03.2017 йил. № DGU 04319. Тошкент.
  15. Х.И. Жабборов, И.Д.Ядгаров, Ж.Х.Джуманов, Н.И. Иброхимов. Графен билан кичик энергияли водород атомларининг ўзаро таъсир жараёнини моделлаштириш учун дастур // ЭҲМ учун яратилган дастурнинг расмий рўйхатдан ўтганлиги тўғрисидаги гувоҳнома. 06.09.2021 йил. № DGU 12354. Тошкент.